



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ  
CENTRO DE TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA



PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**ANÁLISE E OTIMIZAÇÃO EXERGOECONÔMICA DE UM  
SISTEMA DE DESTILAÇÃO INDUSTRIAL PARA PRODUÇÃO DE  
BIOETANOL**

Lucas Bonfim Rocha

Engenheiro Químico, UEM, 2013

Orientadores: Prof. Marcelino Luiz Gimenes, Ph.D.

Prof. Dr. Sérgio Henrique Bernardo de Faria

Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Estadual de Maringá, como parte dos requisitos necessários para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Química, área de Processos de Separação.

Maringá – PR – Brasil

Agosto de 2015

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)  
(Biblioteca Central - UEM, Maringá, PR, Brasil)

R672a Rocha, Lucas Bonfim  
Análise e otimização exergoeconômica de um sistema de destilação industrial para produção de bioetanol / Lucas Bonfim Rocha. -- Maringá, 2015. xx, 156 f. : il. color., figs., tabs.

Orientador: Prof. Dr. Marcelino Luiz Gimenes.  
Coorientador: Prof. Dr. Sérgio Henrique Bernardo de Faria.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Maringá, Centro de Tecnologia, Departamento de Engenharia Química, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, 2015.

1. Aspen Plus. 2. Aspen Plus - Bioetanol. 3. Bioetanol. 4. Bioetanol - Sistema industrial. 5. Exergoeconomia. 6. Exergia. 7. Industria - Bioetanol. 8. MATLAB. 9. Simulação de processos. 10. Otimização de processos - Bioetanol. 11. Coluna de destilação. I. Gimenes, Marcelino Luiz, orient. II. Faria, Sérgio Henrique Bernardo de, coorient. III. Universidade Estadual de Maringá. Centro de Tecnologia. Departamento de Engenharia Química. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. IV. Título.

CDD 23.ed. 660.2812

AMMA-003116

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ  
CENTRO DE TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Esta é a versão final da Dissertação de Mestrado apresentada por Lucas Bonfim Rocha perante a Comissão Julgadora do Curso de Mestrado em Engenharia Química em 10 de agosto de 2015.

COMISSÃO JULGADORA



Prof. Dr. Marcelino Luiz Gimenes  
Orientador / Presidente



Prof. Dr. Sérgio Henrique Bernardo de Faria  
Coorientador



Prof. Dr. Laureano Jiménez Esteller  
Membro



Prof. Dr. Roger Josef Zemp  
Membro

*“Be the change you wish to be in the world”*

*Mahatma Gandhi*

*Dedico à minha mãe,  
Shirlei Terezinha Pereira,  
pessoa que mais admiro e tenho  
como exemplo, pois sem o seu  
amor, carinho e dedicação não  
chegaria aqui.*

## AGRADECIMENTOS

Antes e acima de tudo, a Deus.

A minha família, pelo seu amor incondicional, incentivo e apoio constantes a cada dia de minha trajetória. A cada vitória conquistada, a cada obstáculo vencido, vocês, mais do que ninguém, foram merecedores dos créditos.

Ao professor, tutor, coorientador e amigo professor Dr. Sérgio H. B. de Faria, por todo o apoio e pela proposta do tema estudado, no qual evoluímos as ideias em conjunto.

Ao meu orientador professor Dr. Marcelino L. Gimenes, que esteve sempre disposto a me auxiliar, dando todo o suporte e aconselhamento necessário.

Aos meus amigos e demais colegas de Mestrado pela convivência sempre tão agradável. Em especial: Caio Srutkoske, Rodrigo Orgeda, Thiago Cavali e Vandrê Tiski, que muito me apoiaram neste período e contribuíram no desenvolvimento do trabalho. A todos os docentes, técnicos e funcionários do Departamento de Engenharia Química da Universidade Estadual de Maringá, que contribuíram para minha formação acadêmica. Ao programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, em especial aos seus coordenadores professora Dr<sup>a</sup>. Gisella M. Zanin e professor Dr. Mauro A. S. S. Ravagnani, pelo auxílio e aconselhamento pessoal e profissional durante este período.

Ao grupo PET Engenharia Química (UEM) pela grande contribuição em minha formação profissional e aos demais membros do grupo.

Ao Escritório de Cooperação Internacional (ECI), pela aprovação da proposta de trabalho no edital de mobilidade discente para realização de um período de estância na Universitat Rovira i Virgili (URV).

Ao grupo de pesquisa SUSCAPE (improved process SUSTentability using Computer Aided Process Engineering tools) pelo aceite e recebimento por meio do professor Dr. Laureano J. Esteller. Aos demais membros pesquisadores do grupo, por seu acolhimento, amizade e auxílio durante a estadia em Tarragona.

Aos membros da banca avaliadora, por terem aceitado o convite de participar da correção e avaliação deste trabalho. Obrigado pela enriquecedora contribuição.

A CAPES, pela concessão da bolsa de estudo e pelo incentivo à pesquisa.

A todos que contribuíram, de forma direta ou indireta, para a realização deste trabalho. Meus sinceros agradecimentos.

# ANÁLISE E OTIMIZAÇÃO EXERGOECONÔMICA DE UM SISTEMA DE DESTILAÇÃO INDUSTRIAL PARA PRODUÇÃO DE BIOETANOL

**AUTOR: LUCAS BONFIM ROCHA**

**ORIENTADORES: PROF. MARCELINO LUIZ GIMENES, Ph.D.**

**PROF. Dr. SÉRGIO HENRIQUE BERNARDO DE FARIA**

Dissertação de Mestrado; Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química; Universidade Estadual de Maringá; Av. Colombo 5790, Bloco E - 46 - 09; CEP: 87020- 900 Maringá – PR, Brasil, defendida em 10 de agosto de 2015. 176 p.

## RESUMO

Entre todos os processos de separação industriais, a destilação é um dos maiores consumidores de energia. Assim se justifica a busca de métodos de otimização de energia para colunas de destilação. A otimização dos parâmetros tais como estágio de alimentação, razão de refluxo, número de estágios, pode ser obtida da análise do perfil de perdas de *exergia* da coluna, que por sua vez depende da determinação das propriedades termodinâmicas do conjunto de correntes no interior da coluna. Este trabalho tem por objetivo realizar a otimização *exergoeconômica* um sistema industrial de colunas de destilação capaz de produzir etanol hidratado, utilizando-se o software *Aspen Plus* para simulação do sistema em estudo com o método rigoroso *Radfrac* para resolução das equações MESH das colunas aplicando-se os modelos termodinâmicos apropriados. Os parâmetros de projeto e operação da coluna, já otimizada do ponto de vista energético, são então avaliados e capazes de possibilitar uma otimização econômica para novas condições de operação. Os resultados mostram que foi possível realizar a otimização termodinâmica das colunas de destilação, de forma que as especificações críticas do processo não foram violadas. O processo otimizado perde menos energia que o processo original, porém requer um maior investimento. Tal resultado nos direcionou a investigar se o processo é válido do ponto econômico. A avaliação *termoeconômica* do processo nos levou a concluir que neste trabalho, mesmo com o aumento do investimento para implantação de um processo de maior eficiência, este é repostado em tempo viável e proporciona uma contínua economia de gastos por requerer menos energia.

**EXERGOECONOMIC ANALYSIS AND OPTIMIZATION OF AN INDUSTRIAL  
DISTILLATION SYSTEM TO PRODUCE BIOETHANOL**

**AUTHOR: LUCAS BONFIM ROCHA**

**SUPERVISORS: PROF. MARCELINO LUIZ GIMENES, PhD.**

**PROF. Dr. SÉRGIO HENRIQUE BERNARDO DE FARIA**

Master Thesis; Chemical Engineering Graduate Program; State University of Maringá;  
Av. Colombo, 5790, BL E46 - 09; CEP: 87020-900 - Maringá - PR, Brazil, presented on  
10<sup>th</sup> of august, 2015, 176 p.

**ABSTRACT**

Among all industrial separation processes, distillation is one of the largest energy consumers. Hence the search for energy optimization methods for distillation columns is justified. The optimization of parameters such as feed stage, reflux ratio, number of stages, can be obtained from analysing the exergy losses profile of the column, which in turn depends on the determination of the thermodynamic properties of the set of streams inside the column. This study aims to realize the exergoeconomic optimization of an industrial system of distillation columns capable of producing hydrated ethanol, using the Aspen Plus software for simulation of the system under study with Radfrac as a rigorous method for solving the MESH equations of the columns applying the appropriate thermodynamic models. The design and operational parameters of the column, already optimized from an energy point of view, are then evaluated and able to allow an economic optimization to new operating conditions. The results show that it was possible to achieve the thermodynamic optimization of the distillation columns without violating the critical specifications of the process. The optimized process loses less energy than the original process, but requires greater investment. This result directed us to investigate if the process is valid economically. The thermoeconomic evaluation of the process led us to conclude that in this work, even with increased investment to implement a process of greater efficiency, it resets viable in time and provides a continuous cost savings by requiring less energy.

## ÍNDICE DE ILUSTRAÇÕES

<b>Figura 1.1:</b> Consumo dos principais combustíveis do mercado brasileiro, 2000 – 2011.8	
<b>Figura 2.1:</b> Sistema de destilação para produção de etanol hidratado – Configuração Industrial AA1D-B1B. ....	12
<b>Figura 2.2:</b> Correntes de entrada e saída de um estágio $j$ da coluna. ....	21
<b>Figura 2.3:</b> Balanço Material.....	24
<b>Figura 2.4:</b> Balanço Energético.....	24
<b>Figura 2.5:</b> Diagrama de Grassmann.....	25
<b>Figura 2.6:</b> Representação geral do balanço de exergia de um sistema ou processo. ...	26
<b>Figura 2.7:</b> História do termo exergia. ....	27
<b>Figura 2.8:</b> Componentes da exergia.....	29
<b>Figura 2.9:</b> Conteúdos exergéticos das correntes de entrada e de saída de uma coluna de destilação. ....	34
<b>Figura 2.10:</b> Fontes externas que fornecem as cargas térmicas na coluna. ....	35
<b>Figura 2.11:</b> Fluxos de entrada e saída no estágio $i$ de uma coluna de destilação. ....	37
<b>Figura 2.12:</b> Correntes para balanço de entalpia e entropia em cada estágio da coluna para separação Etanol/Água. ....	38
<b>Figura 2.13:</b> Perfil de perdas de <i>exergia</i> . ....	40
<b>Figura 2.14:</b> Variações das variáveis de custo para uma coluna de destilação. ....	52
<b>Figura 4.1:</b> Metodologia de análise <i>exérgica</i> para otimização.....	69
<b>Figura 4.2:</b> Zonas funcionais do sistema de destilação industrial. ....	74
<b>Figura 4.3:</b> Especificações gerais do processo. ....	75
<b>Figura 4.4:</b> Opções de cálculo selecionadas.....	76
<b>Figura 4.5:</b> Seleção dos componentes do processo. ....	76
<b>Figura 4.6:</b> Especificação dos modelos termodinâmicos. ....	77
<b>Figura 4.7:</b> Especificações gerais da simulação do processo. ....	78
<b>Figura 4.8:</b> Fluxograma do Sistema Simulado Completo. ....	78
<b>Figura 4.9:</b> Especificações para o algoritmo <i>RadFrac</i> . ....	79
<b>Figura 4.10:</b> Correntes de processo do bloco da zona funcional 1.....	79
<b>Figura 4.11:</b> Correntes de processo do bloco da zona funcional 2.....	80
<b>Figura 4.12:</b> Configuração da coluna AA1D. ....	80
<b>Figura 4.13:</b> Configuração da coluna B1B.....	81

<b>Figura 4.14:</b> Parâmetros da corrente de alimentação do vinho. ....	81
<b>Figura 4.15:</b> Parâmetros da corrente de alimentação do flegma. ....	81
<b>Figura 4.16:</b> Estágios de alimentação e retirada de produtos na coluna AA1D. ....	82
<b>Figura 4.17:</b> Estágios de alimentação e retirada de produtos na coluna B1B. ....	82
<b>Figura 4.18:</b> Apresentação dos resultados no simulador para a perda de <i>exergia</i> de cada estágio. ....	83
<b>Figura 4.19:</b> Seleção do perfil de perdas de <i>exergia</i> estágio a estágio da coluna. ....	83
<b>Figura 4.20:</b> Perfil de <i>exergia</i> perdida apresentado pelo simulador para a coluna AA1D. ....	84
<b>Figura 4.21:</b> Perfil de <i>exergia</i> perdida apresentado pelo simulador para a coluna B1B. ....	84
<b>Figura 4.22:</b> Sistema de <i>retrofit</i> proposto. ....	86
<b>Figura 4.23:</b> Diagrama de blocos do algoritmo desenvolvido no Matlab. ....	87
<b>Figura 5.1:</b> Variação do perfil de perdas de <i>exergia</i> de acordo com o estágio de alimentação na coluna AA1D. ....	93
<b>Figura 5.2:</b> Variação do perfil de perdas de <i>exergia</i> de acordo com a razão de refluxo da coluna AA1D. ....	94
<b>Figura 5.3:</b> Variação do perfil de perdas de <i>exergia</i> de acordo com a inserção de estágios na seção de retificação da coluna AA1D. ....	95
<b>Figura 5.4:</b> Variação do perfil de perdas de <i>exergia</i> de acordo com a inserção de estágios na seção de exaustão da coluna AA1D. ....	95
<b>Figura 5.5:</b> Variação da perda total de <i>exergia</i> de acordo com a inserção de estágios em ambas as seções da coluna AA1D. ....	96
<b>Figura 5.6:</b> Resultados da análise paramétrica para determinação da <i>exergia</i> total perdida da coluna AA1D em função da razão de refluxo e do número de estágios. ....	97
<b>Figura 5.7:</b> Resultados da análise paramétrica para determinação da carga térmica do refeedor da coluna AA1D em função da razão de refluxo e do número de estágios. ....	97
<b>Figura 5.8:</b> Resultados da análise paramétrica para fração mássica de etanol na corrente de Flegma da coluna AA1D em função da razão de refluxo e do número de estágios. ....	98
<b>Figura 5.9:</b> Resultados da análise paramétrica para determinação da fração mássica de etanol na corrente PFD da coluna AA1D em função da razão de refluxo e do número de estágios. ....	98
<b>Figura 5.10:</b> Variação do perfil de perdas de <i>exergia</i> em função da variação do estágio de alimentação da corrente PFD na coluna B1B. ....	99

<b>Figura 5.11:</b> Variação do perfil de perdas de <i>exergia</i> em função da variação do estágio de alimentação da corrente PFD na coluna B1B.....	100
<b>Figura 5.12:</b> Variação do perfil de perdas de <i>exergia</i> em função da razão de refluxo na coluna B1B. ....	101
<b>Figura 5.13:</b> Variação do perfil de perdas de <i>exergia</i> de acordo com a inserção de estágios na seção de retificação da coluna B1B. ....	102
<b>Figura 5.14:</b> Variação do perfil de perdas de <i>exergia</i> de acordo com a inserção de estágios na seção intermediária da coluna B1B.....	102
<b>Figura 5.15:</b> Análise da variação da <i>exergia</i> total perdida da coluna B1B com o número de estágios da coluna. ....	103
<b>Figura 5.16:</b> Análise da variação da <i>exergia</i> total perdida da coluna B1B com a inserção de estágios em ambas as regiões da coluna.....	103
<b>Figura 5.17:</b> Resultados da análise paramétrica para determinação da <i>exergia</i> total perdida da coluna B1B em função da razão de refluxo e do número de estágios. ....	105
<b>Figura 5.18:</b> Resultados da análise paramétrica da carga térmica requerida pelo refeedor da coluna B1B em função da razão de refluxo e do número de estágios....	105
<b>Figura 5.19:</b> Resultados da análise paramétrica da fração mássica de etanol na corrente de etanol hidratado produzida na coluna B1B em função da razão de refluxo e do número de estágios da coluna.....	106
<b>Figura 5.20:</b> Resultados da análise paramétrica para produção de etanol da coluna B1B em função da razão de refluxo e do número de estágios.....	106
<b>Figura 5.21:</b> Resultados da análise paramétrica do custo total do sistema de destilação industrial em função do número de estágios das colunas AA1D e B1B.....	108
<b>Figura 5.22:</b> Comparativos de custos de projeto entre o sistema original e o sistema otimizado do sistema de destilação.....	109
<b>Figura 5.23:</b> Fluxo de caixa do investimento das colunas otimizadas.....	110

## ÍNDICE DE TABELAS

<b>Tabela 1.1:</b> Variação anual do PIB e das vendas de combustíveis e derivados. ....	7
<b>Tabela 1.2:</b> Estimativa da produção de álcool no Brasil por região. ....	9
<b>Tabela 2.1:</b> Especificações Técnicas do AEAC e AEHC. ....	16
<b>Tabela 2.2:</b> Principais componentes do vinho industrial. ....	45
<b>Tabela 4.1:</b> Principais características das colunas do sistema de destilação. ....	70
<b>Tabela 4.2:</b> Parâmetros de entrada do sistema original. ....	71
<b>Tabela 4.3:</b> Parâmetros usados nas correlações de custo de uma coluna. ....	90
<b>Tabela 4.4:</b> Custo do vaso de pressão. ....	90
<b>Tabela 4.5:</b> Custo dos pratos ....	91
<b>Tabela 4.6:</b> Custo do material dos pratos. ....	91
<b>Tabela 5.1:</b> Custo total (CTE) de cada uma das colunas do sistema original. ....	107
<b>Tabela 5.2:</b> Comparação entre as variáveis de decisão do sistema original e do sistema otimizado da coluna AA1D. ....	108
<b>Tabela 5.3:</b> Comparação entre as variáveis de decisão do sistema original e do sistema otimizado da Coluna B1B. ....	109

## ÍNDICE DE ANEXOS

<b>Anexo A.1:</b> Resultados da simulação do sistema original para a coluna AA1D. ....	127
<b>Anexo A.2:</b> Resultados da simulação do sistema original para a coluna AA1D. ....	128
<b>Anexo A.3:</b> Resultados da simulação do sistema original para a coluna AA1D. ....	130
<b>Anexo A.4:</b> Resultados da simulação do sistema original para a coluna AA1D. ....	131
<b>Anexo B.1:</b> Resultados da simulação do sistema original para a coluna B1B. ....	131
<b>Anexo B.2:</b> Resultados da simulação do sistema original para a coluna B1B. ....	132
<b>Anexo B.3:</b> Resultados da simulação do sistema original para a coluna B1B. ....	136
<b>Anexo B.4:</b> Resultados da simulação do sistema original para a coluna B1B. ....	138
<b>Anexo C.1:</b> Resultados da análise paramétrica da coluna AA1D para de terminação da fração mássica de etanol na corrente de Flegma. ....	138
<b>Anexo C.2:</b> Resultados da análise paramétrica da coluna AA1D para determinação da fração mássica de etanol na corrente de PFD. ....	139
<b>Anexo C.3:</b> Resultados da análise paramétrica da coluna AA1D para determinação da exergia total perdida (kW). ....	139
<b>Anexo C.4:</b> Resultados da análise paramétrica da coluna AA1D para determinação da carga térmica do refeedor (kW). ....	140
<b>Anexo D.1:</b> Resultados da análise paramétrica da coluna B1B para determinação da carga térmica do refeedor (kW). ....	141
<b>Anexo D.2:</b> Resultados da análise paramétrica da coluna B1B para determinação da vazão total de etanol hidratado (ton/ano). ....	141
<b>Anexo D.3:</b> Resultados da análise paramétrica da coluna B1B para determinação da exergia total perdida (kW). ....	142
<b>Anexo D.4:</b> Resultados da análise paramétrica da coluna B1B para determinação da fração mássica de etanol na corrente de etanol hidratado. ....	142
<b>Anexo E.1:</b> Resultados da simulação do sistema otimizado para a coluna AA1D. ....	143
<b>Anexo E.2:</b> Resultados da simulação do sistema otimizado para a coluna AA1D. ....	144
<b>Anexo E.3:</b> Resultados da simulação do sistema otimizado para a coluna AA1D. ....	146
<b>Anexo E.4:</b> Resultados da simulação do sistema otimizado para a coluna AA1D. ....	147
<b>Anexo F.1:</b> Resultados da simulação do sistema otimizado para a coluna B1B. ....	148
<b>Anexo F.2:</b> Resultados da simulação do sistema otimizado para a coluna B1B. ....	149
<b>Anexo F.3:</b> Resultados da simulação do sistema otimizado para a coluna B1B. ....	153
<b>Anexo F.4:</b> Resultados da simulação do sistema otimizado para a coluna B1B. ....	155

**Anexo G.1:** Fluxo de caixa e resultado do *pay-back*.....156

## NOMENCLATURA

<b>B</b>	Vazão molar do produto de fundo (kmol/s)
<b>C</b>	Capacidade calorífica (kJ/kmol.K)
<b>CTE</b>	Custo Total de Equipamento (US\$)
<b>c</b>	Custo (US\$)
<b>D</b>	Vazão molar do produto de topo (kmol/s)
<b>d</b>	Diâmetro (m)
<b>E</b>	Eficiência de <i>Murphree</i>
<b>Ex</b>	Exergia (kJ/kmol K)
<b>F</b>	Vazão molar de alimentação (kmol/s)
<b>F</b>	Fator de Custo
<b>f</b>	Fugacidade (kPa)
<b>G</b>	Energia de Gibbs (kJ)
<b>g</b>	Energia de Gibbs molar (kJ/kmol)
<b>H</b>	Entalpia (kJ)
<b>H</b>	Altura (m)
<b>h</b>	Entalpia molar (kJ/kmol)
$\bar{h}$	Entalpia parcial molar (kJ/kmol)
<b>K</b>	Constante de equilíbrio
<b>L</b>	Vazão molar em uma corrente de retirada lateral (kmol/s)
<b>l</b>	Vazão molar na fase líquida (kmol/s)
<b>M&amp;S</b>	Fator de escala de Marshall e Swift
<b>m</b>	Vazão mássica (kg/s)
<b>N</b>	Número de estágios
<b>n</b>	Número de mols (mol)
<b>P</b>	Pressão (kPa)
<b>Q</b>	Fluxo de energia na forma de calor (kJ/kmol*)
<b>q</b>	Condição térmica da alimentação
<b>R</b>	Constante dos gases ideais (J/mol K)
<b>S</b>	Entropia (kJ/K)
<b>s</b>	Entropia molar (kJ/kmol K)
$\bar{s}$	Entropia parcial molar (kJ/kmol K)

$T$	Temperatura (K)
TIR	Taxa Interna de Retorno
TMA	Taxa Mínima de Atratividade
TRR	Receita total necessária (US\$)
$v$	Vazão molar na fase vapor (kmol/s)
$V$	Volume (m <sup>3</sup> )
VAUE	Valor Anual Uniforme Equivalente (R\$)
VPL	Valor Presente Líquido (R\$)
$W$	Trabalho Mecânico (kJ)
$x$	Fração molar na fase líquida
$y$	Fração molar na fase vapor
$Z$	Custo associado ao capital de investimento (US\$)

### Letras Gregas

$\alpha$	Volatilidade relativa
$\gamma$	Coefficiente de atividade
$\varphi$	Coefficiente de fugacidade
$\varepsilon$	Eficiência de <i>Carnot</i>
$\Delta$	Variação
$\emptyset$	Coefficiente de fugacidade
$\sigma$	Desvio Padrão
$\eta$	Eficiência Termodinâmica
$\lambda$	Calor latente de vaporização
$\tau$	Tempo total anual (em horas) de operação do sistema

### Sobrescritos

0	Composto puro
$a$	Aparente
CI	Capital de investimento
$E$	Excesso
$F$	Física
$l$	Líquido
$Q$	Química
$S$	Composto na mistura

<i>sat</i>	Saturação
TVU	Tempo de Vida Útil
<i>t</i>	Verdadeiro
<i>vap</i>	Vapor

### **Subscritos**

*	Condição de equilíbrio
0	Condição ambiente
ASD	Álcool destilado de segunda geração
<i>alim</i>	Alimentação
<i>Amb</i>	Ambiente
<i>cond</i>	Condensador intermediário
D	Direto
<i>dest</i>	Destilado
Et	Etanol
<i>e</i>	Condição de entrada no refeededor
<i>F</i>	Fonte fria
<i>fund</i>	Fundo
<i>fontes</i>	Fontes térmicas
I	Indireto
<i>i</i>	Componente i
<i>irr</i>	Irreversível
<i>j</i>	Estágio j
<i>k</i>	Componente k
<i>liqsat</i>	Líquido saturado
<i>m</i>	Componente m
m	Material
<i>min</i>	Mínimo
P	Pressão constante
PFD	Corrente de retirada lateral superior da primeira coluna
p	Pressão variável
<i>perd</i>	Perda
<i>prod</i>	Produto
<i>Q</i>	Fonte quente

<i>ref</i>	Refervedor
<i>ref int</i>	Refervedor intermediário
Resf	Água de resfriamento
s	Espaçamento
<i>sat</i>	Saturado
t	Tipo de prato
<i>tot</i>	Total
<i>util</i>	Utilidades
<i>vap</i>	Vapor
<i>vapsat</i>	Vapor saturado

\* (kmol de alimentação da coluna de destilação)

## SUMÁRIO

AGRADECIMENTOS .....	v
RESUMO .....	vi
ABSTRACT .....	vii
ÍNDICE DE ILUSTRAÇÕES .....	viii
ÍNDICE DE TABELAS .....	xi
ÍNDICE DE ANEXOS .....	xii
NOMENCLATURA.....	xiv
CAPÍTULO 1 .....	1
INTRODUÇÃO .....	1
1.1 Motivação e Foco do Trabalho.....	1
1.2 Técnicas para Otimização Energética de Colunas de Destilação.....	2
1.3 Análise <i>Exergética</i> : Características e Limitações .....	4
1.4 Princípios de <i>Exergoeconomia</i> .....	4
1.5 Análise e Otimização <i>Exergoeconômica</i> .....	5
1.6 Cenário Atual e Tendências de Mercado do Etanol como Biocombustível.....	6
1.7 Comentários e Conclusões.....	10
CAPÍTULO 2 .....	11
FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	11
2.1 Descrição do Processo de Destilação Alcoólica .....	11
2.2 Produção de Etanol Hidratado.....	12
2.3 Padrões de Qualidade do Álcool Brasileiro .....	15
2.4 Simulação e Otimização Energética de uma Coluna de Destilação.....	16
2.5 Simulações dos Processos de Destilação Alcoólica.....	18
2.6 Modelagem Termodinâmica.....	18
2.7 Modelo <i>Radfrac</i> .....	19
2.8 Balanços Materiais.....	20
2.9 Balanços de Energia.....	23
2.10 Balanços de <i>Exergia</i> .....	23
2.11 Uma Breve História do Conceito de <i>Exergia</i> .....	26
2.12 Componentes da <i>Exergia</i> .....	28
2.13 Estado de Referência.....	30
2.14 Aplicação da Análise <i>Exergética</i> no Processo de Destilação .....	30
2.15 Balanços de <i>Exergia</i> Aplicados à Coluna de Destilação.....	33

2.16 Forças Motrizes e a Perda de <i>Exergia</i> Estágio a Estágio .....	36
2.17 Perfil de Perdas de <i>Exergia</i> .....	39
2.18 Sistemas Não Ideais.....	41
2.19 Relações de Equilíbrio.....	41
2.20 Equilíbrio Líquido-Vapor (ELV).....	42
2.21 Fase Líquida.....	46
2.22 Fase Vapor.....	48
2.23 Análise Econômica.....	51
2.24 Otimização dos Custos de Operação de uma Coluna de Destilação .....	52
2.25 <i>Pay-back</i> .....	53
2.26 VPL (Valor Presente Líquido).....	53
2.27 VAUE (Valor Anual Uniforme Equivalente).....	54
2.28 TIR (Taxa Interna de Retorno).....	55
2.29 Comentários e Conclusões.....	56
CAPÍTULO 3 .....	57
REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....	57
3.1 A Preocupação com o Consumo de Energia .....	57
3.2 Aplicação da Análise <i>Exergética</i> na Otimização de Processos.....	58
3.3 Simulação Computacional.....	60
3.4 <i>Exergoeconomia</i> .....	61
3.5 Metodologias de Análise <i>Exergoeconômica</i> .....	64
3.6 Comentários e Proposta deste Trabalho .....	65
CAPÍTULO 4 .....	67
METODOLOGIA .....	67
4.1 Apresentação Detalhada da Metodologia de Otimização <i>Exergética</i> .....	68
4.2 Modelagem do Processo Global.....	68
4.3 Extração de Dados.....	68
4.4 Modelagem do Processo.....	72
4.5 Decomposição do Processo em Zonas Funcionais.....	73
4.6 Classificação das Correntes do Processo .....	74
4.7 Diagnósticos do Processo.....	74
4.8 Balanço de <i>Exergia</i> Global do Processo .....	75
4.9 Classificação de Cada Zona de Processo de Acordo com a sua Eficiência .....	84
4.10 Proposta de um Esquema de <i>Retrofit</i> .....	85
4.11 Otimização Energética do Processo.....	86

4.12 Modelagem <i>Exergoeconômica</i> .....	87
4.13 Otimização <i>Exergoeconômica</i> do Processo .....	88
4.14 Conclusões do Procedimento.....	92
CAPÍTULO 5 .....	93
RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	93
5.1 Simulação do sistema de destilação original.....	93
5.2 Estágio de alimentação da zona funcional 1 .....	93
5.3 Razão de refluxo da zona funcional 1.....	94
5.4 Número de estágios da zona funcional 1.....	95
5.5 Análise paramétrica da coluna AA1D.....	96
5.6 Estágio de alimentação da corrente PFD na zona funcional 2.....	99
5.7 Estágio de Alimentação da corrente de Flegma na zona funcional 2.....	100
5.8 Razão de Refluxo da zona funcional 2.....	101
5.9 Número de estágios da zona funcional 2.....	102
5.10 Análise paramétrica da coluna B1B.....	104
5.11 Avaliação Econômica do Sistema de Destilação .....	107
CAPÍTULO 6 .....	112
CONCLUSÕES .....	112
SUGESTÕES PARA COMPLEMENTAÇÃO DO TRABALHO .....	115
TRABALHOS REALIZADOS DURANTE O MESTRADO.....	116
CAPÍTULO 7 .....	117
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	117
ANEXOS .....	127

# CAPÍTULO 1

## INTRODUÇÃO

Neste capítulo uma breve introdução do trabalho a ser desenvolvido será apresentada, o tema do trabalho está localizado na linha de processos de separação e otimização de processos, pertencente a enorme área da Engenharia Química. A motivação e o foco do presente trabalho também serão apresentados e para a definição dos objetivos deste trabalho serão citadas as técnicas utilizadas tanto para a otimização de colunas de destilação quanto para sua avaliação econômica, assim como suas características e limitações aplicadas ao contexto da etapa de destilação de um sistema industrial para produção de bioetanol.

### 1.1 Motivação e Foco do Trabalho

Há muito tempo pesquisadores do mundo todo estudam diversos meios de otimizar os processos industriais desenvolvidos e utilizados atualmente. Desde a revolução industrial tornou-se objetivo e necessidade produzir em escala industrial de modo a atender as necessidades criadas com o crescimento populacional, sendo constantemente notado que “o produzir mais” está bastante distante do “produzir de forma ideal”. Os setores da produção fabril partiram para a valorização da pesquisa em busca de soluções e do desenvolvimento de um processo que visa ampliar a quantidade produzida sem se preocupar com as consequências geradas por este processo, como seu gasto energético e seus efluentes produzidos, para um modelo de processo que deve levar em conta não apenas a maximização dos lucros gerados pelo aumento da produtividade, mas também a redução de custos provenientes da implementação de equipamentos dimensionados de forma a atender as demandas do processo em todas as suas etapas básicas e os quesitos de qualidade exigidos. Tal desenvolvimento e otimização dos processos passa a ser exercida pelos profissionais qualificados da área de produção: engenheiros químicos, engenheiros de alimentos, engenheiros de produção e áreas afins.

Definido que o foco do estudo é o processo de destilação para produção de bioetanol hidratado, e que queremos por meio do nosso estudo desenvolver um método

de análise e otimização de colunas de destilação, visando um melhor aproveitamento da energia disponível no processo e aumentar ainda mais sua viabilidade econômica, deveremos previamente verificar quais são os métodos já existentes para análise *exercoeconômica* que se propõem a otimizar esta operação. Dentre as técnicas existentes, as suas vantagens e desvantagens devem ser ressaltadas e justificadas.

## 1.2 Técnicas para Otimização Energética de Colunas de Destilação

Em relação à otimização energética do processo de destilação, é muito comum avaliar e buscar encontrar a melhor combinação entre os parâmetros que influem diretamente sobre o projeto e operação da coluna de destilação, como número de estágios, razão de refluxo, condição térmica da alimentação, estágio de alimentação e a utilização de trocadores de calor intermediários.

As cargas térmicas do refeedor e do condensador também são importantes fatores a serem avaliados, pois dependem diretamente das vazões internas da coluna de destilação e da disponibilidade das utilidades exigidas pelo processo. Qualquer alteração na razão de refluxo, afeta diretamente as vazões internas e conseqüentemente as cargas térmicas destas utilidades, isto faz com que o consumo global da coluna se altere.

No entanto, apesar de benéfica do ponto de vista de consumo de energia, esta modificação leva a uma mudança da pureza dos produtos de topo e no fundo da coluna. Isto normalmente é indesejável, fazendo-se necessário o aumento do número de estágios para obter-se novamente a recuperação original. Na impossibilidade do aumento do número de estágios, o que implica no aumento do tamanho da coluna e do custo do equipamento, outra alternativa é trocar a coluna de estágios por uma de recheio.

Dentre as técnicas estudadas que se propõem a encontrar a melhor combinação entre estes parâmetros, será descrito brevemente sobre as principais: métodos heurísticos, que vêm da experiência empírica e cotidiana do engenheiro responsável pelo processo; métodos de programação matemática, na qual uma função objetivo é maximizada ou minimizada pela utilização de um software computacional; e métodos termodinâmicos, que buscam o aumento de eficiência termodinâmica do processo, avaliando a possibilidade do processo se tornar o mais próximo possível de sua reversibilidade.

As regras heurísticas vêm da experiência prática dos engenheiros de processo como um resultado da observação de vários casos ocorridos ao longo do tempo. A razão

de refluxo, por exemplo, comumente é estabelecida por meio dos resultados apresentados pelo controle de qualidade do processo, que pode exigir ajustes nas especificações apresentadas pelos produtos de topo e fundo da coluna. A principal desvantagem dos métodos heurísticos consiste no fato de não poderem ser traduzidos num procedimento sistemático que permita analisar as vantagens e desvantagens de cada alteração da configuração da coluna. Isto impossibilita a determinação da melhor combinação entre todos os fatores como número de estágios, condição térmica, estágio de alimentação e a utilização de trocadores intermediários, como citados anteriormente.

A programação matemática é útil como ferramenta de otimização de processos em qualquer situação, buscando a determinação de uma função objetivo, que deve ser minimizada ou maximizada. Ao estudarmos colunas de destilação, por exemplo, as diversas combinações entre os parâmetros da coluna são testadas exaustivamente, calculando-se a cada momento o valor de uma função objetivo específica, que pode retornar a quantidade de utilidades gastas, a fração mássica dos produtos de topo, etc. Já foi mostrado por alguns pesquisadores que estes métodos podem ser aplicados com sucesso na otimização de colunas de destilação (VISWANATHAN e GROSSMAN, 1993). As principais desvantagens apontadas para estes métodos são: a grande complexidade de formulação e descrição matemática do processo, vinculando a formulação matemática de todas as restrições do processo simulado com o software de interpretação responsável pela resolução numérica e o fato do engenheiro de processos não poder intervir diretamente com sua experiência no procedimento de otimização a qualquer momento, evitando resultados desastrosos.

O método de otimização termodinâmico oferece recursos para a determinação da eficiência de um processo químico, não diz porém, o que deve ser feito para que o processo se torne mais eficiente. Os métodos de otimização baseados na termodinâmica conseguem mostrar, numa comparação entre duas ou mais configurações do processo em estudo, qual é a configuração mais eficiente do ponto de vista da termodinâmica. Nem toda análise termodinâmica, entretanto, é capaz de mostrar quais modificações nas configurações do processo de quais procedimentos podem levar a um aumento da eficiência termodinâmica do processo. Baseado na análise *exergética*, aqui se inclui o método de otimização de colunas de destilação através do perfil de perdas de *exergia* proposto por Zemp (1994), e mais extensamente testado por Faria (1996) em trabalhos posteriores, mostrando-se um procedimento sistemático de grande utilidade, que identifica as modificações que devem ser feitas na coluna para o aumento da sua

eficiência termodinâmica. Além de poder ser aplicado a qualquer sistema, binário, ternário ou multicomponente, ainda permite ao engenheiro decidir com base na sua experiência prática qual a melhor modificação que dever ser feita na coluna.

Por estas vantagens apresentadas sobre os outros métodos, a otimização de colunas de destilação através do perfil de perdas de *exergia* é o procedimento que será estudado nesta dissertação de mestrado para a análise energética e a programação matemática será utilizada para a análise e otimização econômica das colunas.

### **1.3 Análise Exérgica: Características e Limitações**

Apesar da otimização de colunas de destilação através do perfil de perdas de *exergia* ser prática e útil, sua aplicação até o momento está restrita a disposição de softwares que possuam banco de dados bastante específicos para o cálculo da *exergia* química e *exergia* física das correntes do processo estudado. Para diversos casos já estudados foi possível provar que o perfil de perdas de *exergia* permite propor modificações que aumentam a eficiência termodinâmica da coluna em sistemas binários, ternários e multicomponentes (FARIA, 1996).

Entretanto, na prática, a indústria química não dispõe de ferramentas computacionais com este objetivo, fazendo-se necessário um estudo da utilidade do perfil de perdas de *exergia* para colunas com sistemas reais para criação de casos aplicados. Este estudo deve identificar a aplicabilidade da técnica original para o sistema industrial de produção de bioetanol hidratado, identificando as possíveis limitações e propor as modificações necessárias para que o novo procedimento sistemático obtido permita a otimização energética das colunas deste sistema.

### **1.4 Princípios de Exergoeconomia**

A *Exergoeconomia* é o ramo da análise *exérgica* da engenharia que combina restrições econômicas do sistema para o engenheiro de projetos com informações ainda não disponíveis, como o custo da *exergia* perdida, por meio de análise de energia convencional e sua avaliação econômica. Estas informações, no entanto, são de extrema importância para o projeto e operação de um sistema eficaz em termos econômicos. A *Exergia* é a quantidade máxima teórica de trabalho útil obtível em trazer o estado de um sistema para o estado do ambiente. Na ausência de efeitos de tensão magnéticas,

elétricas, nucleares, e de superfície, a *exergia* geral de um sistema em repouso consiste de duas parcelas: *exergia* física e *exergia* química. A componente de *exergia* física está associado com o trabalho obtido em trazer um fluxo de matéria de estado inicial para um estado que está em equilíbrio térmico e mecânico com o meio ambiente. A componente de *exergia* química está associada ao trabalho obtidos em trazer um fluxo de matéria do estado que está em equilíbrio térmico e mecânico com o ambiente para um estado que está na configuração mais estável em equilíbrio com o meio ambiente. O pré-requisito para que o melhoramento ou a otimização *exergoeconômica* do processo ocorra baseia-se no fato de que após a proposta de uma nova configuração, o produto contenha pelo menos as mesmas especificações do processo inicial sem decaimento da qualidade ou pureza dos produtos obtidos, e ao mesmo tempo ocorra uma redução da necessidade energética do processo pelo melhor aproveitamento da *exergia* útil.

Tanto o produto quanto o combustível são expressos em termos de *exergia*, pois todas as correntes possuem um conteúdo *exergético*. As definições de combustível e de produto do sistema são obtidas utilizando as diretrizes específicas de cada processo, no caso em estudo, o bioetanol hidratado como produto principal e o bagaço queimado na caldeira como combustível responsável pela produção da utilidade quente empregada no sistema por meio de injeção indireta de vapor.

### **1.5 Análise e Otimização *Exergoeconômica***

A maioria dos métodos de otimização *exergoeconômica* convencionais são iterativos na natureza e requerem a interpretação do engenheiro, em cada iteração ou em cada análise da simulação computacional.

As metodologias utilizadas para análise *exergoeconômica* desenvolvidas nos últimos 25 anos ou mais são as seguintes (SAHOO, 2008):

- A avaliação e otimização pelo método *termoeconômico* - um método de contabilização de custos utilizando a abordagem de custo médio.
- A aplicação da teoria do custo *exergética* - um método de contabilização de custos utilizando a abordagem de custo médio.
- O método de análise funcional *termoeconômica* - um método de otimização que emprega análise do custo marginal.
- O método de análise funcional de engenharia.

As metodologias *exergoeconômicas* acima podem ser classificados em dois grupos principais: (a) os métodos de contabilização de custos que utilizam os custos médios como base para uma avaliação do custo total (b), os métodos de otimização que empregam análise de custos marginais, a fim de minimizar os custos dos produtos de um sistema ou de um componente. Todos estes métodos são baseados em um modelo *exergoeconômico*, que consiste basicamente de um conjunto de equações lineares de *exergia* produtiva que define o objetivo de cada componente da planta.

As técnicas de otimização acima mencionados baseiam-se principalmente sobre o processo iterativo de otimização local, que requer a interpretação do desenvolvedor em cada um dos passos para chegar à configuração final. Neste trabalho optamos por trabalhar com a metodologia de análise funcional abordando o custo médio da coluna de destilação como a variável ser estudada e implementada na metodologia desenvolvida.

### **1.6 Cenário Atual e Tendências de Mercado do Etanol como Biocombustível**

Em decorrência das crises do petróleo e devida à necessidade de um novo combustível capaz de substituí-lo, o Brasil criou em 1975, o Programa Nacional do Álcool – PROALCOOL, "oficializando" o etanol como combustível em veículos leves.

Após a implantação deste programa, a produção de etanol no Brasil foi marcada por uma trajetória de altos e baixos. Entre 1973 e 1986, ocorreram os chamados “choques do petróleo” e suas consequências. No primeiro choque, em 1973, a importação de petróleo passou de 769 milhões de dólares para 2.962 milhões de dólares em 1974. A seguir, no segundo choque em 1979, essas importações passaram para 10.200 milhões de dólares, desestruturando a economia brasileira, que passou a conviver com uma dívida externa líquida de 46.935 milhões de dólares. A partir de então tornou-se necessário criar alternativas para a substituição do petróleo na economia brasileira. Neste cenário o surgimento do PROALCOOL promoveu o aparecimento de inúmeras destilarias no país, gerando um exagerado crescimento na produção alcooleira e tornando o Brasil, de forma bastante rápida, o maior produtor mundial de álcool combustível (MAGALHÃES et al., 1991).

Segundo os trabalhos de Santos et al. (2000), o programa tinha como meta chegar a uma produção de 3 bilhões de litros em 1980, contando com um grande incentivo governamental, que subsidiou a produção e fez inúmeras concessões fiscais. No segundo choque do petróleo, o governo inicia a segunda fase do PROALCOOL,

visando uma produção ainda maior, em torno de 8 bilhões de litros em 5 anos. O grande objetivo do governo era aumentar expressamente a produção de alimentos e gêneros rurais cabíveis de exportação, podendo assim transferir para a agricultura a responsabilidade de sanar as dívidas brasileiras contraídas com toda esta situação.

Após a primeira década, o governo considerou como positivo os resultados do PROALCOOL, pois criou-se a cultura de produção de uma fonte nova de energia, com amplo domínio de produção pelo Brasil. Além disto, houve também uma considerável melhoria ambiental nos grandes centros, uma vez que a queima do etanol é bem menos prejudicial ao meio ambiente do que a queima da gasolina, e ainda a geração de um grande número de empregos nos centros produtores de álcool e açúcar.

Como consequência deste crescimento, a preocupação em tornar um processo, ou mesmo uma operação unitária de um processo mais eficiente do ponto de vista energético cresceu em todos os setores da produção, principalmente no setor da produção de combustíveis, e mais tarde de biocombustíveis, que cresceram exponencialmente nas últimas décadas, tanto no cenário brasileiro quanto no cenário internacional, que além do aumento de demanda da produção teve aumento significativo na importação de combustíveis em geral, fator que afeta diretamente a economia de nosso país como indicado na Tabela 1.1.

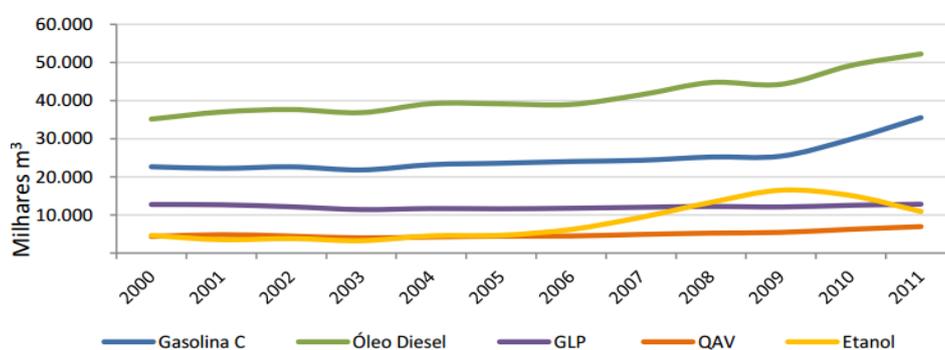
**Tabela 1.1:** Variação anual do PIB e das vendas de combustíveis e derivados.

<b>Ano</b>	<b>PIB</b>	<b>Diesel</b>	<b>Gasolina</b>	<b>Etanol</b>	<b>GLP</b>	<b>QAV</b>	<b>Nafta</b>
<b>2001</b>	1.3%	5.3%	-1.9%	-23.9%	-0.6%	11.2%	-10.0%
<b>2002</b>	2.7%	1.7%	1.8%	8.3%	-4.2%	-7.9%	-27.0%
<b>2003</b>	1.2%	-2.2%	-3.6%	-14.4%	-6.0%	-10.5%	-2.0%
<b>2004</b>	5.7%	6.4%	6.3%	39.1%	2.4%	6.0%	-2.0%
<b>2005</b>	3.2%	-0.1%	1.6%	3.4%	-0.6%	5.2%	0.0%
<b>2006</b>	4.0%	-0.4%	1.9%	32.6%	1.2%	0.8%	1.0%
<b>2007</b>	6.1%	6.5%	1.3%	51.4%	2.1%	9.5%	4.0%
<b>2008</b>	5.2%	7.7%	3.5%	41.9%	1.9%	6.9%	-12.0%
<b>2009</b>	-0.3%	-1.0%	0.9%	23.9%	-1.2%	3.8%	10.0%
<b>2010</b>	7.5%	11.2%	17.5%	-8.5%	3.7%	15.1%	14.0%
<b>2011</b>	2.7%	6.1%	18.9%	-27.7%	2.5%	11.3%	-7.0%

Fonte: IBGE e dados estatísticos da ANP (2013)

Dentre os principais combustíveis produzidos no mercado brasileiro atualmente, os que obtiveram o maior crescimento nos últimos 10 anos foram o Etanol e o Óleo Diesel, tal crescimento para o Etanol está justificado em função de que, na grande maioria dos casos, apresenta uma relação custo/rendimento maior que a gasolina no ramo automobilístico e do surgimento e expansão de tecnologias que aderiram sua aplicabilidade como combustível.

Como pode ser observado na Figura 1.1, os movimentos de demanda por etanol apresentam pelo menos três momentos bastante marcantes: de 2000 a 2003, quando a frota de veículos a etanol apresentava queda; de 2004 a 2009, com a entrada dos veículos *flexfuel* e preços competitivos em relação à gasolina; e de 2010 a 2011, anos em que as safras de cana e a produção de etanol não foram suficientes para manter a competitividade do produto. No entanto, o Brasil vem buscando reverter este quadro, o consumo de etanol hidratado, que é injetado diretamente nos tanques dos automóveis de todo o país, cresceu 9,5%, passando de 9,8 bilhões de litros para 10,7 bilhões de litros entre 2012 e 2013. Como um todo, o etanol (anidro, usado também no setor alimentício e farmacêutico, juntamente ao hidratado) teve elevação de 18,8% em 2013 em frente a 2012, passando de 17,7 bilhões de litros para 21,1 bilhões (dados divulgados pela ANP durante a realização do 9º Seminário de Avaliação do Mercado de Derivados do Petróleo e Biocombustíveis - 2013). Além disso o sindicato que representa as distribuidoras de combustíveis no Brasil, Simdicom, apontou um crescimento na ordem de 5,3% em 2014 e prevê que o mercado continuará crescendo em 2015, com a continuidade do estímulo a venda de carros trazido pelas facilidades de crédito.



**Figura 1.1:** Consumo dos principais combustíveis do mercado brasileiro, 2000 – 2011.  
Fonte: Dados estatísticos mensais da ANP(2013).

De acordo com o levantamento da produção de cana-de-açúcar e seus derivados, realizado pela CONAB em agosto de 2015, estimou-se uma produção de 29,2 bilhões de

litros de álcool para esta safra 2015/2016, superando em 1,9 % a safra anterior. A Tabela 1.2 resume a produção nacional de álcool para safra 2015/2016. O etanol anidro, utilizado na mistura com a gasolina, deve ter um aumento de 1 bilhão de litros, passando de 11,73 para 12,73 bilhões de litros. Para o etanol hidratado, utilizado nos veículos *flex fuel*, a expectativa é de redução de 2,8%, quando comparados com a produção da safra anterior, o que equivale a menos 467,4 milhões de litros.

Essa produção é suficiente para abastecer o mercado interno e gerar excedentes para a exportação, fazendo assim com que o Brasil lidere juntamente com os Estados Unidos a exportação mundial de etanol.

**Tabela 1.2:** Estimativa da produção de álcool no Brasil por região.

Região	Álcool Anidro		Álcool Hidratado	
	(em 1000L)	%Brasil	(em 1000L)	%Brasil
<b>Norte</b>	140.030	1,1	98.820	0,6
<b>Nordeste</b>	1.311.190	10,3	1.087.020	6,6
<b>Centro-Oeste</b>	2.316.860	18,2	5.748.030	34,9
<b>Sudeste</b>	8.338.150	65,5	8.794.980	53,4
<b>Sul</b>	636.500	5,0	757.620	4,6
<b>Brasil</b>	12.742.730	100,0	16.486.470	100,0

Fonte: CONAB (2015)

Segundo estimativa da União da Indústria de Cana-de-Açúcar (Unica), realizada em 2013, a procura por combustíveis leves, como etanol, gasolina e gás natural crescerá 50% até 2020 e na avaliação do setor sucroalcooleiro, para atender ao aumento da demanda serão necessárias pelo menos 100 novas usinas produtoras de etanol no Brasil.

Neste contexto, dentre os principais processos de separação existentes na indústria responsável pela produção do bioetanol, a destilação é um dos maiores consumidores de energia, onde além do álcool, encontra-se presente em grande quantidade a água com teores de 89% a 93%, glicerol, alcoóis homólogos superiores, furfural, aldeído acético, ácidos succínico e acético entre outros, em quantidades bem menores, provenientes da etapa de fermentação, sendo necessária a busca de métodos para otimização energética da coluna de destilação desta mistura, que pode em um primeiro estudo ser tratado como um sistema binário mais simples (Etanol/Água) e

---

gerar um ponto de partida para posteriormente serem realizados trabalhos que trabalhem as adequações que representem o sistema como um todo.

### 1.7 Comentários e Conclusões

Neste capítulo realizou-se uma breve apresentação sobre a motivação deste trabalho, definindo qual o foco do trabalho e comentando um pouco sobre algumas técnicas já usuais de otimização de colunas de destilação, no que diz respeito a encontrar a melhor combinação entre parâmetros responsáveis pelo desempenho de uma coluna de destilação.

As principais características e limitações de cada técnica foram apresentadas, mostrando que o interesse do presente trabalho é estudar de maneira mais completa a aplicação do perfil de perdas de *exergia* na análise termodinâmica de colunas de destilação, propor uma metodologia direcionada a análise da *exergia* perdida da coluna e avaliação de seus parâmetros para redução desta perda e desenvolvimento de um modelo de análise *exergoeconômica* que leva em consideração o custo de projeto da coluna e das utilidades requeridas pelo processo. Antes porém que este raciocínio seja desenvolvido, uma revisão bibliográfica sobre alguns trabalhos que utilizam métodos termodinâmicos para propor a otimização de colunas de destilação será apresentada (capítulo 2) e posteriormente os conceitos básicos da aplicação da análise *exergoeconômica* a processos de separação serão apresentados (capítulo 3).

Nesta dissertação, o perfil de perdas de *exergia* será obtido para o sistema não ideal Etanol/Água, a análise deste perfil no simulador *Aspen Plus* permitirá identificar possíveis modificações no sistema de destilação industrial de estudo, de forma que os resultados sejam condizentes com o que deve ocorrer na prática.

O sistema de destilação industrial tem o objetivo de produzir etanol hidratado por meio da separação e purificação do vinho produzido na etapa de fermentação, com injeção indireta de vapor nas colunas de destilação simuladas. A análise pretende mostrar que o custo do processo pode ser reduzido à medida que uma economia na quantidade de vapor requisitada pelo processo ocasiona uma redução do combustível a ser utilizado na caldeira, além da redução de impactos ambientais resultantes de uma menor queima daquele. É importante notar que devido a novas condições de projeto e operação da coluna, o investimento inicial para implementação das novas colunas deve se alterar, porém o cálculo de inversão do investimento pode viabilizar sua aplicação.

# CAPÍTULO 2

## FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo serão apresentados uma revisão dos fundamentos e detalhes do desenvolvimento de um método de otimização de colunas baseado primeiramente em análise *exérgica*, uma breve apresentação dos conceitos básicos de aplicação da análise *exérgica* a colunas de destilação, em seguida passaremos a mostrar a transformação desta análise em uma análise *exergoeconômica*, apresentando por fim os detalhes e características do processo de destilação industrial para produção de bioetanol e uma abordagem sobre os padrões de qualidades dele exigidos. Esta revisão é o assunto do presente capítulo.

### 2.1 Descrição do Processo de Destilação Alcoólica

Todo o processo de destilação alcoólica, seja ele para produção de derivados ou do próprio etanol, inicia-se com a concentração do vinho. A fermentação do mosto gera uma solução hidro alcoólica, contendo componentes sólidos, líquidos e gasosos. Vinhos industriais, em geral, possuem uma concentração de 5,0 a 10,0 % de etanol em volume, podendo variar de acordo com o mosto que lhe deu origem.

Busca-se hoje na indústria produzir vinhos mais concentrados, com 11 ou até 12 % de volume de álcool. O principal componente líquido do vinho é a água que aparece em quantidades que podem variar entre 85 a 95 % em volume. Em pequenas proporções temos alguns outros contaminantes de natureza líquida, como álcoois (metanol, propanol, butanol, álcool isoamílico), aldeídos (acetaldeído), ésteres, ácido acético, crotonaldeído, entre outros, que para efeitos da análise no presente trabalho serão desconsiderados, em função da falta de parâmetros binários do modelo termodinâmico selecionado para todos os compostos minoritários no banco de dados do simulador e desta consideração não influenciar consideravelmente na metodologia de otimização proposta.

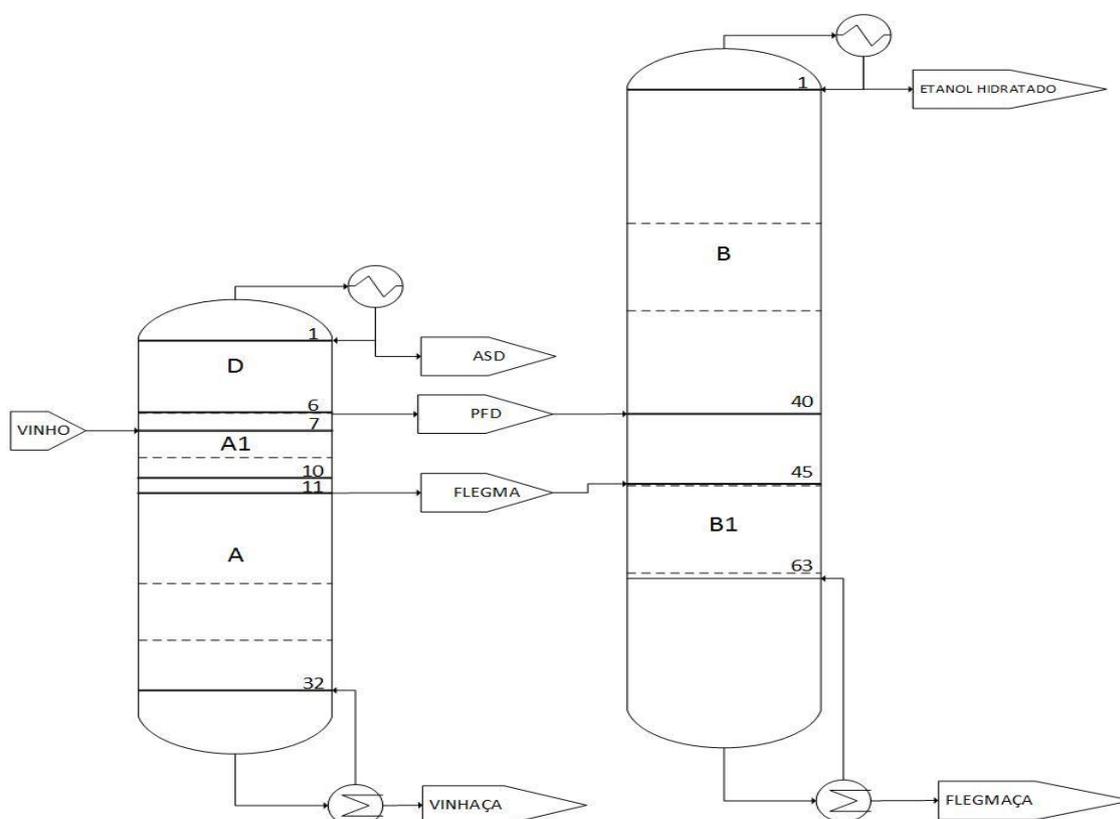
Além dos contaminantes de natureza líquida, temos também aqueles de natureza sólida e gasosa. Os principais sólidos presentes no vinho são células mortas de levedura e bactérias, açúcares não fermentescíveis, bagacilhos de cana-de-açúcar, entre outros. Já

entre os contaminantes gasosos, o principal é o gás carbônico ( $\text{CO}_2$ ), que se encontra dissolvido no vinho.

O produto da destilação do vinho é sempre uma mistura hidro alcoólica impura que encerra, em sua composição, praticamente todas as substâncias voláteis que se encontravam no vinho. Assim, produzir etanol hidratado significa concentrar o etanol presente no vinho até níveis especificados pela legislação, bem como controlar a concentração dos contaminantes presentes no destilado final. Todo esse processo é realizado por colunas de destilação contínuas que podem ser configuradas de acordo com a necessidade do produto a ser destilado, a configuração mais atual utilizada em um sistema de destilação industrial será discutida no tópico a seguir.

## 2.2 Produção de Etanol Hidratado

A configuração mais tradicional em um sistema de destilação industrial é conhecida como configuração AA1D-B1B, simulada e analisada nos trabalhos de Marquini (2007) e Batista (2008). A Figura 2.1 representa o esquema do processo de destilação em estudo.



**Figura 2.1:** Sistema de destilação para produção de etanol hidratado – Configuração Industrial AA1D-B1B.

Esta configuração é formada pelo conjunto de 5 colunas. Temos a presença da coluna A1, denominada coluna de depuração do vinho, normalmente contendo 4 estágios, tendo como objetivo purificar o vinho de substâncias de maior volatilidade e gases contaminantes, além de complementar o seu aquecimento. Recebendo o produto de topo desta primeira coluna temos também a presença da coluna D, denominada coluna de concentração de álcool de segunda (ASD), que, contendo geralmente 6 estágios, é utilizada para obtenção do etanol de segunda, no qual se concentra os produtos de topo, mais voláteis, extraídos na fase vapor na coluna A1. Recebendo os produtos de fundo da coluna A1, temos a coluna A, que opera com aproximadamente 22 estágios, podendo ter de 16 a 24 pratos, tendo por finalidade esgotar o etanol contido no vinho, saindo em seu fundo como vinhaça. As correntes denominadas PFD e flegma são retiradas lateralmente desta coluna com uma concentração de aproximadamente 40 % em massa de álcool etílico, para seguir até as colunas seguintes. O conjunto destas 3 primeiras colunas, é conhecido como sistema de lavagem do etanol, e podem ser simuladas em uma única coluna chamada coluna, como validado por Marquini (2007).

O seguinte sistema, é composto primeiramente pela da coluna de retificação B, responsável por proporcionar uma purificação e concentração do etanol hidratado, eliminando praticamente todas as substâncias minoritárias originadas por reações paralelas no decorrer da fermentação. A coluna B é composta por aproximadamente 45 estágios. Os compostos retirados acima da região de extração do álcool são enviados ao condensador, onde trocam calor com o vinho que necessita de pré-aquecimento para ser recebido no processo. A coluna B1 apresenta em torno de 18 estágios, tendo como função destilar o etanol contido nas correntes PFD e flegma que vem da coluna B. O produto de topo volta para a coluna B e o produto drenado no fundo recebe o nome de flegmaça, que pode ser utilizada para limpeza de equipamentos do processo e posteriormente é incorporada à vinhaça e normalmente enviada à fertirrigação.

Quase todo o vapor produzido na coluna B é condensado e retorna a coluna, a outra parte é retirada como etanol hidratado na fase líquida e é então resfriado em um posterior trocador de calor. Este condensador total permite a retirada de etanol hidratado da coluna B com melhor qualidade. O conjunto destas 2 últimas colunas, é conhecido como sistema de purificação do etanol, e será referido na simulação como coluna B1B.

O aumento do mercado exportador de álcool brasileiro vem ampliando a demanda por etanol de melhor qualidade, normalmente produzido por destilação adicional ou por modificações nas instalações descritas anteriormente.

Uma discussão interessante nos dias atuais é a da substituição dos processos de injeção de vapor direto por vapor indireto. Nas plantas de destilação mais modernas, a utilização do vapor indireto no refeedor da coluna vem sendo cada vez mais utilizado. Isso porque, apesar de promover uma troca de calor mais eficiente devido ao contato direto entre o vapor e os produtos no interior da coluna, a injeção direta de vapor apresenta algumas desvantagens em relação ao vapor indireto (SILVA et al., 2015), como:

- *Aumento da massa de vinhaça*: A vinhaça é o principal resíduo do processo de destilação. Com a utilização da injeção direta, a massa de vapor injetada na coluna diretamente contribui para o aumento do resíduo do processo, que é em grande parte composto por água. Esta consequência tornou-se um grande problema para a indústria, devido aos problemas causados ao meio ambiente em decorrência do aumento deste resíduo, que quando em excesso não pode ser usado totalmente na fertirrigação.

- *Custo do vapor*: Nos processos que se utilizam da injeção direta de vapor, este deve ser extremamente puro, livre de qualquer tipo de contaminante. Isso porque o mesmo entra em contato direto com o produto no interior da coluna. E desta forma, deve-se evitar a contaminação do produto a ser destilado. O processo de purificação do vapor é bastante caro, contribuindo assim para o encarecimento do processo como um todo.

Marquini (2007) estudou primeiramente, por simulação computacional, o processo de destilação alcoólica para a produção de etanol hidratado, utilizando uma configuração mais simplificada, considerando vinho como sendo uma mistura binária composta por apenas etanol e água. No presente trabalho, pretende-se examinar detalhadamente a configuração mais usual de destilação alcoólica desta simulação, representado pela Figura 2.1, utilizando vapor indireto, para posterior otimização *exergoeconômica* do processo pela metodologia proposta, que é estruturada a partir dos conceitos apresentados neste capítulo.

A volatilidade dos diversos componentes do vinho em relação ao teor de etanol da mistura, permite justificar a disposição das colunas apresentadas na Figura 2.1, pois desta forma é possível garantir a ausência de contaminantes na corrente final de etanol hidratado.

A coluna D (Coluna de concentração de álcool de segunda) se faz necessária, uma vez que sua função é retirar do vinho os contaminantes mais voláteis, poupando esse trabalho nas colunas subsequentes. Como o vinho é uma solução rica em água,

todos os outros componentes minoritários, inclusive o metanol, estão em uma solução altamente diluída. Dessa forma, ao entrar no topo da coluna A, os componentes acima mencionados apresentam uma volatilidade muito maior que as dos demais. Sendo assim, tendem a se concentrar no topo da coluna A, sendo então repassados, através de uma corrente de vapor, para a base da coluna D, onde serão concentrados, saindo no topo da mesma, como álcool de segunda. Tal sistema foi adotado para estudo de caso da metodologia apresentada neste trabalho.

### **2.3 Padrões de Qualidade do Álcool Brasileiro**

No Brasil, o uso do etanol se dá quase que em sua totalidade como combustível automotivo, em menor escala como álcool neutro nas indústrias química, farmacêuticas e de bebidas. Para o etanol combustível, dois tipos são preferencialmente utilizados: Álcool Etílico Anidro Combustível (AEAC), utilizado como aditivo à gasolina na proporção de 27%, e o Álcool Etílico Hidratado Combustível (AEHC), utilizado diretamente em carros a combustão exclusiva a álcool.

O padrão de qualidade dos diferentes tipos de álcool, mesmo aquele de uso exclusivo como combustível, envolve diversos aspectos além do grau alcoólico especificado. Itens como acidez, pH, condutividade elétrica, presença de contaminantes, alguns dos quais podem sofrer reações que diminuem a qualidade do produto durante o armazenamento, precisam ser considerados para se determinar a qualidade do álcool. A Resolução N° 7, de 9.2.2011 – DOU 10.02.2011, da ANP, Agência Nacional do Petróleo, estabelece os padrões de qualidade para os álcoois combustíveis no Brasil, como mostrado na Tabela 2.1.

Com o crescimento da demanda de etanol, a preocupação com a qualidade do produto vem aumentando cada vez mais, principalmente para atender às exigências do mercado externo. O padrão de qualidade do álcool tipo exportação é, invariavelmente, definido pelo importador, cabendo ao produtor nacional adequar seu produto a esse padrão. Assim, o aperfeiçoamento do processo de destilação para produção de etanol se torna cada vez mais importante, no sentido de produzir etanol sempre com qualidade superior ao atual (Tabela 2.1).

Grande parte das destilarias nacionais produzem etanol de qualidade superior ao etanol combustível, porém, estas procuram a produção do etanol anidro como produto principal.

**Tabela 2.1:** Especificações Técnicas do AEAC e AEHC.

CARACTERÍSTICA	UNIDADE	ESPECIFICAÇÕES	
		AEAC	AEHC
Aspecto	-	Límpido	Límpido
Cor	-	Incolor	Incolor
Acidez total (como ácido acético), máx.	mg/L	30	30
Condutividade elétrica, máx.	$\mu\text{S/m}$	389	389
Massa específica a 20°C	$\text{kg/m}^3$	791.5 máx.	807.6 a 811.0
Teor alcoólico	°INPM	99.3, mín.	92.6 a 93.8
Potencial hidrogeniônico (pH)	-	-	6.0 a 8.0
Resíduo por evaporação, máx.	mg/100ml	5	5
Teor de hidrocarbonetos, máx.	%vol.	3	3
Íon Cloreto, máx.	mg/kg	1	1
Teor de etanol, mín.	%vol.	98.0	94.5
Íon Sulfato, máx.	mg/kg	4	4
Ferro, máx.	mg/kg	5	5
Sódio, máx.	mg/kg	2	2
Cobre, máx.	mg/kg	0.07	-

Fonte: ANP (2011)

#### 2.4 Simulação e Otimização Energética de uma Coluna de Destilação

A otimização de parâmetros de uma coluna de destilação, como estágio de alimentação, condição térmica da alimentação e utilização de refeedores intermediários pode ser obtida por balanços de *exergia* na coluna, o que por sua vez depende da determinação de propriedades termodinâmicas consistentes. Por esta razão, muitos trabalhos já propuseram alternativas visando aproveitar melhor a energia empregada nesta etapa. Historicamente, trabalhos como o apresentado por Mah *et al.* (1977) já citavam, por exemplo, a importância de utilização de trocadores de calor intermediários em colunas de destilação, para reaproveitamento de correntes quentes disponíveis no processo. Trabalhos como Dhole and Linhoff (1993), Zemp *et al.* (1997), Chang e Li (2005) e Tarighaleslami *et al.* (2012) abordaram procedimentos para

análises termodinâmicas de colunas de destilação, inclusive com o uso de perfis de perdas de *exergia*.

Entretanto, apesar da utilização de perfis de perdas de *exergia* para otimização de colunas de destilação ser uma técnica viável, a correta geração de perfis de perdas de *exergia*, depende da obtenção de propriedades termodinâmicas consistentes, que muitas vezes são baseadas em equações de estado e modelos de propriedades em excesso. Já foi relatado na literatura, que para alguns sistemas, o uso de equações de estado clássicas no cálculo das propriedades termodinâmicas, faz com que os balanços de *exergia* resultem em valores inconsistentes, com *geração* de *exergia*, ao invés de *destruição*. Pela termodinâmica, este processo ocorre obrigatoriamente com a geração de entropia, e conseqüente *destruição* de *exergia*. Para estes casos é necessário o emprego de modelos mais complexos para o cálculo destas propriedades. Estes modelos precisam de várias constantes que não estão disponíveis na literatura para uma série de sistemas. Sendo necessário inclusive em alguns casos, como no sistema metanol/água, o cálculo de dos termos de entalpia de excesso e entropia de excesso de cada corrente da coluna (FARIA e ZEMP, 2005).

Atualmente, a forma mais adequada de serem realizados estes cálculos é por meio do uso de ferramentas computacionais e simuladores de processos da área de engenharia química (*PE 2000, Aspen Plus, Aspen Hysys, ChemCad*, etc.), que permitem de maneira rápida e confiável uma avaliação dos resultados gerados a partir da especificação e programação das condições de operação do processo.

Em cada simulação realizada é possível observar a construção gráfica dos perfis de entalpia, entropia e *exergia* gerados computacionalmente, as cargas térmicas exigidas pelo condensador e pelo refeedor da coluna, o estágio de alimentação, dentre diversas outras variáveis de projeto. O processo de otimizar o consumo energético da operação consiste em analisar os balanços de *exergia* em função das correntes que chegam e saem de cada estágio da coluna e verificar sua alteração com os parâmetros de operação da coluna. Avalia-se a o perfil de *exergia* gerado para cada variação realizada nos parâmetros de operação já citados e é possível notar que ocorrem perdas de *exergia* em cada estágio da coluna, pois em cada estágio ocorre um processo de separação em função da existência de forças motrizes. A condição de operação onde ocorre a minimização destas perdas, atendendo integralmente as necessidades do processo, indica o ponto ótimo de operação.

## 2.5 Simulações dos Processos de Destilação Alcoólica

A destilação é um processo de separação física que se baseia na diferença de volatilidade entre as substâncias a serem separadas, sendo esta diferença, a exigência do ponto de vista físico química para que seja possível a separação. Grande parte dos processos de destilação alcoólica contínuos, sejam eles para a produção dos diferentes tipos de álcoois, são realizados, no Brasil, em colunas de pratos ou bandejas, contendo válvulas ou furos projetados para realizar a separação dos componentes envolvidos. Geralmente as colunas de destilação são divididas em duas regiões distintas. A primeira região, localizada entre o estágio que recebe a corrente de alimentação e o topo da coluna, é conhecida como seção enriquecedora ou seção de retificação, onde a vazão de vapor ascendente é maior que o líquido descendente, fazendo com que esse vapor seja enriquecido no(s) componente(s) mais volátil(eis). A segunda região, localizada abaixo do estágio que recebe a corrente de alimentação, sem a inclusão do mesmo, é conhecida como seção de exaustão ou seção de esgotamento, onde a vazão do líquido descendente se torna maior que o vapor ascendente, concentrando o(s) elemento(s) menos volátil(eis) no líquido descendente.

A simulação desse tipo de processo envolve a resolução de um sistema de equações contendo balanços de massa, de energia, de *exergia* e relações de equilíbrio de fases. Uma síntese deste conjunto de equações é discutida nos itens a seguir.

## 2.6 Modelagem Termodinâmica

A modelagem termodinâmica do sistema de destilação é dividida em duas partes e é toda realizada pelo simulador de processos *Aspen Plus* 8.5 em seu algoritmo de resolução rigorosa pelo modelo *Radfrac*, que trabalha com as seguintes equações:

- Equações MESH: as quais combinam o balanço material, as relações de equilíbrio, as equações de somatória e o balanço de energia pela primeira lei da termodinâmica.
- Equações de balanços *exergéticos*: deduzidas a partir da segunda lei da termodinâmica, como veremos posteriormente.

## 2.7 Modelo *Radfrac*

O principal objetivo de se realizar um processo de simulação computacional é se utilizar da capacidade do software para adquirir uma solução do complexo sistema de equações que possam representar o processo real. Para a simulação de qualquer processo de destilação, deve-se selecionar um modelo adequado capaz de representar os balanços globais e por estágio, de massa, energia e se possível *exergia* do sistema de destilação em estudo.

O modelo utilizado para resolução destas equações nas simulações deste trabalho, conhecido como *Radfrac*, toma como base para descrever a coluna o conjunto de equações MESH (KISTER, 1992). Outros modelos ainda se encontram disponíveis, como o modelo *Ratefrac*, utilizado quando torna-se necessário levar em consideração a difusividade dos componentes a serem separados.

O método *RadFrac* é um método rigoroso para simulação do processo de destilação, comportado pelo simulador *Aspen Plus*. Não são feitas suposições radicais e pode ser aplicado na simulação de diversas operações unitárias. É capaz de trabalhar com qualquer número de fluxos de entrada e de saída no processo.

É um método rigoroso capaz de ser aplicado a quase qualquer operação de separação líquido-vapor, por exemplo:

- Destilação fracionada;
- Absorção e despojamento;
- Destilação extrativa e azeotrópica;
- Destilação reativa (equilíbrio, conversão, sistemas eletrolíticos, entre outros).

Possui diversas vantagens frente a métodos primordiais (McCabe-Thiele, Ponchon Savarit, etc.), como:

- Especificação de um maior número de correntes de entrada e saída;
- Especificação de tipos de pratos e recheios;
- Especificação da Eficiência de Murphree;
- Análises Térmica e Hidráulica;
- Algoritmos de convergência: inside – out, Newton, Sum-rates.

As soluções apresentadas por este método possibilitam determinar as condições de operação de uma coluna.

As equações analisadas servem para descrever a coluna em termos de um balanço global de massa e de energia, além das equações fundamentais de somatória que definem a composição das correntes de saída da coluna em termos de frações mássicas ou molares. Também é possível determinar as condições de equilíbrio de fase, composição estágio a estágio, balanço material e de energia em cada estágio. Estas equações, conhecidas como equações MESH (*Mass, Equilibrium, Summation and Heat*), representam a coluna num conjunto de equações que devem ser satisfeitas segundo as restrições impostas pelo processo.

Algumas das variáveis independentes dessas equações são frequentemente referenciadas como:

- Temperatura do estágio;
- Vazão interna de líquido e vapor;
- Razão de refluxo;
- Número de estágios da coluna;
- Composição por componentes do estágio ou vazão de líquido e vapor.

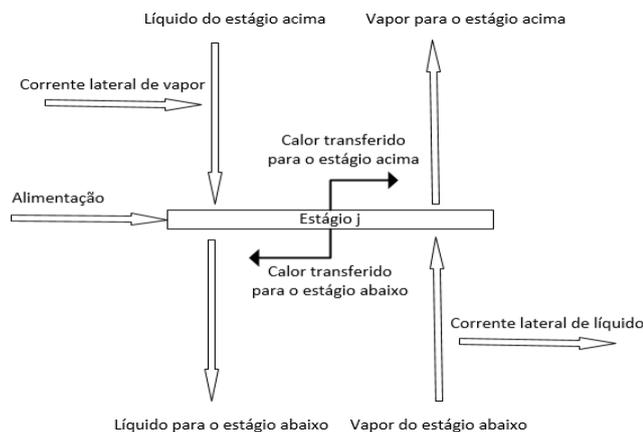
Serão apresentadas as principais equações utilizadas pelo método *Radfrac* que regem uma coluna de destilação, admitindo a idealidade dos estágios. Todas são referenciadas em Kister (1992).

A principal vantagem de se utilizar um método rigoroso é resolver o balanço de componentes em cada um dos estágios de uma coluna. Porém, para a construção adequada das equações é de extrema importância saber realizar a escolha correta do método numérico a ser utilizado.

## 2.8 Balanços Materiais

A figura 2.2 ilustra as correntes utilizadas no desenvolvimento do balanço de massa sobre um estágio  $j$  da coluna de destilação, onde o equilíbrio geral em um estágio da coluna de destilação está estabelecido. Este modelo genérico nos permite fazer diversas alterações. Vapor e líquido entram no estágio  $j$  a partir dos estágios abaixo e

acima, respectivamente. A corrente de vapor será enriquecida no componente mais leve e a corrente de líquido será enriquecida no componente mais pesado. Correntes adicionais de alimentação ou produto podem ser adicionadas na coluna de destilação em um estágio intermediário como correntes laterais, as quais devem ser levadas em consideração neste estágio.



**Figura 2.2:** Correntes de entrada e saída de um estágio  $j$  da coluna.

Fonte: Adaptado de GHAZI et al. (2012).

Para uma coluna genérica sem acúmulo, com apenas uma corrente de alimentação, tem-se que o balanço global para o componente  $i$ , contando-se o número dos estágios do topo da coluna para sua base, é:

$$F_i - D_i - B_i - L_i = 0 \quad (2.1)$$

Onde  $F_i$  é a vazão molar do componente  $i$  na corrente de alimentação,  $D_i$  a vazão molar do componente  $i$  no destilado,  $B_i$  a vazão molar do componente  $i$  no produto de fundo e  $L$  é a vazão molar do componente  $i$  em uma possível corrente de retirada lateral. Vale ressaltar que pode haver mais de uma retirada lateral ou mais de uma corrente de alimentação. Da mesma forma, pode-se equacionar o balanço de massa para um determinado estágio  $j$  da coluna:

$$v_{ij-1} + l_{ij+1} - v_{ij} - l_{ij} = 0 \quad (2.2)$$

Nesta equação  $v_{ij-1}$  é a vazão molar do componente  $i$  no vapor do estágio  $j-1$ ,  $l_{ij+1}$  é a vazão molar do componente  $i$  no líquido do estágio  $j+1$ ,  $v_{ij}$  é a vazão molar do

componente  $i$  no vapor do estágio  $j$  e  $l_{ij}$  é a vazão molar do componente  $i$  no líquido do estágio  $j$ . Posteriormente neste texto trataremos da aplicabilidade dessas equações a análise *exergética*.

Caso o estágio em que se realiza o balanço de massa for o estágio de alimentação, então teremos a adição da vazão molar do componente  $i$  da corrente alimentação. Assim obtém-se:

$$v_{ij-1} + l_{ij+1} - l_{iF} - v_{ij} - l_{ij} = 0 \quad (2.3)$$

Nesta equação,  $l_{iF}$  é a vazão molar do componente  $i$  na corrente de alimentação da coluna (em ambas as fases). Da mesma forma, se existir retirada lateral no estágio em questão, a vazão do componente deve ser subtraída do balanço acima, seja na fase vapor ou na fase líquida.

Para nos auxiliar na resolução do balanço de massa da coluna de destilação, assim como para outros processos, podemos utilizar a equação da somatória, que nada mais é que cálculo da soma das frações molares de cada componente em cada estágio ou corrente de entrada/saída da coluna. Basicamente, ela exige que a soma das frações molares/mássicas de líquido e vapor em qualquer corrente material deve ser igual à unidade.

Portanto,

Para o líquido:

$$\sum_{i=1}^c x_{ij} - 1 = 0 \quad (2.4)$$

Para o vapor:

$$\sum_{i=1}^c y_{ij} - 1 = 0 \quad (2.5)$$

Nestas equações o índice  $i$  faz referência a um determinado componente contido na mistura, o índice  $j$  representa o estágio/corrente analisado,  $x$  a fração molar do líquido e  $y$  a fração molar do vapor.

Para todas as equações descritas a partir daqui, os índices e as variáveis seguirão a mesma referência. Caso haja uma nova variável, a mesma será identificada.

## 2.9 Balanços de Energia

As equações de balanço de energia são requeridas em qualquer método rigoroso existente. Logo, após o devido equacionamento, o balanço de energia global da coluna é:

$$FH_{alim} - DH_{dest} - Bh_{fund} - \sum_n w_n H_{wn} + Q_{ref} - Q_{cond} = 0 \quad (2.6)$$

Sendo  $F$  é a vazão de alimentação,  $H_{alim}$  a entalpia da corrente de alimentação,  $D$  a vazão da corrente de destilado,  $H_{dest}$  a entalpia do destilado,  $B$  a vazão do produto de fundo,  $H_{fund}$  a entalpia do produto de fundo,  $w$  a vazão das  $n$  possíveis retiradas laterais da coluna,  $H_w$  a entalpia da retirada lateral,  $Q_{ref}$  a carga térmica fornecida pelo refervedor,  $Q_{cond}$  a carga térmica retirada no condensador.

Da mesma forma, pode-se escrever o balanço de energia para um determinado estágio, que sem alimentação e retiradas laterais, torna-se:

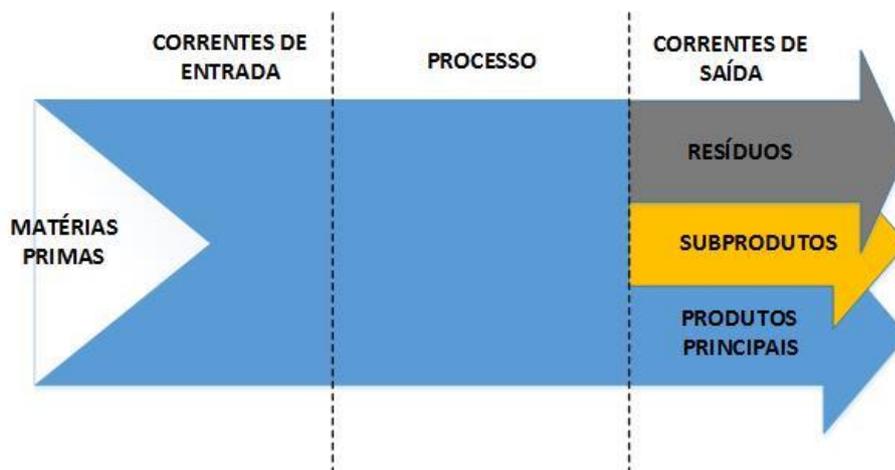
$$V_{j-1}H_{j+1} + L_{j-1}H_{j-1} - V_jH_j - L_jH_j = 0 \quad (2.7)$$

Não necessariamente o balanço de energia deve ser resolvido em conjunto com o balanço material por componente ou total. Com algoritmos de resolução mais atuais é possível resolve-los simultaneamente com outras equações do método *Radfrac* para obter as variáveis independentes da coluna. Já em outros métodos, eles são usados posteriormente para se obter um melhor ajuste dos resultados obtidos pelo balanço de massa.

## 2.10 Balanços de Exergia

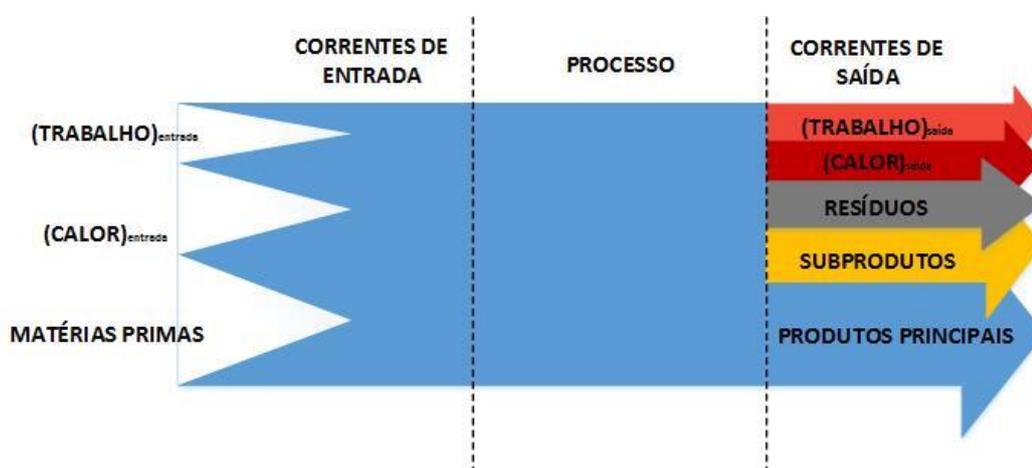
Para um melhor entendimento do conceito básico de *exergia* se requer inicialmente a realização de uma comparação entre os balanços de *exergia* e entalpia. Como ilustrado nas Figura 2.3 e Figura 2.4 temos representados os balanços materiais e

de energia, demonstrando-se que ambos (matéria e energia) são conservados em cada processo e suas quantidades não podem ser destruídas. A matéria inserida em um sistema pode ser toda obtida na saída de processos contínuos na forma de produtos ou subprodutos. Da mesma forma, a energia que entra no sistema sob a forma de trabalho, calor ou matéria-prima, pode ser encontrada na saída como trabalho, calor e nas correntes de produtos, subprodutos e resíduos.



**Figura 2.3:** Balanço Material.

Fonte: Adaptado de GHANNADZADEH (2012).

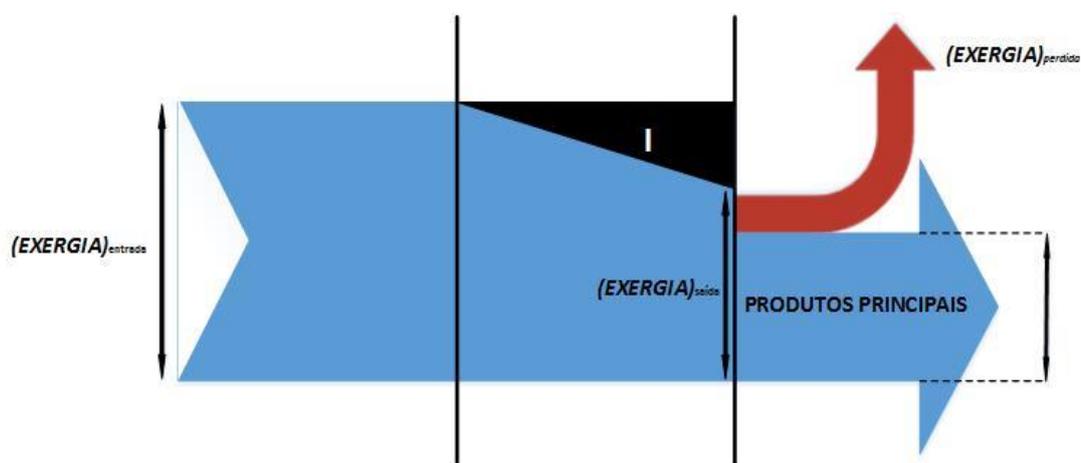


**Figura 2.4:** Balanço Energético.

Fonte: Adaptado de GHANNADZADEH (2012).

No entanto, a ideia da conservação de massa e energia por si só é insuficiente para descrever alguns aspectos importantes da utilização eficiente da energia envolvida. Este tipo de análise do processo não proporciona *insights* sobre como a qualidade da energia se propaga através do processo. A noção de *exergia* contribui para preencher

esta lacuna por meio da quantificação da qualidade da energia e, em seguida, leva em conta o quanto o processo real se distancia do processo termodinamicamente ideal. A diminuição das perdas de *exergia* de um processo, pode se dar por exemplo pela redução no consumo de um combustível, reduzindo assim o custo de operação e aumentando a eficiência do processo. Ao considerar os saldos de *exergia*, um diagrama de Grassmann (KOTAS, 1985) tal como a ilustrada na Figura 2.5 pode ser utilizado, uma vez que realça a degradação da qualidade de energia (as setas de entrada são maiores do que os de saída).

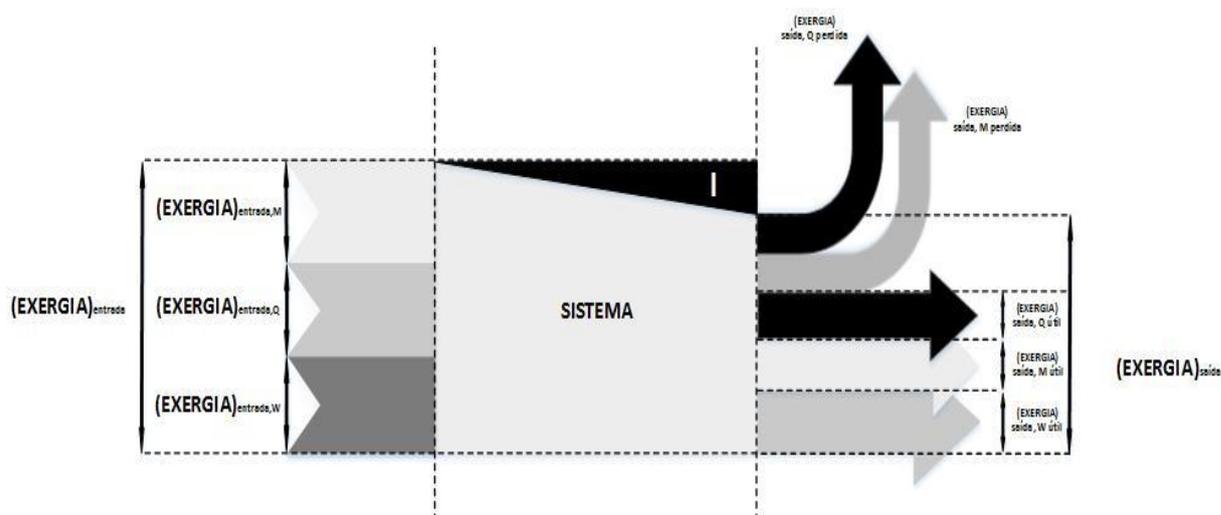


**Figura 2.5:** Diagrama de Grassmann.

Fonte: Adaptado de GHANNADZADEH (2012).

O balanço de *exergia* detalha a decomposição das correntes de entrada e saída nas formas material, trabalho ou de calor. Mais ainda, correntes de saída podem ainda se dividir em correntes de perdas, resíduos e aquelas úteis ao processo. Correntes de perdas incluem todas as correntes rejeitadas ao ambiente que não são recicladas ou reusadas como correntes materiais, de calor ou trabalho em outras etapas do processo.

Ao contrário dos balanços de energia que são diretamente deduzidos da Primeira Lei Termodinâmica, os balanços de *exergia* são deduzidos de uma combinação da formulação da Primeira e da Segunda Lei da Termodinâmica. O sistema genérico estudado que ilustra os balanços de *exergia* está ilustrado na Figura 2.6. Este sistema pode representar também uma única operação unitária, um processo global ou parte do processo, entradas (materiais, calor e trabalho) ou transformadas em saídas (materiais, calor e trabalho) por operações térmicas ou químicas.



**Figura 2.6:** Representação geral do balanço de exergia de um sistema ou processo.

Fonte: Adaptado de GHANNADZADEH (2012).

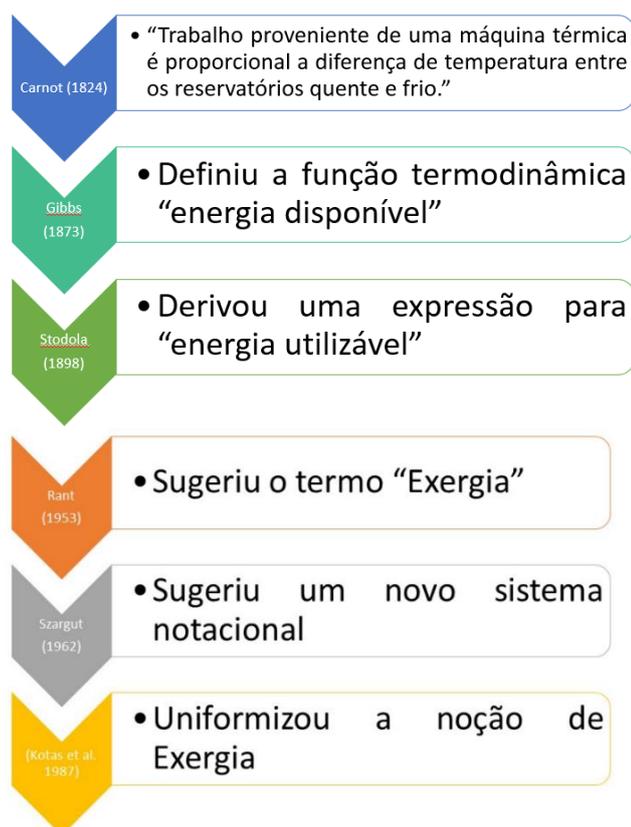
### 2.11 Uma Breve História do Conceito de *Exergia*

Em um artigo recente, Scibba e Wall (2007) apresentou uma história muito abrangente do estudo da *exergia*, deste a aparição deste termo até a forma como é compreendida hoje e será repassada neste tópico para um melhor entendimento deste conceito. Algumas datas importantes são relatadas na Figura 2.7. É amplamente difundido que o conceito de *exergia* originou-se a partir do estudo inicial do que se tornaria mais tarde a termodinâmica clássica. Uma data mais precisa da partida é 1824, quando Carnot afirma que "o trabalho que pode ser extraída de um motor de calor é proporcional à diferença de temperatura entre a quente e o reservatório frio" (CARNOT 1824). Esta simples afirmação foi mais tarde trabalhada por diferentes obras (CLAPEYRON 1834; RANKINE 1851; THOMSON 1853) e contribuiu para a postulação da segunda lei da termodinâmica (CLAUSIUS 1879; CLAUSIUS 1960). No entanto, Gibbs, quem definiu a "energia disponível", e foi o primeiro a introduzir explicitamente a noção de trabalho disponível.

Tait (1868), e Lord Kelvin (THOMSON et al. 1962), também haviam definido algo semelhante a disponibilidade proposta por Gibbs, porém sem a discussão alargada deste conceito (TAIT 1877). Sem referência direta ao trabalho de Gibbs, dois pesquisadores (STODOLA 1898; GOUY 1901) obtiveram de forma independente uma expressão para "energia útil" ("*énergie utilisable*" em francês) como a expressão " $\Delta H - T_0 \Delta S$ ", na qual  $\Delta H$ ,  $T_0$  e  $\Delta S$  são, respectivamente, a variação de entalpia das correntes materiais, a temperatura ambiente e a variação de entropia das mesmas.

Em uma reunião científica em 1953, o termo *exergia* (em alemão "Exergie") foi sugerido para denotar a "capacidade de trabalho técnico" pelo esloveno Zoran Rant, pela primeira vez. A Energia literalmente significa "trabalho interno" (do grego en [εν] e ergon [εργον]); já o prefixo ex [εξ] implica em vez disto uma quantidade "externa".

Rant chegou a publicar um ensaio linguístico (RANT 1956) para discutir os nomes equivalentes internacionais para essa quantidade. Ele propôs Exergie em francês, em espanhol e português *exergia*, *essergia* em italiano e *eksergija* em línguas eslavas. Ao adotar este nome (ou seja, *exergia*), todas as expressões anteriores (por exemplo, energia disponível, trabalho disponível, energia útil, e o potencial de entropia) poderiam ser substituídos. Demorou 50 anos para a denominação proposta por Rant tornar-se aceita em todo o mundo. No entanto, alguns autores norte-americanos ainda usam a terminologia de "disponibilidade" em vez de "*exergia*".



**Figura 2.7:** História do termo exergia.

Fonte: Adaptado de GHANNADZADEH (2012).

Duas notações diferentes foram sugeridas (SZARGUT 1962; WEINGÄRTNER 1969) como um tópico a ser discutido para elaboração de um sistema com uma notação

padrão. Este problema da notação foi formalmente resolvido muito mais por tarde (KOTAS et al. 1987), apoiando o que temos estudado com o nome de *exergia*, por já haver inúmeras definições de "eficiência *exergética*" utilizadas por autores que trabalham nesta área campo (GHANNADZADEH 2012).

## 2.12 Componentes da *Exergia*

Com base na segunda lei, existe a possibilidade de geração de trabalho quando dois sistemas em diferentes estados estão condicionados a entrar em equilíbrio. A *Exergia* é o trabalho máximo teórico obtido por um sistema idealizado adequadamente chamado de "ambiente de referência de *exergia*" ou simplesmente "ambiente" e do sistema de interesse interagindo ao alcance do equilíbrio (MORAN e SHAPIRO 2006). Mais recentemente, a definição de *exergia* moderna tem sido enunciada como se segue: "*exergia* é o trabalho útil teórico máximo obtido se um sistema S é trazido ao equilíbrio termodinâmico com o ambiente, pela realização de um processo em que o sistema S interage apenas com este ambiente" (SCIUBBA e WALL, 2007).

Como existem muitas formas em que os fluxos de energia se apresentam na natureza, existem também várias formas correspondentes aos fluxos de *exergia*. O significado físico da "equivalência *exergética*" é dado a seguir:

A energia cinética de um sistema a uma velocidade  $V$ , com respeito ao proposto por Galileu pode ser, em princípio, inteiramente recuperada em qualquer outra forma: potencial (princípio do pêndulo ideal); calor (atrito); mecânica (turbina de impulso); ou elétrica (efeito piezoelétrico). Portanto, a quantidade de *exergia* cinética é igual à quantidade de energia cinética.

O mesmo aplica-se a energia potencial gravitacional e a todas as formas de energia relacionadas com movimento num campo de força conservadora. Portanto, a quantidade de *exergia* potencial é igual à quantidade de energia potencial.

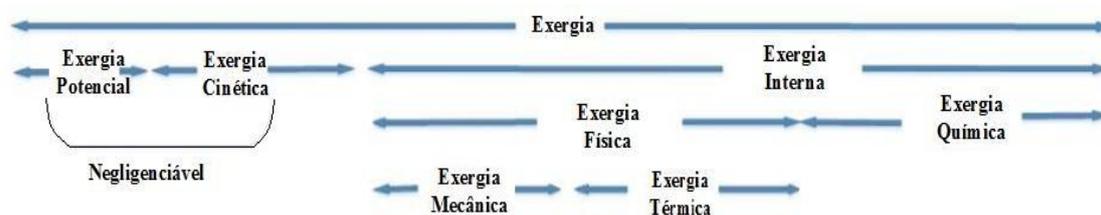
O trabalho mecânico e energia elétrica também podem ser livremente convertidas umas nas outras. Portanto, a quantidade de trabalho de eixo é igual à sua correspondente *exergética*.

A energia química não pode ser inteiramente transformada em trabalho mecânico, o máximo de "trabalho" que pode ser extraído a partir de um sistema composto por uma única substância pura não só depende da entalpia química de

formação dessa substância, mas também da diferença entre a sua concentração no sistema e no ambiente de referência.

O calor é a forma "menos disponível" do fluxo de energia: a porção que pode ser convertida em trabalho depende tanto do sistema quanto da temperatura de referência.

Processos químicos normalmente lidam com matéria, trabalho e calor, considerando diretamente os fluxos de matéria e energia que se correspondem e se relacionam diretamente com os fluxos de *exergia*. É mais complexo para um fluxo de matéria, pois sua *exergia* é dividida em vários componentes, como ilustra a Figura 2.8.



**Figura 2.8:** Componentes da exergia.

Fonte: Adaptado de GHANNADZADEH (2012).

Quando um sistema passa por um processo sem quaisquer alterações significativas na velocidade e altura entre as condições de entrada e de saída, as componentes cinética e potencial da *exergia* podem ser negligenciadas. Este é o caso para a maior parte dos processos a serem simulados em simuladores de processos. Negligenciando estas componentes, a *exergia* física e *exergia* química tornam-se os dois principais contribuintes do processo. Como consequência, a *exergia* total de uma corrente de matéria em determinadas condições é então expressa como a soma da *exergia* química com a *exergia* física.

Dadas essas explicações, as *exergias* física e química podem ser definidas da seguinte forma:

- *Exergia* física é o trabalho que pode ser obtido trazendo o sistema a partir das suas condições no estado a ser estudado do processo para o estado de referência.
- *Exergia* química é o trabalho que pode ser obtido trazendo uma substância do estado de referência para o estado “morto” padrão. De acordo com Rivero e Anaya (1997), o equilíbrio químico tem duas contribuições: a *exergia* reacional resultante da reação química necessária para produzir espécies estáveis no ambiente a partir de suas composições iniciais existentes na natureza e a *exergia* concentracional, que resulta do processo necessário para gerar a concentração química das espécies produzidas nas concentrações obtidas no estado avaliado (RIVERO e ANAYA 1997).

### 2.13 Estado de Referência

Considerando que a avaliação da *exergia* física de uma corrente de processo requer a definição da temperatura e pressão de um ambiente de referência o cálculo da *exergia* química também não pode ser realizado sem uma descrição precisa das substâncias e suas formas encontradas na natureza.

O simulador *Aspen Plus* possui um banco de dados próprios para os principais compostos em relação a componente de *exergia* química e permite ao usuário inserir qual o estado de referência para o cálculo da *exergia* física, sendo este adotado e imposto por padrão nas condições de temperatura igual a 298,15 K e pressão de 1 atm.

### 2.14 Aplicação da Análise Exergética no Processo de Destilação

No processo de destilação, nos interessa conhecer a forma com que a energia fornecida à coluna pelo sistema de utilidades é aproveitada e isto do ponto de vista termodinâmico corresponderia a determinação de uma eficiência termodinâmica para a coluna de destilação. Para a determinação da eficiência de um processo, devemos primeiro quantificar o mínimo de energia para que o processo de separação ocorra. O processo que consome somente este valor mínimo de energia deve apresentar a maior eficiência termodinâmica possível, e é considerado o processo ideal de separação. Tendo este valor mínimo como referência, e o valor realmente consumido pelo processo de interesse, pode-se comparar o quanto o processo de interesse gasta a mais do que o mínimo e assim determinar o quanto a eficiência termodinâmica do processo pode ser melhorada.

Com a aplicação da Primeira e da Segunda Lei da Termodinâmica a um processo genérico de separação isotérmico ideal, obtemos uma expressão que nos permite o cálculo da mínima quantidade de energia, na forma de trabalho, consumida por este processo. Esta demonstração foi utilizada também por trabalhos posteriores na área de destilação, com a validação de modelos aplicados a sistemas ideais e não ideais (FARIA e ZEMP, 2003). Para  $j$  correntes de entrada e  $k$  correntes de saída teremos (HENLEY e SEADER, 1981):

$$-W_{\text{isotérmico}} = \sum_{\text{saída}} n_k h_k - \sum_{\text{entrada}} n_j h_j - T_0 \left[ \sum_{\text{saída}} n_k s_k - \sum_{\text{entrada}} n_j s_j \right] \quad (2.8)$$

Ou ainda:

$$-W_{min} = \Delta H_{correntes} - T_0 \Delta S_{correntes} \quad (2.9)$$

Nestas equações,  $n$  é a vazão molar de cada corrente,  $H$  é a entalpia de cada corrente,  $S$  é a entropia de cada corrente e  $T_0$  é a temperatura ambiente.

Esta equação mostra que o cálculo do trabalho mínimo não depende do processo em si, mas das propriedades termodinâmicas das correntes de entrada e de saída de cada em cada etapa do processo.

O objetivo agora tornou-se desenvolver uma expressão que nos permita associar este trabalho mínimo à quantidade de trabalho que seria requerida pelo mesmo processo, se este agora operasse de maneira não ideal, com menor eficiência termodinâmica e com irreversibilidades termodinâmicas presentes. Uma forma de comparar o quanto o novo processo se afasta da eficiência termodinâmica máxima foi proposto por Denbigh (1956) e Henley e Seader (1981) que desenvolveram uma expressão para esta relação, levando em conta um processo de separação não-isotérmico, resultando em:

$$(\Delta H - T_0 \Delta S)_{correntes} = \sum \left(1 - \frac{T_0}{T_i}\right) Q_i - T_0 \Delta S_{irr} \quad (2.10)$$

Onde  $T_i$  é a temperatura de cada fonte térmica que troca calor com o processo,  $Q_i$  é o calor trocado por cada fonte térmica e  $\Delta S_{irr}$  é a entropia gerada no processo

Se lembrarmos a definição da Equação 2.9, veremos que o lado esquerdo da Equação 2.10 corresponde à definição de trabalho mínimo de separação. O primeiro termo do lado direito relaciona todo o calor trocado com o processo de separação por fontes externas (ambiente) e o último termo relaciona todas as irreversibilidades presentes no processo.

No lado esquerdo da Equação 2.10 é definido matematicamente a *exergia*, logo:

$$\Delta Ex = \Delta H - T_0 \Delta S \quad (2.11)$$

A Equação 2.10 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\Delta Ex_{correntes} = \sum \left(1 - \frac{T_0}{T_i}\right) Q_i - T_0 \Delta S_{irr} \quad (2.12)$$

Os termos mostrados no somatório presentes no lado direito da Equação 2.12 são os *trabalhos* envolvidos nos processos de troca térmica entre cada fonte (estágio da coluna), a  $T_i$ , e o ambiente, a  $T_0$ . O trabalho mínimo de separação é definido como a quantidade de *exergia* envolvida no processo de separação reversível,  $\Delta Ex_{correntes}$ , e o trabalho envolvido no processo devido às trocas térmicas com o ambiente representa uma quantidade de *exergia* trocada entre o ambiente e o processo, ou seja, a *exergia* fornecida pelo ambiente para que a separação ocorra é dada por:

$$\Delta Ex_{for.amb.} = \sum \left(1 - \frac{T_0}{T_i}\right) Q_i \quad (2.13)$$

Portanto, a Equação 2.12 torna-se:

$$\Delta Ex_{correntes} = \Delta Ex_{for.amb.} - T_0 \Delta S_{irr} \quad (2.14)$$

Rearranjando o termo  $T_0 \Delta S_{irr}$  na equação 2.14, obtemos:

$$T_0 \Delta S_{irr} = \Delta Ex_{for.amb.} - \Delta Ex_{correntes} \quad (2.15)$$

Por meio da equação escrita desta forma observamos que, como o termo  $\Delta Ex_{correntes}$  é constante,  $T_0 \Delta S_{irr}$ , será maior quanto maior for a *exergia* fornecida pelo ambiente ao processo de separação. Lembrando que o termo  $T_0 \Delta S_{irr}$  está relacionado à entropia gerada no processo e que quando este termo é maior significa que o processo gerou mais entropia e as irreversibilidades envolvidas no processo foram maiores, concluímos que quanto maiores as irreversibilidades do processo, mais *exergia* precisa ser fornecida pelo ambiente para que a mesma separação ocorra. Se independentemente da quantidade de entropia gerada no processo, somente a quantidade  $\Delta Ex_{correntes}$  é necessária para a separação, isto significa que  $T_0 \Delta S_{irr}$ , é a parcela da *exergia* fornecida

pelo ambiente que não foi utilizada na separação, que foi portanto desperdiçada ou perdida.

Por este motivo, o termo  $T_0\Delta S_{irr}$ , é usualmente chamado de trabalho perdido ou *exergia* perdida ( $\Delta Ex_{perdida}$ ) sendo que a Equação 2.14 pode agora ser escrita da seguinte forma:

$$\Delta Ex_{correntes} = \Delta Ex_{amb} - \Delta Ex_{perdida} \quad (2.16)$$

Nesta equação,  $\Delta Ex_{correntes}$  é a variação de *exergia* entre os estados inicial e final do processo de separação, corresponde à variação de *exergia* das correntes de entrada e saída;  $\Delta Ex_{for.amb.}$  é a *exergia* que o ambiente fornece ao processo de separação e  $\Delta Ex_{perdida}$  é a *exergia* perdida devido a irreversibilidades do processo.

Com base nestes conceitos, alguns autores (KING, 1980, e HENLEY e SEADER, 1981) definiram a eficiência termodinâmica de um processo de separação baseados no balanço de *exergia*:

$$\eta = \frac{\Delta Ex_{correntes}}{\Delta Ex_{for.amb.}} \quad (2.17)$$

A equação acima é uma definição da eficiência termodinâmica para um processo de separação, pois se o processo não apresentar irreversibilidade alguma, o termo de *exergia* perdida da Equação 2.16 é nulo, o denominador da Equação 2.17 torna-se igual à *exergia* das correntes e a razão mostrada na Equação 2.17 é igual à unidade. Em um processo no qual existem irreversibilidades, há *exergia* perdida, o denominador da Equação 2.17 é sempre maior que o numerador e a eficiência apresentada pela Equação 2.17 conseqüentemente será menor do que a unidade.

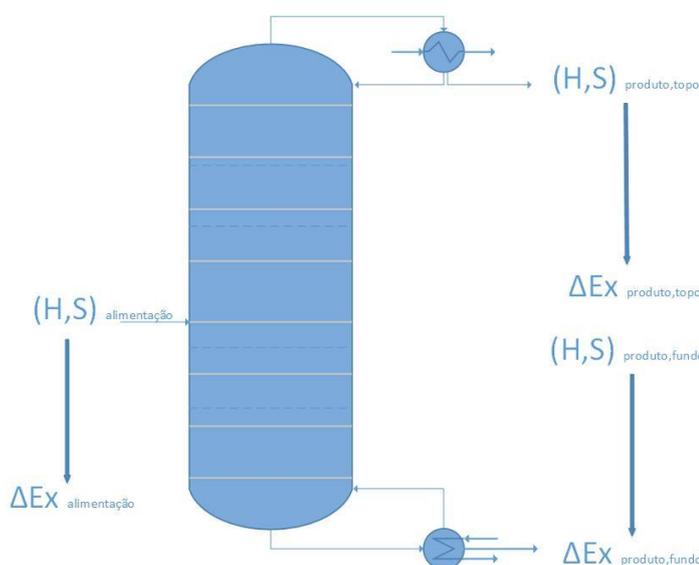
### 2.15 Balanços de *Exergia* Aplicados à Coluna de Destilação

Nos itens anteriores uma série de conceitos sobre a análise *exérgica* foi apresentada. Neste item será mostrado como estes conceitos podem nos fornecer os balanços de *exergia* para as colunas de destilação. Para isto, começaremos com os balanços de *exergia* numa coluna típica.

Em primeiro lugar para a *exergia* das correntes, deve-se recordar a definição dada pela Equação 2.11:

$$\Delta Ex_{correntes} = \Delta H_{correntes} - T_0 \Delta S_{correntes} \quad (2.18)$$

Quando aplicada a cada uma das correntes de uma coluna de destilação, esta definição nos fornece os conteúdos *exergéticos* das respectivas correntes (Figura 2.9). Estes valores permitem que se faça um balanço de *exergia* entre as correntes de entrada e de saída coluna.

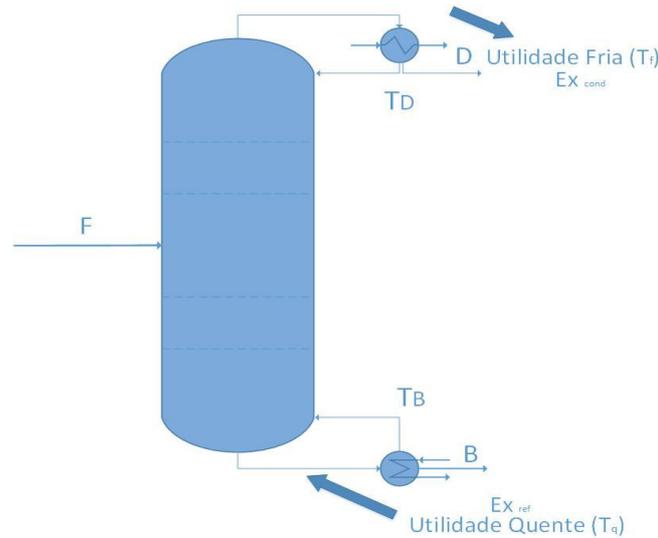


**Figura 2.9:** Conteúdos exergéticos das correntes de entrada e de saída de uma coluna de destilação.

A diferença entre os conteúdos *exergéticos* dos produtos e da alimentação é a quantidade de *exergia* envolvida no processo de separação.  $\Delta Ex_{correntes}$ :

$$\Delta Ex_{correntes} = (\Delta Ex_{produto\ topo} + \Delta Ex_{produto\ fundo}) - \Delta Ex_{alimentação} \quad (2.19)$$

A *exergia* necessária para que a separação ocorra deve ser fornecida por alguma fonte externa à coluna. Esta fonte externa é o sistema de utilidades da planta química, que fornece à coluna o calor necessário para que a separação ocorra (Figura 2.10).



**Figura 2.10:** Fontes externas que fornecem as cargas térmicas na coluna.

Lembrando-se que a *exergia* fornecida pelo ambiente (que agora é representada pelo sistema de utilidades) é definida pela Equação 2.13 em função de um somatório envolvendo todas as fontes térmicas relacionadas com o processo, e que no caso somente há duas fontes térmicas envolvidas, o reboador e o condensador, temos a Equação 2.13 descrita como:

$$\begin{aligned} \Delta Ex_{utilidades} &= \sum \left(1 - \frac{T_0}{T_i}\right) Q_i \\ &= \sum \left(1 - \frac{T_0}{T_{ref}}\right) Q_{ref} - \sum \left(1 - \frac{T_0}{T_{cond}}\right) Q_{cond} \end{aligned} \quad (2.20)$$

Ou:

$$\Delta Ex_{utilidades} = \Delta Ex_{reboador} - \Delta Ex_{condensador} \quad (2.21)$$

Na Equação 2.20 os termos  $T_{ref}$  e  $T_{cond}$  são as temperaturas do reboador e do condensador, respectivamente. Os fluidos no reboador e no condensador não trocam calor a temperatura constante com as utilidades externas à coluna, e portanto não há um único valor para  $T_{ref}$  ou  $T_{cond}$ . Entretanto, para o cálculo da *exergia* do reboador e condensador, estas temperaturas podem ser calculadas por uma média logarítmica (Linnhoff, 1983), assim:

$$T_{ref} = \left( \frac{T_e - T_s}{\ln(T_e/T_s)} \right) \quad (2.22)$$

Nesta equação,  $T_e$  é a temperatura do fluido que entra no refeedor e  $T_s$  é a temperatura do fluido que sai do refeedor.

Para o caso do condensador a mesma equação se aplica, bastando que para isto  $T_e$  seja a temperatura do fluido que entra no *condensador* e  $T_s$ , a temperatura do fluido que sai do *condensador*.

O cálculo das grandezas  $\Delta Ex_{utilidades}$  e  $\Delta Ex_{correntes}$  permite que tenhamos um balanço global de *exergia* de uma coluna e portanto uma noção do quanto a coluna consome de *exergia* a mais do que o necessário para a separação,  $\Delta Ex_{correntes}$ , estabelecendo-se o quanto de *exergia* está sendo desperdiçada,  $\Delta Ex_{perdida}$ . Isto fica claramente mostrado com base na Equação 2.16 escrita da seguinte forma:

$$\Delta Ex_{perdida} = T_0 \Delta S_{irr} = \Delta Ex_{utilidades} - \Delta Ex_{correntes} \quad (2.23)$$

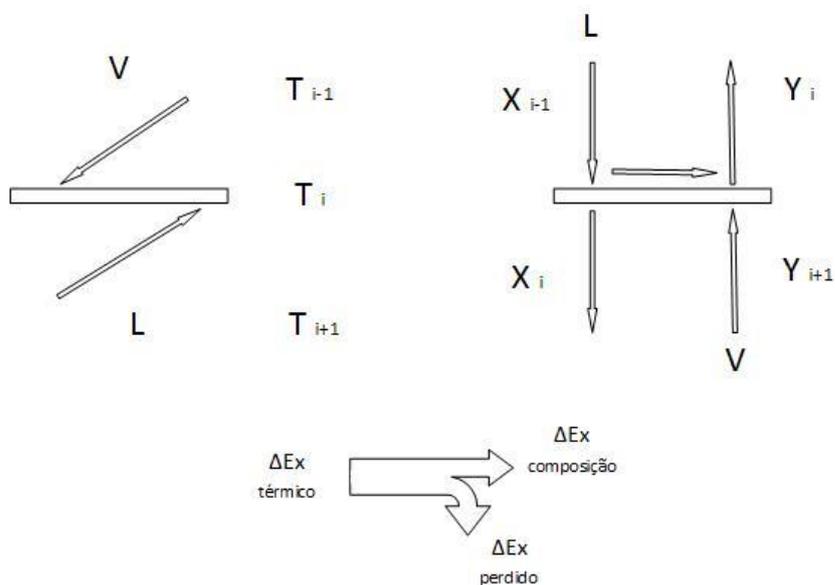
Vale lembrar que a *exergia* fornecida pelo sistema de utilidades,  $\Delta Ex_{utilidades}$ , é sempre maior que a *exergia* das correntes,  $\Delta Ex_{correntes}$ , pois o processo de separação não ocorre reversivelmente. Logo, o termo,  $\Delta Ex_{perdida}$ , que está relacionado com a existência de irreversibilidades no processo será sempre maior do que zero.

Até agora, o que temos é a simples aplicação do balanço global de *exergia* numa coluna de destilação, o que é útil, porém não identifica que tipo de modificações que devem ser feitas na coluna para que a sua eficiência termodinâmica aumente. Se quisermos aumentar a eficiência termodinâmica da coluna, devemos primeiro identificar quais são as causas destas irreversibilidades e das perdas que compõem o termo  $\Delta Ex_{perdida}$ . Isto será feito no próximo item.

## 2.16 Forças Motrizes e a Perda de *Exergia* Estágio a Estágio

Para qualquer estágio da coluna de destilação, as correntes de líquido e vapor que se encontram não estão em equilíbrio de fases. No contato entre as correntes em cada estágio, forças motrizes de transferência de massa e de energia tendem a fazer com que se estabeleça o equilíbrio, a corrente mais quente que chega a um estágio se resfria

cedendo energia à corrente mais fria e há uma transferência de massa entre as fases decorrente da própria mudança de fase e da alteração da condição de equilíbrio (Figura 2.11).



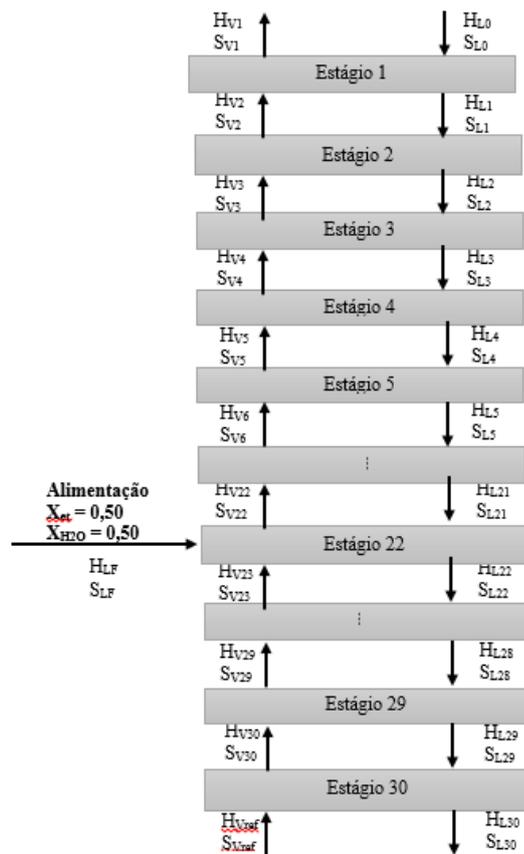
**Figura 2.11:** Fluxos de entrada e saída no estágio i de uma coluna de destilação.

Fonte: FARIA (2003).

Há uma quantidade de *exergia* associada à corrente mais quente devido à sua temperatura (*exergia térmica*); na medida em que a corrente mais quente se resfria, cede parte da sua *exergia térmica* para a corrente mais fria. Estabelecido o equilíbrio, a fase vapor está mais rica no componente mais volátil e a fase líquida mais rica no componente menos volátil, as duas fases aumentaram as suas *exergias* de composição, ou seja, parte da *exergia térmica* originalmente disponível foi transformada em *exergia* de composição. Neste processo, parte da *exergia térmica* é perdida devido à existência de forças motrizes (Figura 2.11). Há uma perda de *exergia* em cada estágio da coluna, que pode ser calculada por meio de um balanço de *exergia* em cada estágio. Para isto, tomaremos como base a definição dada pela Equação 2.24:

$$\Delta Ex_{correntes} = \Delta H_{correntes} - T_0 \Delta S_{correntes} \quad (2.24)$$

Através desta equação pode-se calcular o conteúdo *exergético* de cada uma das correntes que chega ou sai de um estágio da coluna, bastando para isto que os valores de entalpia e entropia de cada corrente sejam conhecidos (Figura 2.12).



**Figura 2.12:** Correntes para balanço de entalpia e entropia em cada estágio da coluna para separação Etanol/Água.

Fonte: ROCHA et al. (2014).

Determinado o conteúdo *exergético* de cada corrente, um balanço de *exergia* é feito da seguinte maneira:

$$\Delta Ex_{perdida\ est\acute{a}gio} = (\Delta Ex_{vapor\ entra} + \Delta Ex_{l\acute{ı}quido\ entra}) - (\Delta Ex_{vapor\ sai} + \Delta Ex_{l\acute{ı}quido\ sai}) \quad (2.25)$$

Para o estágio de alimentação da coluna, o balanço apresentado pela Equação 2.25 também é válido, desde que seja adicionado à equação o conteúdo *exergético* da alimentação. Para o caso de alimentação líquida, por exemplo, a Equação 2.25 fica:

$$\Delta Ex_{perdida\ est\acute{a}gio\ de\ alimenta\c{c}\~{a}o} = \left( \Delta Ex_{vapor\ entra} + \Delta Ex_{l\acute{ı}quido\ entra} + \Delta Ex_{alimenta\c{c}\~{a}o\ l\acute{ı}quido} \right) - \left( \Delta Ex_{vapor\ sai} + \Delta Ex_{l\acute{ı}quido\ sai} \right) \quad (2.26)$$

Calculada a perda em cada estágio da coluna, um gráfico "estágio da coluna" versus "perdas de *exergia*" pode ser montado, este gráfico é chamado de perfil de perdas de *exergia*. Como exemplo, no próximo item o perfil para um sistema não ideal será apresentado.

No entanto, as correntes de entrada e saída de cada coluna podem ser reescritas de modo a agrupar as quantidades comuns de *exergia* de cada corrente para o balanço global, da seguinte forma:

$$E_{alim} = E_{prod} + E_{perd} + E_d \quad (2.27)$$

Em destilação, estas variáveis são descritas como:

$$E_{alim} = m_{alim}(E_{alim}^F + E_{alim}^Q) + \Delta E_{vapor} \quad (2.28)$$

$$E_{prod} = m_{dest}E_{dest}^Q \quad (2.29)$$

$$E_{perd} = m_{dest}E_{dest}^F + m_{fund}(E_{fund}^F + E_{fund}^Q) + \Delta E_{resf} \quad (2.30)$$

$$E_d = I_{tot} = E_{entrada} - E_{saída} = \Delta E_{vapor} - \Delta E_{resf} + m_{alim}E_{alim} - m_{fund}E_{fund} - m_{dest}E_{dest} \quad (2.31)$$

### 2.17 Perfil de Perdas de *Exergia*

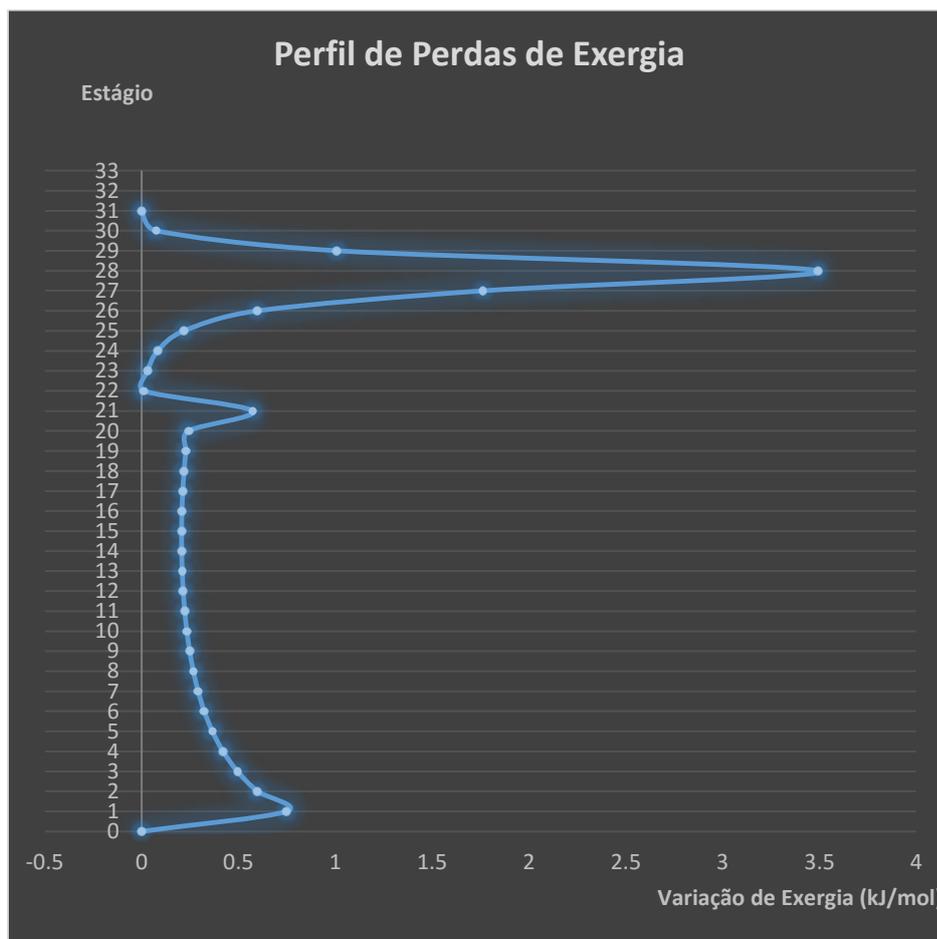
O gráfico da Figura 2.13 mostra o perfil de perdas de *exergia* para o sistema equimolar Etanol/Água para uma condição térmica da alimentação ( $q$ ) líquida,  $q = 1$ . Sendo que a condição térmica é dada pela Equação 2.32 a seguir:

$$q = \left( H_{vapor\ sat} - H_{alim} \right) / \left( H_{vapor\ sat} - H_{liq\ sat} \right) \quad (2.32)$$

A coluna simulada neste exemplo apresenta 31 estágios, com alimentação no estágio 22 e condensador total. A pressão de operação é de 1 atm constante ao longo de toda a coluna e todos os estágios da coluna são estágios ideais. Entende-se por estágio

ideal aquele no qual as fases ficam em contato tempo suficiente para que se estabeleça o equilíbrio de fases.

Todas as colunas simuladas nesta dissertação possuem um condensador total, estágios com uma *Eficiência de Murphree* de 60% e pressão de operação constante ao longo de toda a coluna. No entanto, para determinação do equilíbrio líquido-vapor e das propriedades termodinâmicas foram utilizadas as correlações descritas posteriormente.



**Figura 2.13:** Perfil de perdas de *exergia*.

Fonte: ROCHA et al. (2014).

No caso da alimentação líquido saturado mostrado na figura 2.13, o perfil de perdas de *exergia* mostra que as perdas de *exergia* estão concentradas na seção de exaustão.

Somando-se todas as perdas de *exergia* dos estágios de uma coluna de destilação, obtém-se a perda total de *exergia* da coluna, que corresponde exatamente ao termo  $T_0\Delta S_{irr}$ , ou como havíamos definido,  $\Delta Ex_{perdida}$ .

### 2.18 Sistemas Não Ideais

Neste trabalho nos interessa a aplicação da análise *exergética* sobre um sistema não ideal, para isto, de maneira similar ao mostrado no item anterior, os perfis de perdas de *exergia* foram gerados para o sistema etanol/água, estudando-se o sistema de destilação industrial apresentado no item 2.2. Para o equilíbrio líquido-vapor considera-se a fase vapor como gás não-ideal, para a correção da não idealidade da fase líquida o coeficiente de atividade é determinado pelo modelo NRTL (MARQUINI, 2007).

Para a obtenção dos perfis de composições e temperaturas da coluna o simulador de processos *Aspen Plus* foi utilizado. Os perfis obtidos são mostrados nos resultados deste trabalho.

### 2.19 Relações de Equilíbrio

O cálculo do equilíbrio de fases é de extrema importância para o dimensionamento de colunas de destilação fracionada, assim como para equipamentos de simples estágio. No cálculo de uma coluna de destilação fracionada as equações de equilíbrio para cada estágio individualmente podem ser acopladas com as equações de balanço de massa gerais, e tais colunas são eficientemente tratadas com algoritmos que resolvem simultaneamente os balanços de massa e as relações de equilíbrio.

Geralmente, a predição do equilíbrio multifase requer modelos termodinâmicos adequados para as fases fluidas disponíveis. Os métodos descritos a seguir demonstram como pode-se determinar propriedades para todas as fases usando-se as mesmas equações de estado e relações de equilíbrio. Em função dos graus de liberdade do sistema são necessárias no mínimo duas especificações para que o critério de estabilidade de fase seja satisfeito.

A equação clássica do equilíbrio líquido-vapor é dada por:

$$y_{ij} = K_{ij}x_{ij} \quad (2.33)$$

A constante de equilíbrio,  $K_{ij}$ , pode ser representada pela relação:

$$K_{ij} = \frac{\gamma_i P_i^{vap}}{\phi_i P} \quad (2.34)$$

Estas equações de equilíbrio podem sofrer as correções da não idealidade de comportamento do estágio de acordo com a condição de cada um dos pratos da coluna, através da *Eficiência de Murphree*. Essas equações podem ser remodeladas, podendo ser expressadas da seguinte forma (KISTER, 1992):

$$y_{ij} = E_{Mvij}K_{ij}x_{ij} + (1 - E_{Mvij})y_{ij+1} \quad (2.35)$$

Em que a *Eficiência de Murphree*  $E_{Mvij}$  pode ser representada por:

$$E_{Mvij} = \frac{y_{ij} - y_{ij+1}}{y_{ij}^* - y_{ij+1}} \quad (2.36)$$

Sendo  $y_{ij}^*$  é a composição do vapor se o vapor estivesse em equilíbrio com o líquido atual no estágio, e  $y_{ij}$  e  $y_{ij+1}$  são composições reais do vapor nos estágios correspondentes.

## 2.20 Equilíbrio Líquido-Vapor (ELV)

Torna-se necessário agora um entendimento das propriedades do equilíbrio ocorrido entre as fases líquida e vapor, fases estas que estão envolvidas nos processos de destilação.

Para início da discussão do ELV, é válido comentar brevemente sobre algumas propriedades físico-químicas de extrema importância para o cálculo do ELV inclusas na resolução das equações do método *Radfrac*. Algumas equações importantes que podemos destacar são: o Calor específico, Entalpia de Vaporização e a Pressão de Vapor de cada um dos componentes.

Para o cálculo da pressão de vapor, uma versão estendida da equação de Antoine é comumente usada em muitos softwares de simulação, como é o caso do *Aspen Plus*. Esta forma estendida é apresentada a seguir:

$$\ln P_i^{vap} = C_1 + \frac{C_2}{T + C_3} + C_4T + C_5 \ln T + C_6T^{C_7} \quad (2.37)$$

Os parâmetros  $C_1$  a  $C_7$  são previamente ajustados para cada componente e estão presentes no banco de dados do simulador. Outra importante propriedade é o *calor específico* a pressão constante ( $C_p$ ). Essa propriedade está envolvida diretamente no cálculo de balanços de energia no projeto de diversos processos químicos, estando, portanto, relacionado ao consumo energético dos sistemas utilidades empregados na operação da coluna de destilação e também na variação de entalpia dos compostos ao longo da coluna. O simulador utiliza a seguinte relação para o cálculo dessa propriedade,

$$C_p = A + B \left( \frac{C}{T \sinh(C/T)} \right)^2 + D \left( \frac{E}{T \cosh(E/T)} \right)^2 \quad (2.38)$$

Onde  $T$  é a temperatura do sistema em K, e  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$  e  $E$  são constantes ajustadas para cada componente da mistura a ser destilada, presentes no banco de dados do simulador, e  $C_p$  é dado em cal/mol.K.

A entalpia de vaporização ( $\lambda$ ) de um composto, ou ainda calor latente de vaporização, também está relacionada ao consumo de energia nos sistemas de destilação. Desta forma, essa propriedade torna-se bastante importante para a otimização do consumo energético do processo. O simulador *Aspen Plus* utiliza a seguinte relação para o cálculo desta propriedade:

$$\lambda = A(1 - T_r)^{(B + CT_r + DT_r^2 + ET_r^3)} \quad (2.39)$$

Onde  $\lambda$  é o calor latente de vaporização dado em kcal/mol,  $T_r$  é a temperatura reduzida de um determinado componente, e  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$  e  $E$  são constantes previamente ajustadas, presentes no banco de dados do simulador.

O grande objetivo do cálculo do equilíbrio de fase de uma mistura é determinar as quantidades de cada componente nas fases líquida e vapor em equilíbrio, para assim então através dos balanços de massa e energia quantificar o quanto é transferido de um componente para a outra fase no processo de separação. Primeiramente devemos entender que o equilíbrio entre a fase vapor e líquida de um determinado componente, à mesma temperatura, é dada pela igualdade das fugacidades em cada fase (PRAUSNITZ et al, 1980), ou seja:

$$f_i^{vap} = f_i^l \quad (2.40)$$

É possível criar outras relações para esta equação por meio do conhecimento dos conceitos de coeficiente de fugacidade e coeficiente da atividade, e como estes se relacionam entre si. O coeficiente de fugacidade é dado por (SANDLER, 1999):

$$\Phi_i = \frac{f_i^{vap}}{y_i P} \quad (2.41)$$

Em que  $y_i$  é a fração molar do componente  $i$  no vapor e  $P$  a pressão total do sistema.

De forma análoga o coeficiente de atividade é dado por (SANDLER, 1999):

$$\gamma_i = \frac{f_i^l}{x_i f_i^0} \quad (2.42)$$

Em que  $x_i$  é a fração molar do líquido e  $f_i^0$  é a fugacidade do líquido  $i$  puro à temperatura e pressão do sistema, determinado da seguinte forma:

$$f_i^0 = P_{vap,i} \phi_i^S \exp \int_{P_{vap,i}}^P \frac{V_i^l}{RT} dP \quad (2.43)$$

Substituindo as Equações 2.41, 2.42 e 2.43 na Equação 2.46 obtém-se:

$$y_i P = \gamma_i x_i P_{vap,i} F_i \quad (2.44)$$

Sendo  $F_i$  dado por:

$$F_i = \frac{\phi_i^S}{\phi_i} \exp \int_{P_i^{vap}}^P \frac{V_i^l}{RT} dP \quad (2.451)$$

A expressão  $\exp \int_{P_i^{vap}}^P \frac{V_i^l}{RT} dP$  é conhecida como *Fator de Poynting* e nos indica a influência da pressão na fugacidade da fase líquida. Observa-se que para temperaturas abaixo da temperatura crítica, um líquido pode ser considerado incompressível. Neste caso o efeito da pressão na fugacidade da fase líquida torna-se desprezível, de forma que o *Fator de Poynting* se aproxima da unidade. Analogamente, um líquido puro, a

pressões não muito elevadas, também apresenta um  $\phi_i^S$  próximo à unidade. Nestes casos, a Equação que rege todo o cálculo do equilíbrio líquido-vapor no sistema de destilação em estudo, a baixas pressões, pode ser resumida a:

$$\phi_i y_i P = \gamma_i x_i P_i^{vap} \quad (2.46)$$

Onde  $P_i^{vap}$  é a pressão de vapor do líquido.

A Equação 2.46 é a principal equação envolvida nos processos de destilação aplicados a indústria química, e por consequência na indústria sucroalcooleira. Sendo assim, uma forma de relacionar a equação 2.46 com sua aplicabilidade em nosso processo é tomar como base uma composição típica desse “vinho”. A composição do “vinho” se dá basicamente por dois componentes majoritários, água e etanol, contendo uma série de outros componentes minoritários em baixas concentrações. Como é possível perceber pela Tabela 2.2, a maioria dos compostos minoritários são álcoois que, exceto o metanol, possuem volatilidade menor do que a do etanol.

**Tabela 2.2:** Principais componentes do vinho industrial.

<b>Componente</b>	<b>Peso Molecular (kg/kmol)</b>	<b>Ponto de Ebulição (°C)</b>	<b>Faixa de Concentração (w/w)</b>	<b>Referência</b>
Água	18,02	100,00	0,92-0,95	Obtido por diferença
Etanol	46,07	78,40	0,05-0,08	Oliveira (2001)
Metanol	32,04	64,70	0,0-3,0.10 <sup>-8</sup>	Boscolo et al. (2000)
Isopropanol	60,10	82,40	1,020.10 <sup>-6</sup>	Cardoso et al. (2003)
Propanol	60,10	97,10	(2,1-6,8).10 <sup>-5</sup>	Oliveira (2001)
Isobutanol	74,12	108,00	(1,3-4,9).10 <sup>-5</sup>	Oliveira (2001)
Álcool Isoamílico	88,17	132,00	(2,7-18,8).10 <sup>-5</sup>	Oliveira (2001)
Acetato de Etila	88,12	77,10	(5,5-11,9).10 <sup>-5</sup>	Oliveira (2001)
Acetaldeído	44,05	20,20	(1,0-8,3).10 <sup>-5</sup>	Oliveira (2001)
Ácido Acético	60,05	118,10	(3,3-99,3).10 <sup>-4</sup>	Oliveira (2001)

Fonte: BATISTA (2008).

O sucesso de uma destilação eficaz depende da *volatilidade relativa* dos componentes envolvidos. Essa grandeza é se dá pela relação entre a volatilidade de um componente em relação a outro (BUCKLEY et al., 1985) definida por:

$$\alpha_{jk} = \frac{y_j/x_j}{y_k/x_k} = \frac{\gamma_j P_j^{vap}}{\gamma_k P_k^{vap}} \quad (2.47)$$

Em que  $\alpha_{jk}$  é a volatilidade relativa do componente  $j$  em relação ao componente  $k$ ,  $y$  é a fração molar da fase vapor do elemento correspondente,  $x$  é a fração molar do líquido do componente correspondente,  $\gamma$  é o coeficiente de atividade do composto na mistura e  $P^{vap}$  é a pressão de vapor do mesmo.

Nos casos em que as volatilidades relativas são muito maiores ou menores do que a unidade, a experiência indica que o componente pode ser separado facilmente pelo processo de destilação. Quando a volatilidade relativa é um valor muito próximo de 1, a separação se compromete, sendo em alguns casos, necessários mais estágios para a realização do processo, ou um aumento considerável na razão de refluxo, incrementando o consumo energético para separação.

No processo de destilação estudado neste trabalho, ou seja, a destilação alcoólica, a volatilidade relativa entre o etanol e a água é de extrema importância, porém, a volatilidade entre os minoritários e a água, bem como a volatilidade entre os minoritários e o etanol, não são tão relevantes a fim de causar qualquer interferência nos resultados obtidos por outros trabalhos (MARQUINI 2007). E como visto, foi necessário um estudo dos métodos de cálculo da fugacidade da fase vapor e da atividade da fase líquida.

## 2.21 Fase Líquida

A literatura aborda uma gama de metodologias para a predição e cálculo do coeficiente de atividade em cálculos de equilíbrio, baseados tanto em modelos moleculares, diretamente ajustados a dados experimentais (NRTL, UNIQUAC), como em métodos de contribuições de grupos (ASOG, UNIFAC), que baseiam-se na ideia de que os coeficientes de atividade nas misturas estão relacionados com as interações entre

os grupos estruturais, classificando as moléculas envolvidas em grupos químicos específicos de acordo com sua natureza.

Para a representação da fase líquida neste trabalho, optou-se pelo uso do modelo NRTL. Esta escolha foi feita com base nas conclusões de Marquini et al. (2007) e Jorge et al (2010), que compararam os resultados obtidos de outras simulações com colunas de destilação analisando outros modelos termodinâmicos e concluíram que este método apresentou os melhores resultados entre diversos analisados, incluindo os modelos UNIQUAC e UNIFAC. Porém, como esse trabalho envolve uma mistura multicomponente, na ausência de dados experimentais de equilíbrio para os compostos congêneres que compõem o vinho a ser destilado, o sistema será simplificado para o binário Etanol/Água, o que não acarreta em erros para aplicação da metodologia proposta para otimização energética da coluna.

Segundo Reid (1987) as equações do modelo NRTL são:

$$\ln\gamma_i = \frac{\sum_j x_j \tau_{ij} G_{ji}}{\sum_k x_k G_{ki}} + \sum_j \frac{x_j G_{ij}}{\sum_k x_k G_{kj}} \left( \tau_{ij} - \frac{\sum_m x_m \tau_{mj} G_{mj}}{\sum_k x_k G_{kj}} \right) \quad (2.48)$$

$$G_{ij} = \exp(-\alpha_{ij} \tau_{ij}) \quad (2.49)$$

O Simulador *Aspen Plus* insere ainda uma dependência da temperatura nos parâmetros de ajuste da equação. Dessa forma, os dois parâmetros da equação 2.49 do modelo NRTL para cada binário analisado são variáveis de acordo com a temperatura nos estágios da coluna, como mostrado a seguir:

$$\tau_{ij} = a_{ij} + b_{ij}/T + e_{ij} \ln T + f_{ij} T \quad (2.50)$$

$$\alpha_{ij} = c_{ij} + d_{ij}(T - 273.15) \quad (2.51)$$

$$\tau_{ii} = 0 \quad (2.52)$$

$$G_{ii} = 1 \quad (2.53)$$

$$a_{ij} \neq a_{ji} \quad (2.54)$$

$$b_{ij} \neq b_{ji} \quad (2.55)$$

$$c_{ij} \neq c_{ji} \quad (2.56)$$

$$d_{ij} \neq d_{ji} \quad (2.57)$$

Em que,  $a_{ij}$ ,  $a_{ji}$ ,  $b_{ij}$ ,  $b_{ji}$ ,  $c_{ij}$ ,  $c_{ji}$ ,  $d_{ij}$ ,  $d_{ji}$ ,  $e_{ij}$ ,  $e_{ji}$ ,  $f_{ij}$ ,  $f_{ji}$ , são constantes ajustadas a dados experimentais que dependem do sistema binário em estudo e  $T$  é a temperatura do sistema.

Uma metodologia rigorosa válida para o cálculo do coeficiente de atividade é de extrema importância nos processos de simulação, uma vez que estes refletem as interações que ocorrem entre os diferentes compostos químicos presentes em uma mistura. Quando prevalecem as interações repulsivas, os coeficientes de atividade tornam-se maiores que a unidade, aumentando a volatilidade dos componentes. Portanto, para soluções alcoólicas diluídas, as moléculas de etanol estão envoltas em água, devido a maior presença deste componente, apresentando coeficiente de atividade elevado, tornando-se mais volátil. Com o aumento do teor alcoólico, essas interações repulsivas são diminuídas, reduzindo a diferença de volatilidade do mesmo. Podemos concluir então que o comportamento da volatilidade da água é exatamente o inverso do álcool, o aumento do teor alcoólico resulta no aumento da volatilidade da água e na diminuição da volatilidade do etanol (ONORI e SANTUCCI, 1996).

## 2.22 Fase Vapor

Em relação ao equilíbrio de fases necessita-se ainda discutir sobre a outra fase envolvida, para a fase vapor o fator determinante a se considerar são as interações que podem ocorrer nessa fase, avaliando-se a possibilidade da mesma de comportar-se ou não como um gás ideal. Nos sistemas em que a fase vapor pode ser considerada ideal, ou seja, sistemas a pressões baixas e moderadas, altas temperaturas e sem a presença de compostos capazes de formarem dímeros, o coeficiente de fugacidade pode ser negligenciado no cálculo do equilíbrio, uma vez que o mesmo apresentará um valor muito próximo da unidade.

Um dos principais métodos utilizados para predição do coeficiente de fugacidade é a Equação do Virial truncada no segundo termo, bastante preciso para moderadas densidades. A Equação do Virial baseia-se em uma expansão em série de potências, que relaciona o fator de compressibilidade  $Z$  a variáveis intensivas e independentes da composição, temperatura e pressão (REID et. al., 1987). Estes termos estão geralmente relacionados com a repulsão ou atração das moléculas envolvidas, porém, na maioria dos casos costuma-se truncar essa expansão no segundo termo, por já apresentar um resultado satisfatório.

Como dito, esta equação é capaz de fornecer a fugacidade da fase vapor. Como os sistemas são geralmente especificados por temperatura, composição e pressão, a forma mais usual da Equação do Virial é:

$$Z = \frac{PV}{RT} = 1 + \frac{BP}{RT} \quad (2.58)$$

Onde:

$$B = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M y_i y_j B_{ij}(T) \quad (2.59)$$

Observando-se o parâmetro  $B$  nas equações anteriores, podemos expressar o coeficiente de fugacidade da seguinte forma:

$$\ln \phi_i = \left[ 2 \sum_{j=1}^M y_j B_{ij} - B \right] \frac{P}{RT} \quad (2.60)$$

A Equação 2.60, não apresenta bons resultados quando compostos fortemente polares (ácidos carboxílicos, álcoois e aldeídos) e capazes de formar pontes de hidrogênio estão presentes na mistura, acarretando o desvio da idealidade (PRAUSNITZ et al., 1999). De fato, se ocorrem associações fortes na fase vapor, um modelo baseado apenas em forças físicas para descrever a fase vapor não é adequado. Para estes sistemas com fortes forças de atração entre as moléculas aplicam-se alguns ajustes propostos pela termodinâmica clássica, justificados a seguir.

A fugacidade da fase vapor pode ser descrita por:

$$f_i^v = \phi_i^v \cdot y_i \cdot P \quad (2.61)$$

Em que  $\phi_i^v$  é o coeficiente de fugacidade do componente  $i$  na fase vapor, podendo ser aproximado para a unidade em casos ideais,  $y$  é fração molar do componente e  $P$  a pressão total.

A Equação 2.61 é importante no cálculo do equilíbrio, pois relaciona a fração molar em termos dos componentes envolvidos na mistura. No cálculo do ELV para os

sistemas não ideais, propõe-se a introdução do conceito de *componentes aparentes*, que procuram representar melhor o comportamento das espécies verdadeiras, porém torna-se necessário a inserção do *coeficiente de fugacidade aparente* destas espécies. No entanto, o coeficiente de fugacidade aparente precisa refletir o decréscimo da pressão parcial aparente, causada pela diminuição no número de espécies na fase vapor. A pressão parcial aparente é representada pelo termo  $y_i^a P$  na equação da fugacidade da fase vapor aplicado aos componentes aparentes:

$$f_i^{a,vap} = \varphi_i^{a,vap} y_i^a P \quad (2.62)$$

O coeficiente de fugacidade aparente  $\varphi_i^{a,v}$  se relaciona com o coeficiente de fugacidade verdadeiro como mostrado a seguir:

$$\varphi_i^{a,v} = \varphi_i^{t,v} \frac{y_i^t}{y_i^a} \quad (2.63)$$

Onde  $\varphi_i^{a,v}$ , é o coeficiente de fugacidade aparente,  $\varphi_i^{t,v}$ , é o coeficiente de fugacidade verdadeiro,  $y_i^t$  é a fração molar do vapor verdadeira e  $y_i^a$  é a fração molar do vapor aparente.

Portanto, os coeficientes de fugacidade aparente e verdadeiro estão relacionados um com o outro pela mudança no valor real e aparente das composições (NOTHNAGEL et al., 1973; ABBOUTT e van NESS, 1992), devido aos coeficientes de fugacidade aparente das espécies associadas serem bem abaixo da unidade.

A teoria apresentada pode ser usada com qualquer equação de estado para computar o coeficiente de fugacidade real. Porém, em função da ocorrência de dimerização pela presença do etanol, como é o caso do sistema estudado neste trabalho, podem ser usadas as equações de estado que possuam esta correção, por exemplo, a Equação de *Hayden-O'Connell*, como proposta no trabalho de BATISTA (2008).

HAYDEN e O'CONNELL (1975) usaram a Equação do Virial truncada após o segundo termo. Eles desenvolveram uma correlação para o segundo coeficiente do virial de espécies polares, não polares e associativas baseadas na temperatura e pressão críticas no momento dipolo e no raio médio de gravitação para moléculas capazes de formar dímeros, como é o caso do azeótropo etanol-água (MEJÍA, et al. 2006).

### 2.23 Análise Econômica

Na avaliação e otimização de custos da conversão *exergética* de um sistema, é necessário comparar os valores anuais do capital relacionado as taxas de investimento (TIs) e dos custos dos combustíveis (CCs), de serviços de operação e de serviços de manutenção. Estes componentes dos custos podem variar significativamente com o sistema econômico regente. Portanto, valores anuais atualizados para todas as variáveis de custos devem ser utilizados na avaliação e otimização do custo total do projeto. (BEJAN, 1996; HINDERINK, 1996)

Neste trabalho, tomou-se como base o modelo TRR para avaliação e otimização econômica. Este modelo calcula todos os custos associados com um projeto, incluindo o mínimo requerido para retorno do investimento (RDI). Com base na estimativa do capital total de investimento, hipóteses econômicas, financeiras, operacionais e parâmetros de mercado, o TRR é calculado com base ano a ano. Os valores monetários anuais não uniformes se associam com os custos do investimento, serviços de operação, manutenção e custos de combustíveis do sistema, que são analisados, atualizados e se tornam uma série de pagamentos constantes.

A maior diferença entre uma análise econômica convencional e uma análise econômica conduzida a partir de uma análise *termoeconômica* é que esta é realizada descartando as soluções que nos levam a sistemas inconsistentes do ponto de vista termodinâmico. O valor do capital de investimento anual (sobrescrito CI) e de COMS (sobrescrito OM) total do sistema pode ser repartido de acordo com o número de parcelas,  $k$ , para o custo total de cada equipamento ( $CTE_{total}$ ) do sistema:

$$Z_k^{CI} = \frac{TI_{AT}}{\tau} \cdot \frac{CTE_k}{CTE_{total}} \quad (2.64)$$

$$Z_k^{OM} = \frac{COM_{AT}}{\tau} \cdot \frac{CTE_k}{CTE_{total}} \quad (2.65)$$

Nas equações acima,  $CTE_k$  e  $\tau$  representam o custo do equipamento  $k$  para o sistema e o tempo total anual (em horas) de operação do sistema, respectivamente. O

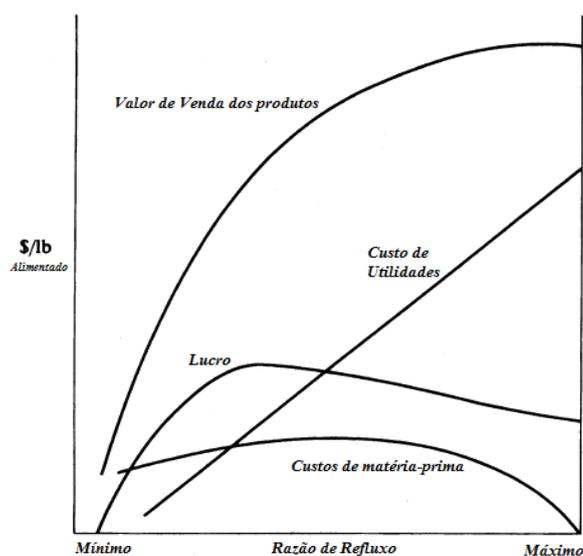
termo  $CTE_k$  é o custo associado ao capital de investimento e as despesas anuais de operação e manutenção do equipamento k:

$$CTE_k = Z_k^{CI} + Z_k^{OM} \quad (2.66)$$

## 2.24 Otimização dos Custos de Operação de uma Coluna de Destilação

Encontrada esta condição ideal de operação em um ótimo energético para o processo, o número de estágios da coluna está fixado e alguns graus de liberdade podem ser manipulados para minimizar seus custos operacionais. A razão de refluxo da coluna é frequentemente utilizada como variável manipulável do ponto de operação em estado. A Figura 2.14 mostra variáveis que influenciam nos custos de operação como uma função da razão de refluxo. A otimização desta variável é particularmente bastante atrativa para colunas que operam com uma ou mais das seguintes condições:

1. Alta razão de refluxo.
2. Alta diferença de valores entre produtos de topo e fundo.
3. Alto custo de utilidades.
4. Baixa volatilidade relativa entre componentes.
5. Fração molar de alimentação do componente leve longe de 50%.



**Figura 2.14:** Variações das variáveis de custo para uma coluna de destilação.

Fonte: (Himmelblau e Edgar, 2001)

Sabe-se que todas estas condições são atendidas para o sistema Etanol/Água, portanto é possível minimizar o custo de projeto e produção por meio da aplicação de técnicas de otimização unidimensional que propõem a razão de refluxo ótima da coluna impostas por McAvoy (1985) e Kister (1992). Tal otimização acarretaria em uma alteração na condição de operação ideal em aproveitamento energético, por isso necessita-se um estudo comparativo de modelagem multicritérios para determinação de um ponto de operação da coluna que equilibre ambas as variáveis (energia e custo de operação) sem interferir nas condições essenciais ao processo e tornando o processo altamente viável economicamente. Tal implementação de análise econômica ao processo analisado neste trabalho busca encontrar formas de melhorar o desempenho de um processo de uma forma rentável tanto do ponto de energético quanto do ponto de vista econômico. Alguns métodos utilizados para esta análise neste trabalho serão explicados nos tópicos subsequentes (FILHO E KOPITTKE, 2010).

### **2.25 *Pay-back***

O tempo de *pay-back* de um projeto é o tempo necessário após o início do projeto para pagar o investimento seu inicial. O *pay-back* é um critério útil para julgar projetos que têm uma vida útil ou quando o capital é disponível apenas para um curto período de tempo. É frequentemente usado para julgar projetos de pequena melhoria na planta operacional. Após realizada a análise econômica deve-se determinar também neste trabalho o tempo de *pay-back* do sistema otimizado em função da redução da quantidade de vapor utilizada no processo ou do aumento da produção de etanol.

O cálculo do *pay-back* consiste em efetuar a subtração do valor de retorno do valor total investido, obtendo assim o número de períodos necessários para que o capital investido seja recuperado. Porém esse cálculo não considera o “valor do dinheiro no tempo”, sendo assim considerado um método não exato.

### **2.26 VPL (Valor Presente Líquido)**

O VPL é um dos instrumentos mais sofisticados e utilizados para se avaliar propostas de investimento de capital, pois reflete a riqueza em termos monetários do investimento medida pela diferença entre o valor presente das entradas de caixa e o valor presente das saídas de caixa a uma determinada taxa de desconto.

No caso da análise a ser realizada nesse trabalho, a taxa de desconto utilizada é a TMA (Taxa Mínima de Atratividade), que consiste em uma taxa de juros equivalente à rentabilidade das aplicações realizadas, ou seja, a taxa mínima a ser alcançada em determinado projeto. Por apresentar o rendimento mínimo de uma alternativa de investimento essa taxa deve ser considerada a título de analisar a viabilidade de aquisição da coluna otimizada por parte da usina.

Para o cálculo do VPL assume-se que todo investimento é um valor negativo e todo retorno é um valor positivo. Deve-se converter todos os valores futuros para valores presentes de acordo com a relação a seguir:

$$P = F \frac{1}{(1 + i)^n} \quad (2.67)$$

Onde  $P$  é o valor presente,  $F$  é o valor futuro,  $i$  é a taxa de juros (no caso, a TMA) e  $n$  o número de períodos considerados (por exemplo, 5 anos).

Caso o retorno ao longo do período  $n$  seja constante ( $A$ ), a relação utilizada passa a ser a seguinte:

$$P = A \frac{(1 + i)^n - 1}{i(1 + i)^n} \quad (2.68)$$

Após a conversão desses valores basta que esses sejam todos somados para que se obtenha o VPL. Caso o VPL seja maior ou igual a 0, o investimento é considerado viável. O valor do VPL indica que além da taxa de retorno esperada (TMA) o investimento terá um excedente em dinheiro equivalente a esse valor ao fim do período  $n$  considerado.

O VPL diferencia-se do *pay-back* ao levar em consideração o valor do dinheiro no tempo (fluxo de caixa descontado), sendo assim um método mais eficaz para análise de investimento.

### **2.27 VAUE (Valor Anual Uniforme Equivalente)**

O método VAUE consiste na obtenção de um valor médio dos fluxos de caixa positivos e comparação deste com o valor médio dos fluxos de caixa negativos.

Diferencia-se do VPL ao mostrar um resultado em bases periódicas (anuais, mensais, entre outras) enquanto o VPL demonstra o resultado líquido de um fluxo de caixa a valor presente.

Para obter o VAUE obtém-se o valor médio dos fluxos positivos e negativos utilizando a relação a seguir:

$$A = P \frac{i(1+i)^n}{(1+i)^n - 1} \quad (2.69)$$

Onde A é o valor médio, P é o valor presente,  $i$  é a taxa de juros (TMA) e  $n$  é o número de períodos considerados. Caso os fluxos não sejam de valor constante (A), deve-se primeiramente calcular o VPL e considerar este como o valor de P para a utilização da Equação 2.69.

Após a obtenção do valor médio dos fluxos positivos e negativos deve-se subtrair o valor positivo e o valor negativo para obtenção do VAUE. Caso o VAUE seja maior que zero o investimento é viável. Além disso, esse valor representa o lucro médio por período ao longo da vida útil do projeto.

### **2.28 TIR (Taxa Interna de Retorno)**

A TIR é uma das formas mais sofisticadas de se avaliar propostas de investimento de capital, pois apresenta a taxa de desconto que iguala os fluxos de caixa de entrada com os de saída produzindo um VPL igual a 0.

Para o cálculo da TIR deve-se escolher uma taxa qualquer e considerando essa taxa calcular o VPL do fluxo de caixa. Caso o VPL seja positivo deve-se aumentar o valor da taxa e realizar o cálculo novamente, caso seja negativo deve-se diminuir a taxa e recalcular o VPL. Esse processo se repete até que se atinja um VPL tão próximo de zero quanto se deseja. Vale ressaltar que há diversas ferramentas computacionais que realizam esse cálculo de maneira a facilitar essa análise.

A viabilidade do investimento é justificada caso a TIR seja maior que a TMA. O quanto a TIR excede a TMA não tem significado na análise do investimento.

## 2.29 Comentários e Conclusões

Neste capítulo uma revisão dos conceitos envolvidos na análise *exergoeconômica* foi feita. Foram apresentadas as definições de *exergia* e a sua relação com as forças motrizes, com as propriedades termodinâmicas e com o rendimento do processo. Foi mostrado como são aplicados os balanços de *exergia* nos estágios e como se obtém o perfil de perdas de *exergia*, útil na otimização energética de coluna de destilação.

Foi mostrado que para o sistema em estudo o perfil de perdas de *exergia* representa a distribuição de forças motrizes na coluna de destilação. Como já foi provado em trabalhos anteriores, isto possibilita por meio do uso de um simulador de processos (*Aspen Plus 8.5*), a otimização de colunas de destilação, podendo ser aplicado a qualquer coluna, pois consegue identificar e determinar os perfis de perdas de *exergia* para inúmeros sistemas, não importando a condição térmica da alimentação, número de estágios, pressão e demais condições operação da coluna.

Apesar disto, os estudos até o presente momento se limitaram a realizar apenas a otimização energética das colunas de destilação, na prática, sistemas assim avaliados podem não ser viáveis economicamente, sendo comprometidos pelo aumento do custo de investimento e da impossibilidade de retorno pelo cálculo do *payback* do investimento. Uma primeira verificação para o sistema das colunas com o sistema etanol/água mostrou que é possível reduzir as perdas de *exergia* do processo, sob alterações em suas condições operacionais e de projeto.

Os perfis obtidos sugerem que as modelagens utilizadas para os cálculos tanto do equilíbrio líquido-vapor quanto das propriedades termodinâmicas apresentaram resultados condizentes aos esperados. A apresentação das metodologias adotadas para dar origem a otimização *exergoeconômica* do sistema serão descritas no capítulo seguinte.

# CAPÍTULO 3

## REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Na introdução desta dissertação um pouco sobre alguns métodos de otimização de colunas de destilação foi comentado. Dentre estes métodos, as vantagens de utilizar-se o perfil de perdas de *exergia* foram citadas e foi destacado que o objetivo do presente trabalho é desenvolver um método de otimização *exergoeconômica* para um sistema de destilação industrial composto por colunas de destilação voltadas para produção de etanol hidratado, com base neste perfil de perdas de *exergia*.

No Capítulo 2 alguns conceitos sobre otimização de processos e sobre o processo de produção de etanol hidratado foram abordados, em particular sobre sua análise *exérgica*, com o objetivo de integrar duas perspectivas, energética e econômica.

Antes que de serem discutidos detalhes do desenvolvimento de um método de otimização de colunas baseado em análise *exergoeconômica*, será feita uma breve revisão sobre trabalhos que tratam da importância da otimização termodinâmica de colunas de destilação no que diz respeito à análise de *exergia* e *exergoeconômica* de processos. Esta revisão se limitará a discutir os métodos termodinâmicos de otimização.

### 3.1 A Preocupação com o Consumo de Energia

A destilação é a técnica de separação mais amplamente utilizada na indústria química e petroquímica para a separação de misturas líquidas, sua única desvantagem é o seu alto consumo energético (FONYO et al, 2001). Em função disto, diversos autores têm estudado diferentes configurações para o processo de destilação, visando economia de energia e minimização de custos. Otimizar a coluna isoladamente, significa estudar a melhor combinação entre parâmetros como número de estágios, razão de refluxo, condição térmica e estágio da alimentação. Uma proposta que tem sido estudada é a de promover a otimização *exergoeconômica* da coluna de destilação, avaliando de forma conjunta os custos de projeto e operação do sistema em estudo.

A preocupação com uma melhor integração energética da coluna não é um conceito tão recente, Dhole e Linnhoff (1993) propuseram um estudo de colunas de

destilação por meio de um perfil entalpia-temperatura, o ponto de partida para se chegar no estudo dos perfis de perdas de *exergia*. Sobocan e Glavic (2000) utilizaram o mesmo perfil entalpia-temperatura para analisar a possibilidade de integração energética num sistema de destilação etanol/água com uma e duas colunas, mostrando que, em alguns casos, a economia de energia que se obtém com a integração energética entre as duas colunas repõe o investimento feito na instalação da segunda coluna.

Em trabalhos mais recentes Tarighaleslami et al. (2011) apresentaram um estudo sobre a determinação do estágio de alimentação ótimo de colunas, mostrando que o gradiente térmico nos permite determinar, além disto, a possibilidade da divisão das correntes de alimentação para um melhor aproveitamento da *exergia* perdida.

A otimização da coluna de destilação e a integração energética da coluna com o processo podem efetivamente levar a um menor consumo de energia, refletindo no custo do processo. Esta análise tem como principal objetivo determinar a quantidade de energia gasta no processo do ponto de vista da termodinâmica e não somente a quantidade de energia que está aproveitada pelo processo.

Quando uma mesma quantidade de calor fornecido por duas utilidades quentes distintas tem "qualidades" diferentes a diferentes temperaturas, pode-se dizer que cada utilidade apresenta um conteúdo *exergético* diferente. Esta análise é embasada pela segunda lei da termodinâmica, que leva em conta não somente a quantidade de calor que está sendo trocado, mas a eficiência com que esta troca ocorre.

Seguindo esta lógica, diversos trabalhos envolvendo o conceito de *exergia* vêm sendo propostos para a análise de processos químicos, fornecendo diretrizes para otimização e integração energética destes processos. Alguns destes trabalhos serão citados a seguir.

### **3.2 Aplicação da Análise *Exergética* na Otimização de Processos**

A principal vantagem da análise *exergética* de processos químicos é que esta é capaz de indicar o quanto a eficiência de um processo químico pode ser melhorada. Estabelecido este limite, o critério de otimização adotado é o de minimização de *exergia* total do processo. Processos mais eficientes termodinamicamente desperdiçam menos energia, podendo custar e/ou poluir mais ou menos que o processo original.

Trabalhos como os apresentados por Ognisty (1995) identificaram que, quanto maiores as irreversibilidades no processo de destilação, maior a quantidade de *exergia*

consumida pela coluna, e que a minimização deste consumo *exergético* é a solução para o aumento da eficiência termodinâmica da coluna.

Apesar do balanço global de *exergia* de uma coluna de destilação mostrar o quanto a eficiência termodinâmica da coluna pode ser aumentada, Zemp (1994) mostrou que um balanço de *exergia* em cada estágio da coluna é necessário para determinar-se que tipo de alteração deve ser feita na coluna para atingir este aumento de eficiência. O balanço de *exergia* estágio a estágio permite gerar um perfil de perdas de *exergia* para a coluna e a metodologia apresentada por Zemp mostra como se pode utilizar este perfil para a otimização de fatores como estágio e condição térmica da alimentação, bem como a identificação de benefícios da utilização de trocadores de calor intermediários.

Posteriormente, o método proposto por Zemp foi estudado por Faria (2003) para um conjunto mais extenso de casos, incluindo sistemas multicomponentes com sistemas ideais e não ideais. Este estudo correlacionou o consumo de utilidades com o menor desvio padrão das perdas de *exergia* na coluna, mostrando que o perfil mais simétrico corresponde à melhor distribuição das perdas da coluna. Uma coluna com cinco componentes, já estudada na literatura por Dhole e Linnhoff (1993), foi otimizada com o auxílio do perfil de perdas de *exergia* (ZEMP et al. 1997), resultando numa coluna menos complexa que a coluna otimizada proposta por Dhole.

Rivero (2003) comparou as perdas de *exergia* em colunas adiabáticas e não adiabáticas (com fornecimento ou retirada de calor ao longo de toda a coluna) e concluiu que a distribuição ótima de fornecimento ou retirada de calor da coluna é aquela que proporciona a distribuição mais uniforme de forças motrizes na coluna. Recentes trabalhos (ARAÚJO et al. 2007) utilizaram a análise *exérgica* como ferramenta para identificação das perdas termodinâmicas em um caso industrial de purificação de 1,2-dicloroetano. Khoa et al. (2010) propôs uma metodologia de otimização de processos químicos com base numa função objetivo na qual deve-se minimizar a *exergia* destruída no processo por meio de uma análise paramétrica que representa tridimensionalmente os pontos ótimos de operação de uma coluna de separação de xilenos. A importância na análise *exérgica*, tanto na otimização de processos como em particular para o caso de colunas de destilação, já é comprovada na literatura; a "interpretação" que a análise *exérgica* proporciona do processo normalmente não pode ser obtida por outra técnica, em função disto os diversos trabalhos apresentados nesta revisão se preocupam em ampliar o campo de aplicação desta técnica. Recentemente alguns fabricantes de softwares comerciais de simulação de

processos químicos, como a *Aspen Technology*, reconhecendo as vantagens da aplicação da análise *exergética*, já incluíram em seus softwares a opção de gerar perfis de perdas de *exergia* para colunas de destilação (SAMANTA et al 2002).

### 3.3 Simulação Computacional

A simulação computacional de processos vem sendo uma ferramenta utilizada cada vez mais, tanto na indústria, pois permite a determinação, ainda que teórica, de dados muito difíceis de serem obtidos na planta de processamento, como no meio acadêmico, com o objetivo de facilitar e possibilitar um conhecimento mais aprofundado do processo em questão.

Os simuladores permitem o estudo de alternativas de processamento, possibilitando o ajuste de diversos parâmetros, como: vazões de entradas, condições de operação e do projeto de equipamento, que não poderiam ser feitos de forma segura em escala industrial, pois, pequenas variações nas condições de operação, poderiam gerar alterações indesejáveis à rentabilidade do processo na planta de processamento (SCANAVINI et al., 2005).

Devido à complexidade dos processos de engenharia, o uso de simulações, tanto para o conhecimento do funcionamento de plantas já existentes, quanto para os projetos de novas plantas, podem trazer inúmeros benefícios como (HIMMELBLAU e BISCHOFF, 1968):

- Economia de experimentos, permitindo o estudo de processos já existentes de forma mais rápida e econômica do que na planta real.
- Extrapolação, pois, com o uso de ferramentas matemáticas é possível testar condições extremas de operação, difíceis de serem testadas numa planta real.
- Estudo da estabilidade do sistema, uma vez que é possível avaliar a resposta do sistema a distúrbios.
- Estudo da comutabilidade e determinação de políticas alternativas, sendo possível à introdução ou remoção de novos elementos no sistema, enquanto o mesmo é examinado.

Para o estudo do processo de destilação, a simulação computacional torna-se uma excelente ferramenta uma vez que, essa operação unitária, possui um grande número de variáveis envolvidas no seu funcionamento. Portanto, com o aumento da disponibilidade de ferramentas computacionais, bem como com o crescimento da

importância dos processos de simulação no campo industrial e acadêmico, um grande número de artigos presentes na literatura, vem ampliando o conhecimento sobre o uso dessas ferramentas.

Existe hoje no mercado uma grande quantidade de softwares para simulação de processos. Dentre eles podemos citar o *Aspen Hysys* e o *Aspen Plus*, software a ser utilizado nesse trabalho, sendo ambos comercializados pela *Aspen Tech*. Esses softwares vêm sendo empregados na investigação de muitos processos industriais na indústria de alimentos (bebidas, fermentações) e na indústria química (produção de etanol, análise de trocadores de calor).

Batista e Meirelles (1997) estudaram, via simulação, a produção de etanol anidro por destilação extrativa, enfatizando o uso de integração térmica SRV para a redução do consumo de energia.

Osório et al. (2004) desenvolveram um modelo para simular a destilação de Pisco como uma destilação reativa multicomponente em batelada, com a utilização de refluxo. Decloux e Coustel (2005) simularam uma planta típica utilizada para a destilação contínua de álcool neutro.

Pode-se encontrar na literatura uma série de outros processos estudados. Por meio da simulação computacional nesta área, como controle de colunas de destilação (JESUS et al., 2003), processos de destilação alcoólica extrativa (MUÑOZ et al., 2005; PINTO et al., 2000), e destilação reativa (SMEJKAL e SOÓS, 2001; BOLUN et al., 2006; PLAT e MEDEIROS, 1999).

Devido à grande aplicabilidade desta ferramenta para estudos de sistemas complexos, esse trabalho visa aplicar a metodologia de planejamento fatorial combinado com a simulação computacional, para estudar a destilação alcoólica de um sistema multicomponente contendo água e etanol.

### **3.4 Exergoeconomia**

A *exergoeconomia*, também conhecida como *termoeconomia*, surgiu como uma ferramenta para analisar os sistemas térmicos e formular uma função de custos adequada e que represente fisicamente o funcionamento de plantas térmicas. A *termoeconomia* se preocupa em realizar uma análise intensiva sobre conceitos de projeto de sistemas de conversão de energia com o propósito de revelar oportunidades de poupança de custos e combustíveis (EL-SAYED, 2003). Neste sentido a

*termoeconomia* se propõe ser uma técnica que combina a análise termodinâmica e a otimização econômica de processos químicos (EL SAYED e EVANS, 1970). De acordo com Tsatsaronis (1993) e Bejan et al. (1996) os objetivos da *Termoeconomia* são:

- Identificar a localização, magnitude e fonte das reais perdas dos sistemas térmicos (*exergia* destruída ou perdida).
- Calcular o custo associado às perdas *exergéticas* e *exergia* destruída.
- Avaliar os custos de produção de cada produto em sistemas que tenham mais que um produto.
- Entender os fluxos de custos através do sistema.
- Comparar técnica e economicamente as alternativas propostas.

A *termoeconomia* começou a ser formulada no final da década de 1950 com os trabalhos de M. Tribus, R. B. Evans, R. A. Gaggioli e de E. F. Obert. Em 1970 Y. M. El Sayed e R. B. Evans publicaram a primeira formulação matemática rigorosa da *Termoeconomia*.

Durante as décadas de 1980 e 1990 a *termoeconomia* passou por grande desenvolvimento das técnicas através da publicação de diversos trabalhos na área. Nesta fase destacam-se os trabalhos de A. Valero e M. A. Lozano na Universidade de Zaragoza (Espanha), G. Tsatsaronis na Universidade do Tennessee (EUA) e posteriormente na Universidade Tecnológica de Berlim (Alemanha), C. A. Frangopoulos na Universidade Nacional Técnica de Atenas (Grécia) e M. R. von Spakovsky na Escola Politécnica Federal de Lausanne (Suíça) e posteriormente no Instituto de Virgínia (EUA).

Segundo Gaggioli e El-Sayed (1989) os métodos *termoeconômicos* podem ser divididos em duas vertentes:

- Metodologias *Exergoeconômicas* introduzida por Tsatsaronis (1985) e desenvolvida por Lozano e Valero (1993a) denominada Teoria do Custo *Exergético*.
- Metodologias Estruturais apresentadas por El-Sayed e Evans (1970) e a Análise Funcional *Termoeconômica* de Frangopoulos (1987).

Nos últimos 25 anos, o desenvolvimento exergoeconômico foi bastante expressivo em diversas direções. Os trabalhos recentes de Tsatsaronis et al., Valero et al., Frangopoulos, Parede, etc. representam as diferentes direções deste desenvolvimento.

Em 1990, um grupo de especialistas no campo de estudo da *exergoeconômica* (C. Frangopoulos, G. Tsatsaronis, A. Valero, e M. von Spakovsky) decidiu comparar suas

metodologias por resolver um problema pré-definido e simples de otimização: o problema CGAM, que foi nomeado após as primeiras iniciais dos investigadores participantes.

O objetivo do problema CGAM foi mostrar como as metodologias foram aplicadas, quais conceitos foram utilizados, e o que os resultados foram obtidos de forma simples e específica. Em sua última análise, o objetivo do problema CGAM foi a unificação de metodologias *exergoeconômica*.

Mais tarde, em 1992, a fim de evitar confusão desnecessária (a respeito de nomenclaturas, conceitos e referências) e para fornecer uma base comum para comparar diferentes métodos *exergoeconômicos*, uma linguagem matemática comum para *Exergoeconomia*, denominada teoria estrutural da *termoeconomia*, foi desenvolvida por Erlach et al. e foi aplicada por Torres et al. para encontrar as falhas e disfunções de um sistema, e por Valero et al. para analisar o desempenho de uma usina por Valero et al.. Eles demonstraram que o procedimento pode reproduzir os resultados de todas as metodologias *exergoeconômicas*, bem como do custo marginal, empregando um modelo *exergoeconômico* linear. Conclui-se então após os casos estudados que cada metodologia tem campos específicos de aplicação, para os quais fornecem soluções comprovadas e eficientes.

Nos últimos anos, os conceitos de *exergoeconomia* têm sido utilizados pelos algoritmos de otimização, como o algoritmo genético e algoritmo evolutivo, para descobrir a melhor solução realista (s) de sistemas térmicos. Cammarata et al. formulou como função objetivo, a soma do capital e os custos operacionais e de manutenção, de um bairro rede de aquecimento utilizando conceitos *exergoeconomia*. Eles minimizaram a função objetivo usando algoritmo genético (GA).

Em 2001, Marletta utilizou três métodos para otimizar um chiller de compressão de vapor usando formulações *exergoeconômicas*: o método de Monte-Carlo - um algoritmo de busca baseado em técnica estocástica; o método multiplicador de Lagrange - um método analítico; e a avaliação *termoeconômica* iterativo pelo método de otimização (TEO) de Tsatsaronis. Este trabalho concluiu que todos esses três métodos dão resultados comparáveis em termos de variáveis de decisão e dos custos globais mínimos.

Em 2002, Toffolo e Lazzaretto utilizaram o algoritmo evolutivo multiobjectivo (EA) para otimização simultânea, *exérgica* e econômica do problema CGAM. Eles concluíram que a programação linear multiobjectivo é uma ferramenta poderosa e eficaz

em encontrar o conjunto das melhores soluções entre os dois objetivos concorrentes, ou seja, minimizar os custos econômicos e maximizando a eficiência *exergética*.

A *exergoeconomia* pode desempenhar um papel decisivo na análise, projeto e otimização de sistemas térmicos. Algumas de suas aplicações foram aqui destacadas.

### 3.5 Metodologias de Análise *Exergoeconômica*

O avanço da tecnologia computacional permite que, a análise e simulação de processos, possibilite o estudo e a otimização dos mesmos sem grandes custos. Porém, normalmente envolvem um grande número de variáveis, além da necessidade de avaliar o impacto de todas elas sobre o processo, bem como qual será o resultado da interação das mesmas sobre este mesmo processo.

A necessidade de otimizar produtos e processos, com minimização de tempo, custo e impactos ambientais, maximizando rendimento, produtividade e qualidade dos produtos, tem levado profissionais de diferentes áreas a buscarem técnicas sistemáticas de planejamento experimental e otimização de processos (RODRIGUES e IEMMA, 2005).

O próprio software *Aspen Plus* utilizado neste trabalho, possui boas ferramentas de otimização, destacando-se os métodos SQP (Sequential Quadratic Programming Method) e o COMPLEX. O primeiro é um dos métodos matemáticos mais utilizados para otimização de processos, sendo baseado no algoritmo de Newton da programação não linear, o qual permite definições explícitas de limitações, resolvendo o problema através das funções de Lagrange. Normalmente este método é de rápida convergência, porém sempre são necessárias técnicas de derivação numérica para solução do problema. O segundo modelo, baseia-se no bem conhecido algoritmo COMPLEX, no qual o sistema a ser otimizado pode ser tratado como uma espécie de “caixa-preta”, sendo possível analisar limites de desigualdade e proximidade entre as variáveis estudadas. Dependendo da complexidade do sistema, esse método realiza um maior número de interações, porém não é necessária derivação numérica (*Aspen Technology*, 2003; CERIANI et al., 2008).

Em conjunto com as ferramentas de otimização citadas acima, podemos incluir o planejamento fatorial. A metodologia do planejamento fatorial, associada à análise de superfície de respostas, é uma ferramenta que fornece informações seguras sobre o processo, pois leva em consideração as informações específicas de cada processo.

Para aplicação neste trabalho optou-se por desenvolver uma metodologia de otimização *exergoeconômica* baseada na metodologia de planejamento fatorial, devido a simplicidade e eficiência do método. Somado a este fato tem-se, como mais uma justificativa para adotar esta metodologia como base, o fato de que Batista (2008) em seu trabalho sobre o estudo do processo de destilação alcoólica contínua, simulou este processo e aplicou a metodologia de planejamento fatorial, obtendo resultados satisfatórios, porém inconclusivos sobre a eficiência *exergoeconômica* do processo, os quais serão incorporados neste trabalho. Algumas vantagens que podem ser ressaltadas para justificar o uso do planejamento experimental como estratégia para otimização ou desenvolvimento de um novo processo e/ou produto são:

- A possibilidade da redução do número de experimentos ou repetições melhorando a qualidade da informação obtida.
- Os fatores são analisados simultaneamente.
- É possível otimizar mais de uma resposta ao mesmo tempo.

Portanto, o planejamento experimental fatorial foi a base para a metodologia a ser desenvolvida neste trabalho, a fim de possibilitar uma otimização do processo de destilação alcoólica, por meio da determinação das condições mais adequadas de trabalho para se obter etanol hidratado com um menor consumo de energia, devido à redução da *exergia* perdida das colunas de destilação. Tal metodologia será descrita no capítulo seguinte.

### 3.6 Comentários e Proposta deste Trabalho

Neste capítulo uma revisão sobre alguns trabalhos que tratam da importância da integração energética, análise *exergoeconômica* e da otimização de colunas de destilação foi apresentada. Mostrou-se que alguns trabalhos se baseiam na análise da quantidade de energia gasta pelo processo, e partem das metodologias e algoritmos disponíveis para discutir e criar novos métodos para a otimização energética, se enquadrando as especificações de cada caso de estudo. Em uma abordagem referente à Segunda Lei da Termodinâmica, alguns outros trabalhos baseiam-se no conceito de *exergia* e não somente de energia para o desenvolvimento de metodologias de análise e otimização de processos. Sobre estas metodologias, como estudado, é possível acrescentar novas variáveis por meio da incorporação de uma análise econômica e aprimorar a metodologia do ponto de vista *termoeconômico*. É neste tipo de abordagem

que se baseiam os trabalhos que utilizam o perfil de perdas de *exergia* para a otimização de colunas de destilação e buscaremos aprimorá-lo neste trabalho. Esta metodologia se baseia em implementar sobre os resultados da simulação computacional do sistema em estudo a minimização da perda de *exergia* total das colunas de destilação e na minimização do custo total envolvido nos parâmetros de operação e projeto das mesmas colunas.

Entretanto, apesar destas avaliações já terem sido realizadas individualmente com o intuito de otimizar colunas de destilação, nunca se trabalhou simultaneamente ambas as análises sobre um mesmo sistema em escala industrial. As colunas de destilação na prática não são projetadas e operadas, levando-se em conta somente o seu consumo energético, sendo importante uma avaliação econômica que possa prever o custo e a taxa de retorno do investimento necessário para operá-las. Verificou-se primeiramente se os conceitos envolvidos se aplicam ao sistema em estudo e como o método funciona para este sistema, identificando eventuais limitações e propondo-se resolvê-las. Isto será discutido no capítulo seguir.

Neste trabalho propomos apresentar a otimização *exergoeconômica* para um sistema de colunas de destilação binária. Um sistema trabalhando a separação da mistura etanol/água a nível industrial será considerada para otimização. A modelagem termodinâmica é baseada nas equações MESH (*Mass, Equilibrium, Summation and Heat*) e análise *exérgica*, enquanto um modelo econômico é desenvolvido de acordo com o método TRR (*Total Revenue Requirement*). A função objetivo baseada neste método de análise *exergoeconômica* busca obter o maior lucro relacionando o ganho pela venda do etanol hidratado com as parcelas de custo das colunas de destilação e seu gasto com o consumo de vapor como utilidade quente, satisfazendo simultaneamente as especificidades do processo.

# CAPÍTULO 4

## METODOLOGIA

Como destacado anteriormente, quando se realiza uma análise *exérgica*, deve-se distinguir dois casos: a análise *exérgica* para fins de síntese e desenvolvimento de novos processos e a análise *exérgica* para o diagnóstico e otimização dos processos existentes.

Neste trabalho, optamos por nos limitar à análise *exérgica* dedicada ao diagnóstico e otimização do processo de destilação industrial de produção de bioetanol. Em relação a este aspecto, uma série de estudos de casos pode ser encontrada na literatura (GRAVELAND e GISOLF 1998; GEUZEBROEK et al 2004; KIM et al. 2001). Entretanto, a maioria dessas análises limita-se a calcular as irreversibilidades e perdas externas de cada operação da unidade e sua eficiência em termos de *exergia*, mas não propõem soluções tecnológicas para melhorar o desempenho global do processo. Procurando preencher esta lacuna, esta seção introduz uma metodologia de partida sistemática e sequencial da modelagem e do diagnóstico do processo existente com base em critérios *exérgicos*, resultando em um conjunto de propostas de melhorias e otimização do processo em estudo (GHANNADZADEH, 2012).

Uma coluna de destilação pode ser representada como um conversor de *exergia*, o qual converte *exergia* térmica em *exergia* química (Ghazi et al., 2012). A maioria das análises termodinâmicas realizadas em colunas de destilação são baseadas na primeira e na segunda leis da termodinâmica. A geração de entropia e as perdas de *exergia* tem sido descritas pela transferência de calor e massa na simulação de colunas em equilíbrio em alguns trabalhos como Sauzar (1998), De Koeijer e Kjelstrup (2000) e De Koeijer et al. (2002). Estes trabalhos se preocuparam com análises de energia e *exergia* ou simulação de transferência de calor e massa em colunas de destilação sem as considerações econômicas para os sistemas e, mais tarde, sem a tentativa de se otimizar as colunas de destilação. Poucos pesquisadores trabalharam com análise *exergoeconômica* de colunas de destilação. Chang e Li (2005) introduziram a base de uma nova abordagem, incluindo o conceito em duas estâncias – métodos de análise para destruição de *exergia* intrínseca e extrínseca – e o método de otimização *exergoeconômica*. Eles apresentaram os resultados aplicando o método de análises a

uma planta típica de produção de etileno, a qual incluía apenas o método de otimização *exergoeconômico* para uma coluna de destilação simples, utilizando-se de uma modelagem econômica simples (Chang e Li, 2005).

#### **4.1 Apresentação Detalhada da Metodologia de Otimização Exérgica**

O fluxograma global da metodologia para otimização de processos baseada análise *exérgica* é representado na Figura 4.1. Conforme destacado nesta figura, a metodologia é composta de quatro etapas: modelagem do processo, diagnóstico, proposta de um regime de *retrofit* e, finalmente, a otimização do esquema final. Cada uma destas etapas aplicadas ao processo de destilação em estudo será detalhada a seguir.

#### **4.2 Modelagem do Processo Global**

Esta etapa preliminar tem o objetivo de preparar os dados para uma análise mais aprofundada do processo. Este passo é certamente o mais delicado da metodologia, pois extrair os dados de um processo real é uma tarefa muito demorada e dependente da instrumentação disponível no processo. Este estágio é composto de quatro etapas: itens 4.3 a 4.6.

#### **4.3 Extração de Dados**

A análise de energia de um processo industrial exige sempre a realização de uma extração rigorosa de dados. Essa extração de dados consiste na coleta de todos os dados necessários para balanços de massa e energia sobre o processo e sobre o sistema de utilidades existente. Nesta etapa, as discussões com o engenheiro do processo são essenciais, a fim de servirem para classificar os dados do processo de acordo com as especificações de processo, graus de liberdade e parâmetros do processo.

A configuração típica utilizada na simulação da destilação alcoólica é semelhante à mostrada na Figura 2.12, apresentada no capítulo 2. Algumas adaptações foram realizadas a fim de propiciar um melhor caminho para o desenvolvimento das operações, porém todas justificadas em sistemas já propostos em outros trabalhos. Como pode ser observado na Figura 2.12, as colunas A, A1 e D foram simuladas como uma única coluna, assim como as colunas B1 e B.

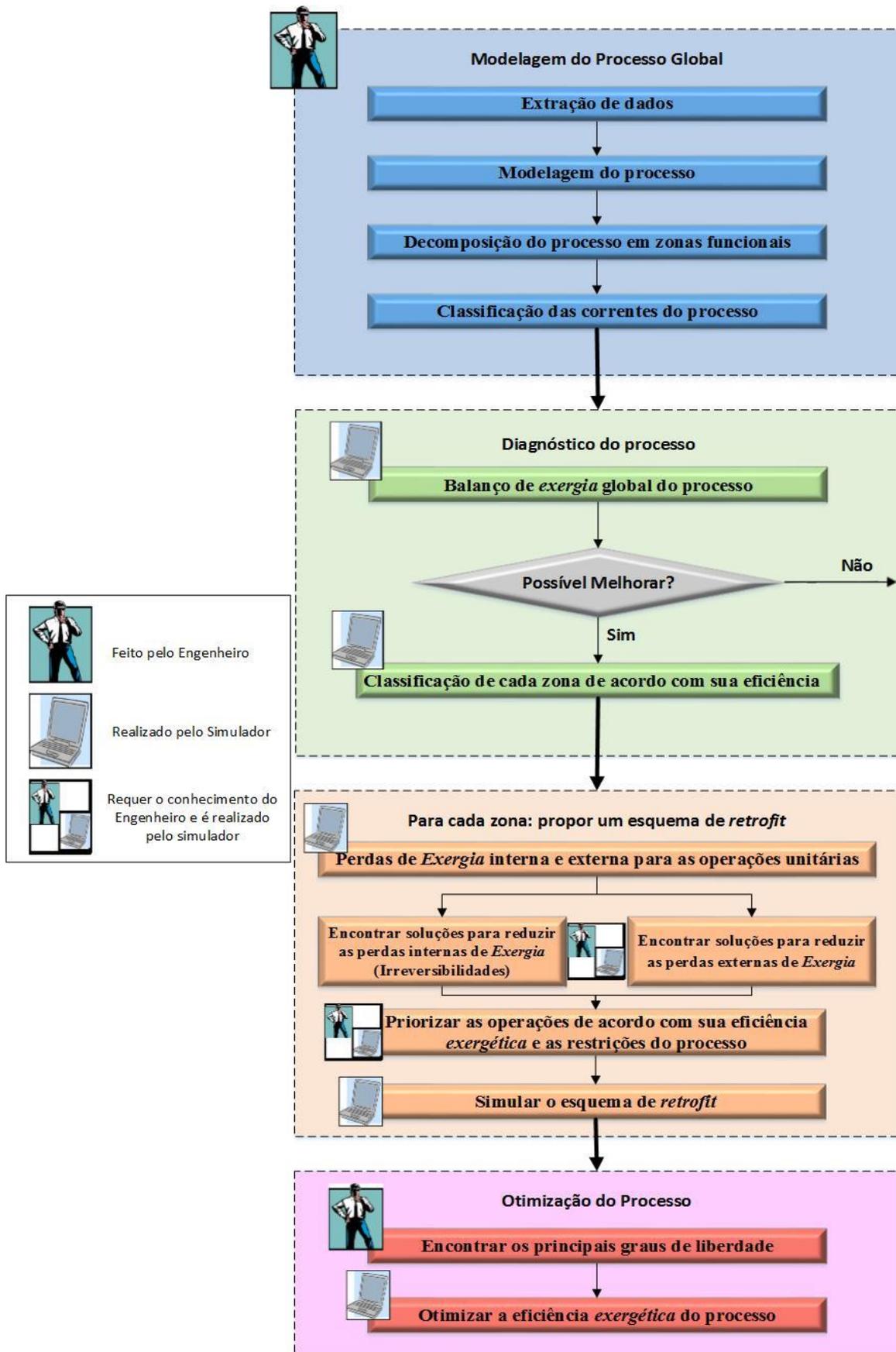


Figura 4.1: Metodologia de análise *exergética* para otimização.

Dessa forma, os primeiros pratos da coluna AA1D representam a coluna D, os pratos intermediários à coluna A1 e os últimos pratos representam a coluna A. Da mesma forma. Os primeiros pratos da coluna B1B representam a coluna B e as últimas a coluna B1.

Um dos objetivos desse trabalho é o estudo de uma configuração típica de um sistema de destilação para produção de álcool hidratado, os dados experimentais foram todos baseados em Marquini (2007) e Batista (2008), oriundos da destilaria de uma usina do norte do Paraná. A corrente de vinho foi fixada em 202542 kg/h, a uma pressão de 1 atm e temperatura de 94 °C, com uma concentração de etanol de 0,0645 em massa, representando um vinho de 8 °GL. Esse vinho é alimentado sempre no topo da coluna A1, tendo sua posição de alimentação na coluna AA1D variada de acordo com o planejamento experimental proposto. A composição da corrente de vinho foi descrita na tabela 2.2, no entanto, a simulação será realizada com o sistema binário sem diferenças significativas como apresentado por Pérez (2010), uma vez que estes compostos representam 99% da composição da corrente de vinho. Da coluna AA1D saem 2 correntes laterais denominadas produto de fundo da coluna D, representada na Figura 2.12 pelo símbolo PFD, e a corrente de flegma. A corrente PFD tem concentração de etanol em torno de 39-40 % em massa e vazão fixa de 3387 kg/h, sendo alimentada no estágio 40, contando-se de cima para baixo, da coluna B (MARQUINI, 2007). Já a corrente de flegma, é uma corrente na forma de vapor com concentração de etanol em torno de 36 a 39 % em massa e vazão de 28535 kg/h, que é alimentada na base da coluna B (MARQUINI, 2007).

As condições físicas das colunas AA1D e B1B estão indicadas na Tabela 4.2 e os parâmetros operacionais de entrada do sistema original estão indicados na Tabela 4.3.

**Tabela 4.1:** Principais características das colunas do sistema de destilação.

Coluna	Diâmetro (m)	Altura (m)	Características dos pratos		
			Quantidade	Espaçamento (m)	Tipo
A1	3,0	2,0	4	0,50	Calotada
A	3,6	16,0	22	0,65	Valvulada
B	3,3	16,0	45	0,35	Valvulada
B1	3,3	7,0	16	0,35	Calotada
D	1,5	1,7	6	0,24	Calotada

Fonte: JORGE et al. (2010)

**Tabela 4.2:** Parâmetros de entrada do sistema original.

Parâmetro	Símbolo	Valor total
Razão de refluxo coluna AA1D	R	30
Razão de refluxo B1B	R	4,5
Taxa de destilado coluna AA1D (ASD)	$\dot{m}_{Dest} \left( \frac{kg}{h} \right)$	430
Taxa de destilado coluna B1B (Etanol Hidratado)	$\dot{m}_{Dest} \left( \frac{kg}{h} \right)$	13800
Vazão mássica da alimentação (vinho)	$\dot{m}_{Alim} \left( \frac{kg}{h} \right)$	202542
Temperatura de alimentação	$T_{Alim} (°C)$	94
Pressão de alimentação	$P_{Alim} (kPa)$	101
Fração mássica de Etanol na alimentação	$x_{Et, Alim}$	0,0645
Fração mássica de Água na alimentação	$x_{H_2O, Alim}$	0,9355
Pressão de operação do condensador	$P_{Cond} (kPa)$	101
Pressão de operação do refeedor	$P_{Ref} (kPa)$	101
Temperatura ambiente	$T_0 (°C)$	25
Pressão ambiente	$P_0 (kPa)$	101
Temperatura de entrada da água de resfriamento no condensador	$T_{Resf, Ent} (°C)$	30
Temperatura de saída da água de resfriamento no condensador	$T_{Resf, Saída} (°C)$	45
Temperatura de entrada do vapor no refeedor	$T_{Vap, Ent} (°C)$	140
Temperatura de saída do vapor no refeedor	$T_{Vap, Saída} (°C)$	140
Número de estágios da coluna AA1D	N	34
Número de estágios da coluna B1B	N	65
Estágio de alimentação da coluna AA1D	$N_{Alim}$	7
Estágios de alimentação da coluna B1B	$N_{Alim}$	40/45
Taxa mínima de atratividade	i	10%
Tempo de vida útil	TVU (anos)	30
Tempo disponível de operação do sistema	$\tau$ (horas)	8760
Exergia padrão do Etanol (v)	$E_{0, Et}^{0, v} \left( \frac{kJ}{kmol} \right)$	1363900
Exergia padrão da Etanol (L)	$E_{0, H_2O}^{0, L} \left( \frac{kJ}{kmol} \right)$	1357700
Exergia padrão da Água (v)	$E_{0, H_2O}^{0, v} \left( \frac{kJ}{kmol} \right)$	9500
Exergia padrão do Água (L)	$E_{0, Et}^{0, L} \left( \frac{kJ}{kmol} \right)$	900

#### 4.4 Modelagem do Processo

As informações recolhidas são então processadas por meio da realização dos balanços de massa e energia, que podem ser executadas em uma planilha simples ou em ferramentas mais avançadas, tais como um software de simulação de processos. Na abordagem proposta, foi utilizado o simulador *Aspen Plus 8.5*, devidamente licenciado para a *Universitat Rovira i Virgili (URV)*, durante a estância de pesquisa lá realizada.

A escolha de um bom modelo para a representação do equilíbrio líquido-vapor, de nada adiantará se os parâmetros utilizados por esses modelos não estiverem bem ajustados. A eficiência dos modelos, bem como a confiabilidade das simulações realizadas, depende diretamente de um bom ajuste dos parâmetros utilizados nessas equações. A composição do vinho industrial a ser utilizado será simplificada para o sistema binário Etanol/Água, como justificado anteriormente no Capítulo 2.

Como já mencionado anteriormente, a volatilidade relativa é um dos principais parâmetros que regem o processo de destilação, sendo altamente eficaz para determinar o quão fácil ou o quão difícil é o processo de separação. A eficiência de Murphree dos pratos da coluna do sistema real é informada em seu projeto no valor de 60%.

Por meio do uso do simulador *Aspen Plus* investigou-se o equilíbrio de fase do mosto fermentado, considerando o sistema em estudo. O modelo NRTL foi utilizado para o cálculo do coeficiente de atividade, com a fase vapor sendo calculada pela Equação de Hayden-O'Connell, como discutido no capítulo 2. Sendo assim, o modelo termodinâmico escolhido no simulador *Aspen Plus* foi o NRTL-HOC, Batista (2008).

Os balanços materiais para as colunas do sistema são apresentados a seguir:

- Balanço global para a coluna AA1D:

$$m_{\text{vinho}} = m_{\text{ASD}} + m_{\text{PFD}} + m_{\text{flegma}} + m_{\text{vinhaça}} \quad (4.1)$$

- Balanço global para a coluna B1B:

$$m_{\text{PFD}} + m_{\text{Flegma}} = m_{\text{hidratado}} + m_{\text{flegmaça}} \quad (4.2)$$

Balanço de energia para a coluna AA1D:

$$m_{vinho}h_{vinho} + Q_{ref} = m_{ASD}h_{ASD} + m_{PFD}h_{PFD} + m_{flegma}h_{flegma} + m_{vinhaça}h_{vinhaça} + Q_{cond} \quad (4.3)$$

Balço de energia para a coluna B1B:

$$m_{PFD}h_{PFD} + m_{Flegma}h_{flegma} + Q_{ref} = m_{hidratado}h_{hidratado} + m_{flegmaça}h_{flegmaça} + Q_{cond} \quad (4.4)$$

As equações do balanço de *exergia* para as correntes em ambas as colunas que estudaremos serão descritas a seguir.

Balço de *exergia* para a coluna AA1D:

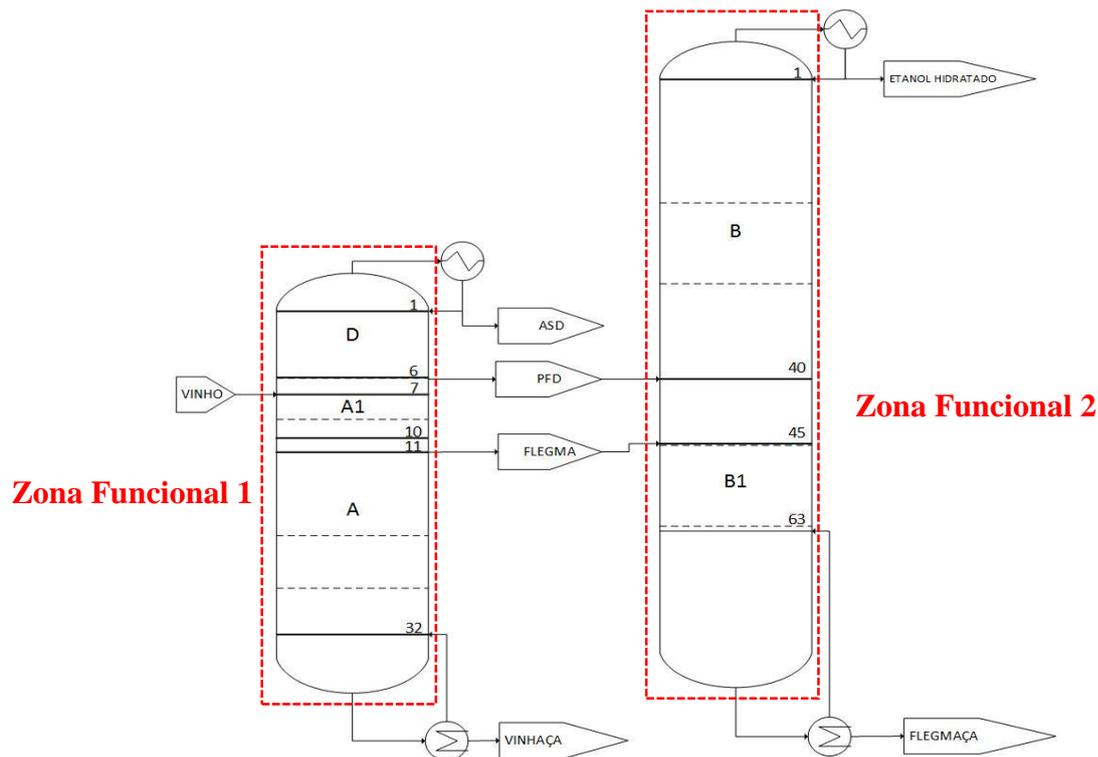
$$E_{vinho} = E_{ASD} + E_{PFD} + E_{flegma} + E_{vinhaça} + E_{dest} + E_{Perd} \quad (4.5)$$

Balço de *exergia* para a coluna B1B:

$$E_{PFD} + E_{Flegma} = E_{hidratado} + E_{flegmaça} + E_{dest} + E_{Perd} \quad (4.6)$$

#### 4.5 Decomposição do Processo em Zonas Funcionais

A análise de *exergia* se destina a ser aplicada a estudos de casos industriais reais, nesta situação, o processo pode ser considerado complexo e composto por diferentes zonas funcionais. A decomposição do processo nestas zonas facilitará a análise ao classificar as zonas funcionais de acordo com a sua eficiência *exérgica* e no sistema em estudo, classificamos as zonas funcionais como apresentado na Figura 4.2. A zona funcional 1 equivale a coluna AA1D e a zona funcional 2 equivale a coluna B1B.



**Figura 4.2:** Zonas funcionais do sistema de destilação industrial.

#### 4.6 Classificação das Correntes do Processo

A avaliação da eficiência *exergética* requer uma classificação de cada um dos fluxos materiais de saída de cada zona funcional como: corrente de produto, subproduto ou resíduo. Realizou-se esta etapa de forma simples, pois por padrão, o simulador de processos leva em conta todas as correntes de saída como correntes de produtos, o que é o caso.

#### 4.7 Diagnósticos do Processo

A segunda etapa é realizada aplicando-se o modelo implementado na primeira etapa no o simulador de processos. Esta fase pode ser decomposta em duas etapas e apresentaremos em forma de algoritmo os passos necessários para a simulação do sistema.

## 4.8 Balanço de *Exergia* Global do Processo

Determinar as perdas de *exergia* do processo significa descobrir o quanto o processo em operação tem potencial para melhorias do ponto de vista da termodinâmica. Dificilmente é possível determinar o quanto estas perdas podem ser reduzidas, pois sempre existirá a parte irreversível absoluta do processo. Apresentaremos a seguir a forma mais detalhada de como isto foi realizado no simulador *Aspen Plus*.

### Etapa 1: Seleção das Propriedades

A primeira etapa, é idêntica para a simulação de ambas as zonas funcionais, portanto, realizaremos para a coluna AA1D sabendo que o mesmo foi feito para a coluna B1B. Estaremos trabalhando a seleção dos compostos e suas propriedades enquanto o item “Propriedades” do simulador estiver selecionado, como indicado na Figura 4.3.

Primeiramente nomeamos o processo na barra de inserção de título, selecionamos o sistema de unidades com o qual desejamos trabalhar, escolhemos quais serão as fases válidas para o cálculo do equilíbrio e se permitiremos que o simulador adote a água como uma segunda fase no estado líquido para sistemas envolvendo água e compostos orgânicos, na falta de um solvente adequado.

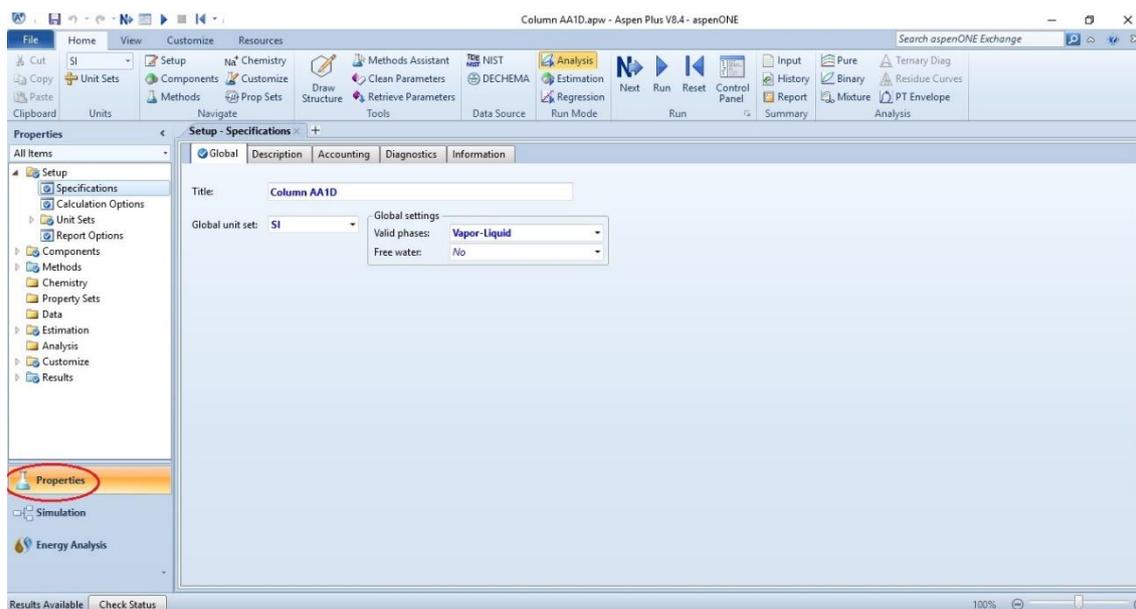
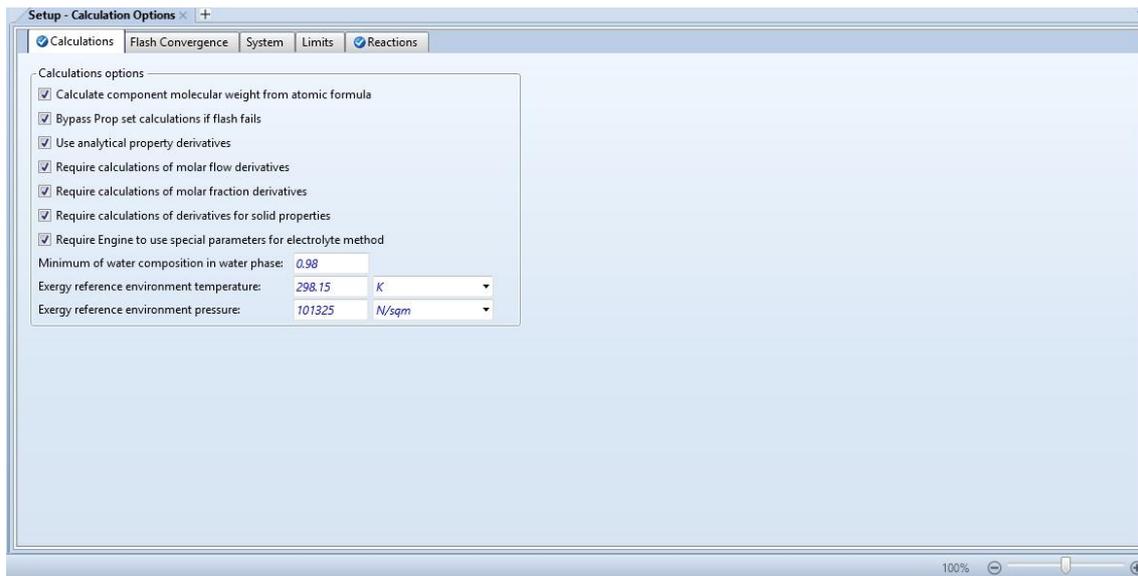


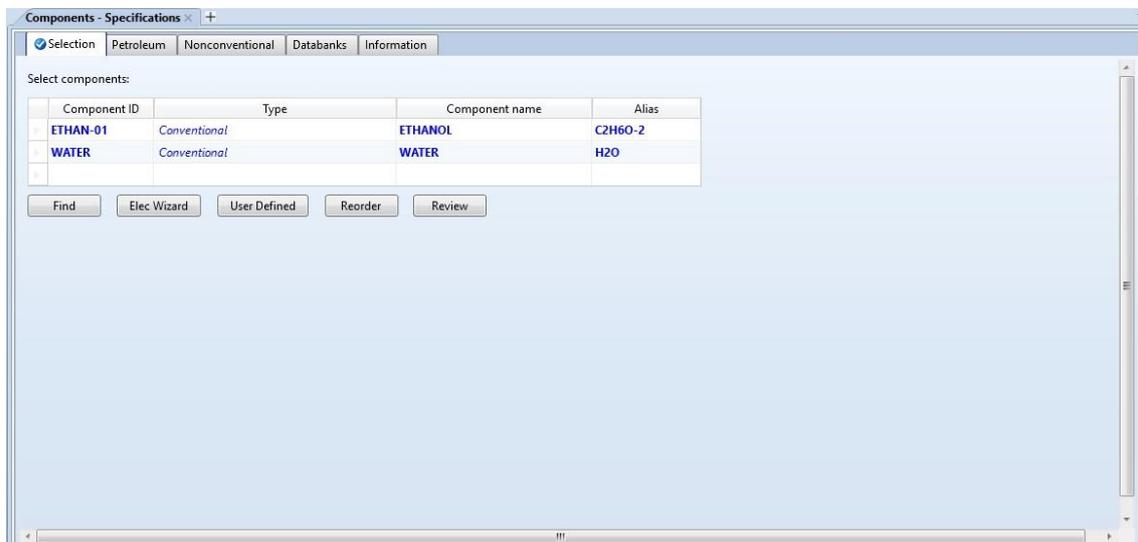
Figura 4.3: Especificações gerais do processo.

A seguir, nas opções de cálculo, marcaremos algumas opções que farão com que os cálculos das propriedades termodinâmicas calculadas sejam realizados de forma mais rigorosa. O peso molecular dos compostos será calculado a partir de sua fórmula atômica. Caso o cálculo do flash na separação “falhe” as propriedades não são calculadas. E como ponto mais importante, especificaremos qual será o estado de referência do ambiente para cálculo da *exergia*, como ilustrado na Figura 4.4.



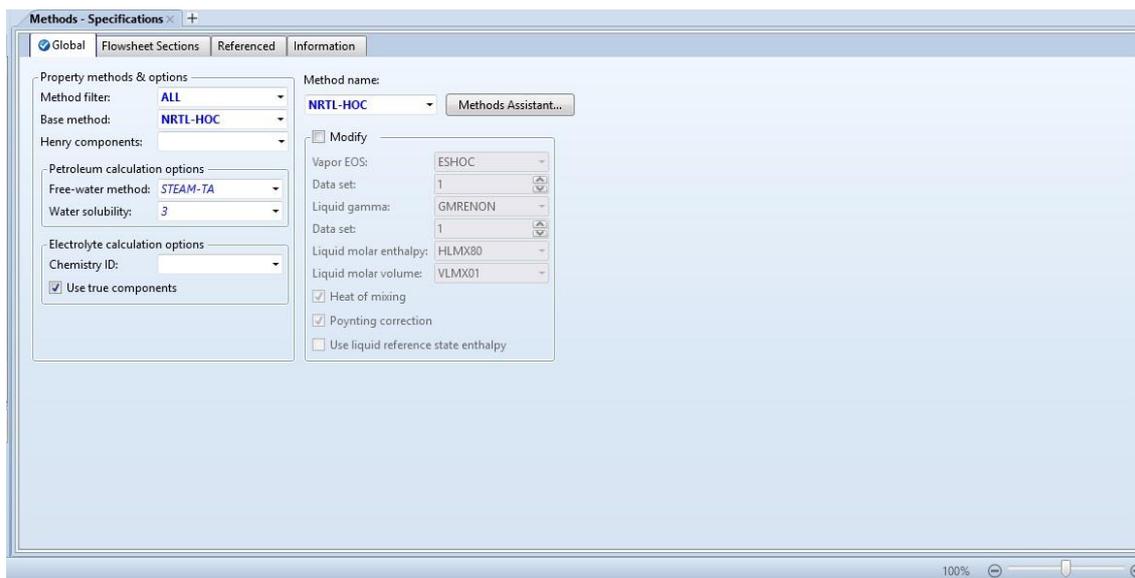
**Figura 4.4:** Opções de cálculo selecionadas.

Após estas especificações, devemos selecionar os compostos que farão parte do sistema em estudo (Figura 4.5). No caso, os compostos água e etanol são selecionados.



**Figura 4.5:** Seleção dos componentes do processo.

Definidos os compostos do processo e estudados os modelos representativos do equilíbrio existente entre eles, devemos especificá-los ao simulador (Figura 4.6). Como discutido na etapa anterior da metodologia utilizada, adotaremos o modelo NRTL para representar o equilíbrio da fase líquida e a equação de Hayden-O'Connell para a fase vapor. Esta seleção está indicada na figura a seguir.



**Figura 4.6:** Especificação dos modelos termodinâmicos.

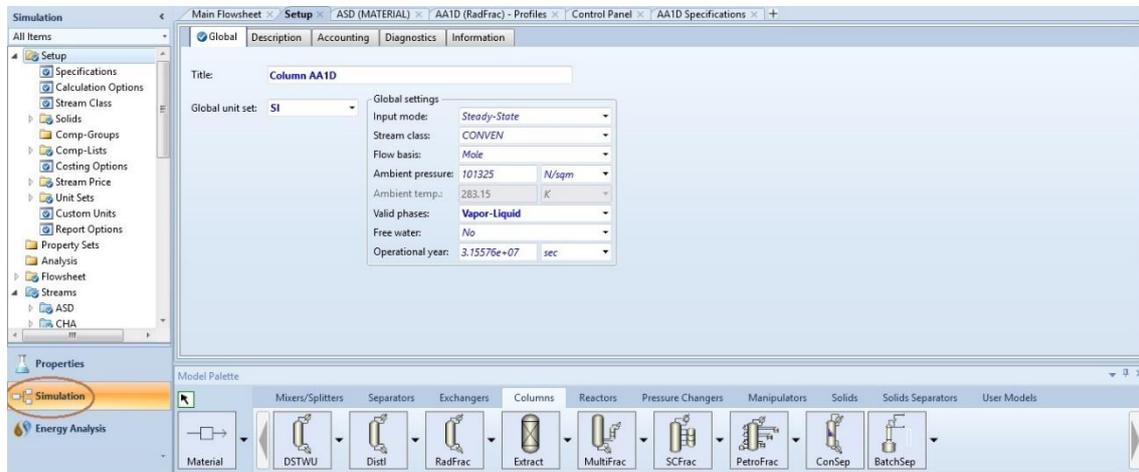
## Etapa 2: Parâmetros da Simulação

Na sequência da seleção das propriedades dos compostos, seguimos para a etapa de inserção dos parâmetros da simulação a ser realizada. Estaremos trabalhando a seleção dos compostos e suas propriedades enquanto o item “Simulação” do simulador estiver selecionado, como indicado na Figura 4.7.

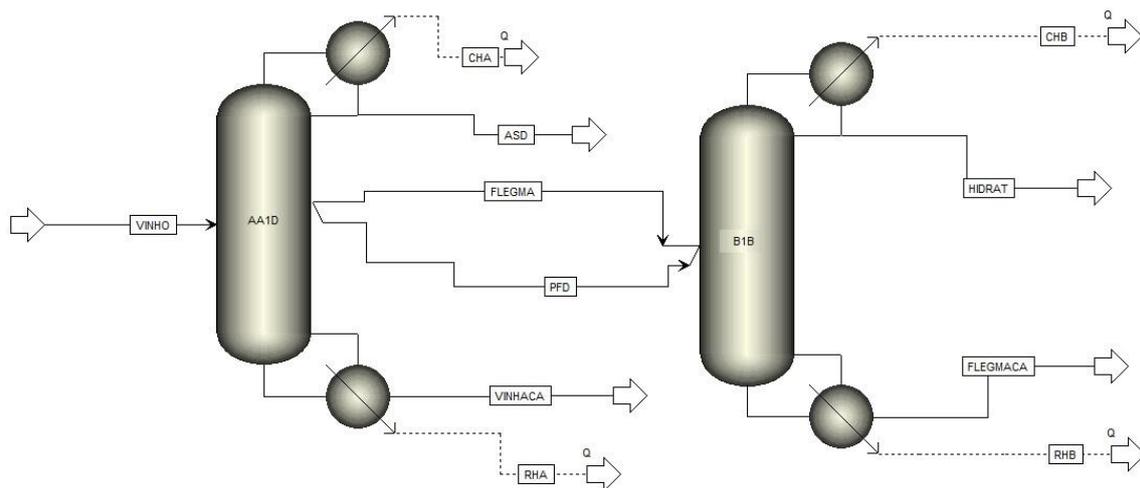
Nesta etapa, devemos distinguir as especificações de processo de cada uma das zonas funcionais segundo as informações contidas na etapa da extração de dados. Para isso, serão explicados os passos adotados para as colunas de forma conjunta, porém, cada uma das colunas possuirá uma ilustração diferente e específica.

Para efeitos de confiabilidade dos resultados, primeiramente simulou-se cada uma das colunas isoladamente e avaliou-se seus resultados separadamente. Em seguida, criou-se uma nova simulação (Figura 4.8), mais complexa, contendo ambas as colunas e a partir dos resultados obtidos de forma isolada, foram propostas estimativas iniciais já

aproximadas para resolução dos balanços de massa e energia. Os resultados obtidos foram os mesmos.



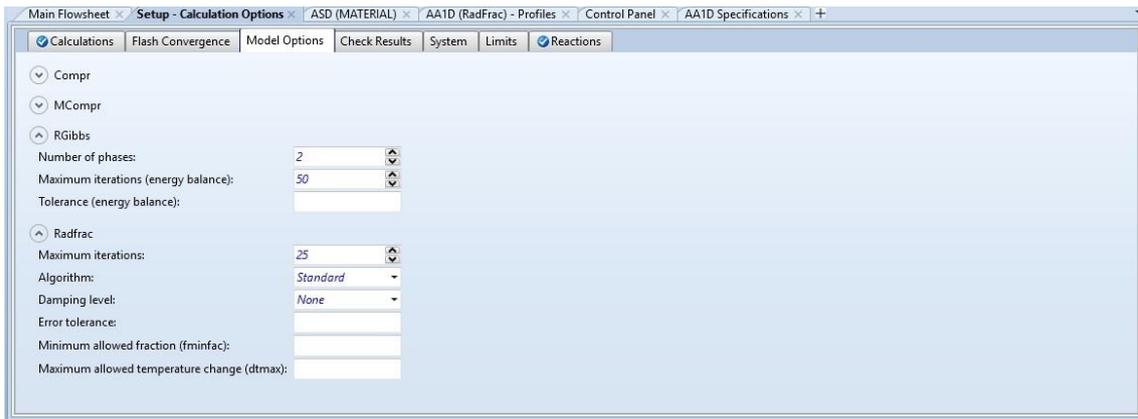
**Figura 4.7:** Especificações gerais da simulação do processo.



**Figura 4.8:** Fluxograma do Sistema Simulado Completo.

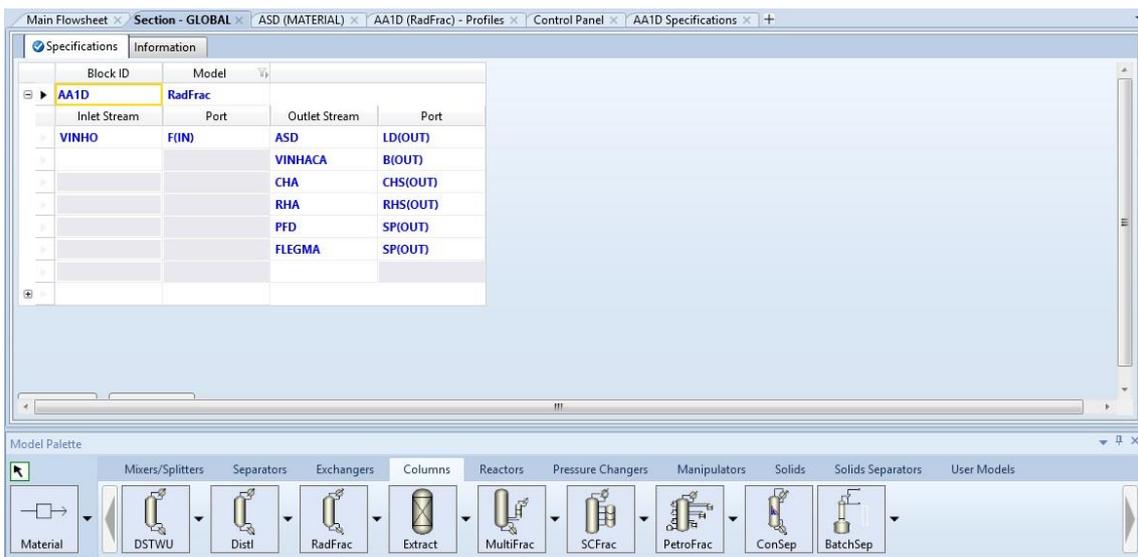
O modelo adotado a ser utilizado nestas simulações para projeto e operação das colunas é conhecido como *RadFrac*. O método *RadFrac* é um método rigoroso para simulação do processo de destilação comportado pelo simulador *Aspen Plus*. Não são feitas suposições grosseiras. Pode ser aplicado na simulação de diversas operações unitárias, como descrito no item 2.7 da fundamentação teórica.

Primeiramente, especificamos o número máximo de iterações e o algoritmo padrão a ser adotado pelo método nas opções de cálculo (Figura 4.9).

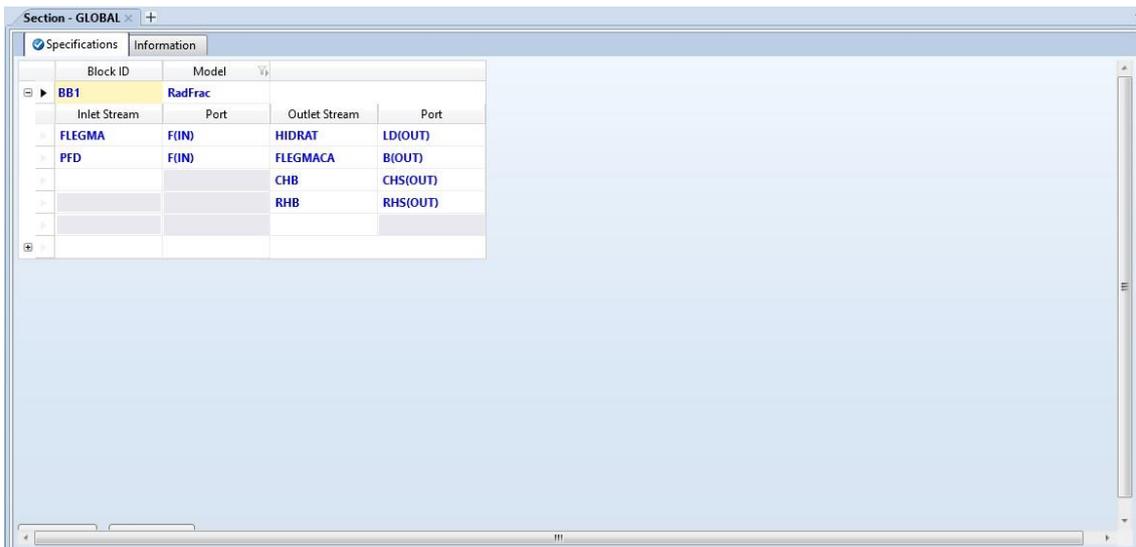


**Figura 4.9:** Especificações para o algoritmo *RadFrac*.

A seguir, na opção de inserção dos blocos do processo, inserimos ambas as colunas (AA1D e B1B), selecionamos o modelo a ser utilizado em cada uma delas e definimos todas as correntes de massa e energia a serem trabalhadas em cada um dos blocos.



**Figura 4.10:** Correntes de processo do bloco da zona funcional 1.

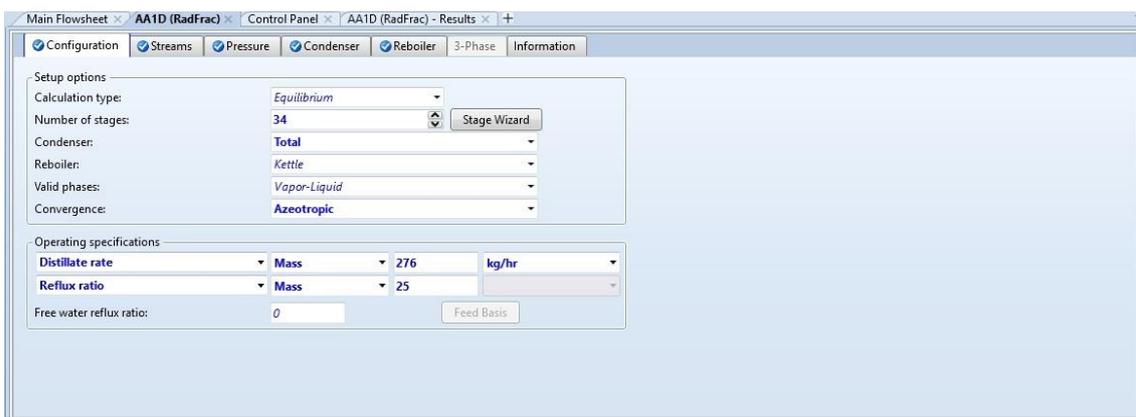


Block ID	Model	Inlet Stream	Port	Outlet Stream	Port
BB1	RadFrac	FLEGMA	F(IN)	HIDRAT	LD(OUT)
		PFD	F(IN)	FLEGMACA	B(OUT)
				CHB	CHS(OUT)
				RHB	RHS(OUT)

**Figura 4.11:** Correntes de processo do bloco da zona funcional 2.

Após a inserção dos blocos, definiu-se algumas das condições operacionais do processo para cada uma das colunas, como indicado nas Figuras 4.10 e 4.11. Realizou-se o cálculo de equilíbrio estágio a estágio, definiu-se o número de estágio em cada uma das colunas (sendo o condensador o estágio 1 e o refeedor o último estágio da coluna), especificou-se um condensador total, o tipo do refeedor, as fases envolvidas no equilíbrio, e a convergência limitada pela possibilidade da formação de um azeótropo na separação, o que ocorre neste sistema.

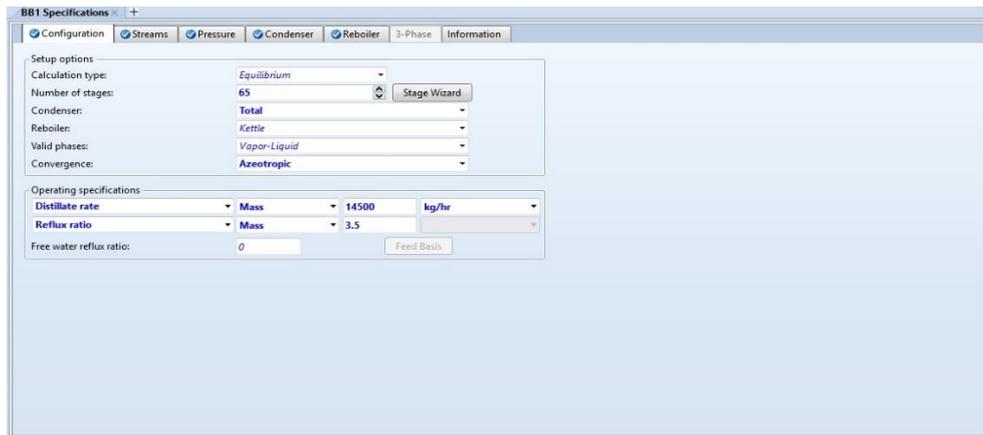
Especificou-se como parâmetros ajustáveis a vazão de destilado retirado no topo das colunas e também a razão de refluxo de cada uma das colunas (Figuras 4.12 e 4.13).



Configuration window for AA1D (RadFrac) showing the following settings:

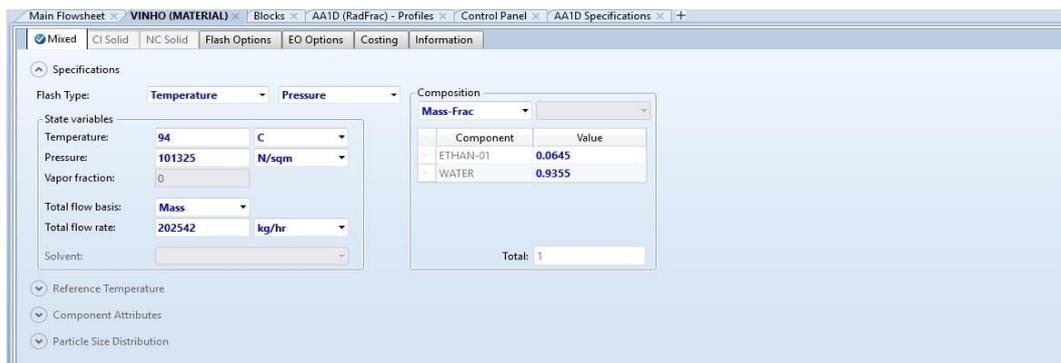
- Setup options:
  - Calculation type: Equilibrium
  - Number of stages: 34
  - Condenser: Total
  - Reboiler: Kettle
  - Valid phases: Vapor-Liquid
  - Convergence: Azeotropic
- Operating specifications:
  - Distillate rate: Mass, 276 kg/hr
  - Reflux ratio: Mass, 25
  - Free water reflux ratio: 0

**Figura 4.12:** Configuração da coluna AA1D.

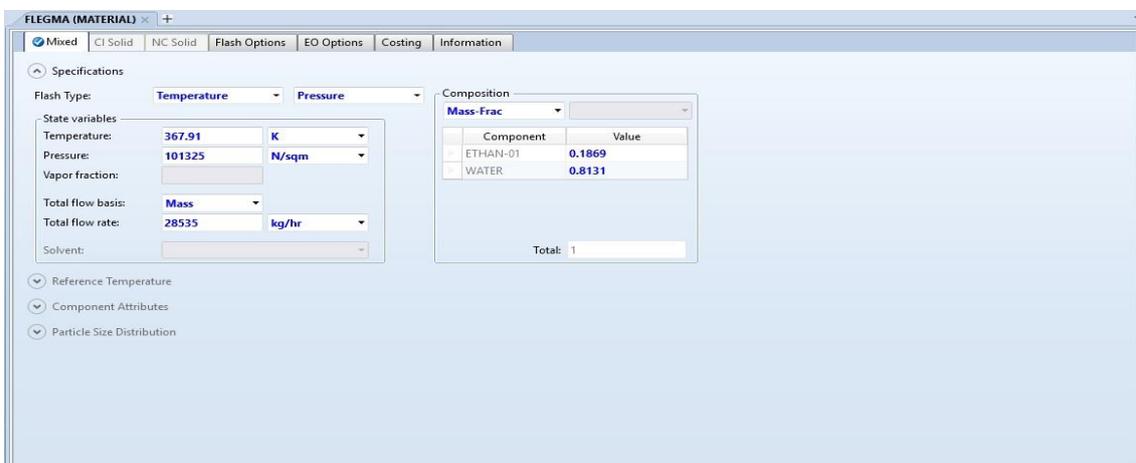


**Figura 4.13:** Configuração da coluna B1B.

Em seguida, as condições de alimentação do vinho na primeira coluna foram especificadas, e com os resultados obtidos após a simulação da primeira coluna obteve-se as condições de alimentação para a segunda coluna, pois as correntes de álcool de segunda e de flegma são as correntes de alimentação da segunda coluna. As Figuras 4.14 e 4.15 ilustram estas condições, como descritas no processo anteriormente.



**Figura 4.14:** Parâmetros da corrente de alimentação do vinho.



**Figura 4.15:** Parâmetros da corrente de alimentação do flegma.

Definidas as condições das correntes, deve-se então especificar ao simulador os estágios alimentação e saída de cada uma das correntes e sua condição (líquida ou vapor). Este procedimento para ambas as colunas foi feito como indicado nas figuras 4.16 e 4.17.

The screenshot shows the 'AA1D (RadFrac) - Profiles' window. The 'Feed streams' section contains the following data:

Name	Stage	Convention
VINHO	7	On-Stage

The 'Product streams' section contains the following data:

Name	Stage	Phase	Basis	Flow	Units	Flow Ratio	Feed Specs
ASD	1	Liquid	Mole		kmol/sec		Feed basis
VINHACA	34	Liquid	Mole		kmol/sec		Feed basis
PFD	6	Vapor	Mass	3387	kg/hr		Feed basis
FLEGMA	15	Vapor	Mass	28535	kg/hr		Feed basis

**Figura 4.16:** Estágios de alimentação e retirada de produtos na coluna AA1D.

The screenshot shows the 'B1B Specifications' window. The 'Feed streams' section contains the following data:

Name	Stage	Convention
FLEGMA	45	On-Stage
PFD	40	On-Stage

The 'Product streams' section contains the following data:

Name	Stage	Phase	Basis	Flow	Units	Flow Ratio	Feed Specs
HIDRAT	1	Liquid	Mole		kmol/sec		Feed basis
FLEGMACA	65	Liquid	Mole		kmol/sec		Feed basis

**Figura 4.17:** Estágios de alimentação e retirada de produtos na coluna B1B.

Especificados os estágios deve-se por fim realizar a simulação do processo. Se todos os dados do processo foram corretamente inseridos no simulador os resultados serão apresentados em planilhas contendo a resolução de todos os balanços de massa e energia estágio a estágio de ambas as colunas. As abas situadas na parte de cima da interface de apresentação de resultados subdividem os resultados da simulação, a análise de perdas de *exergia* se encontra na aba da análise térmica (Figura 4.18).

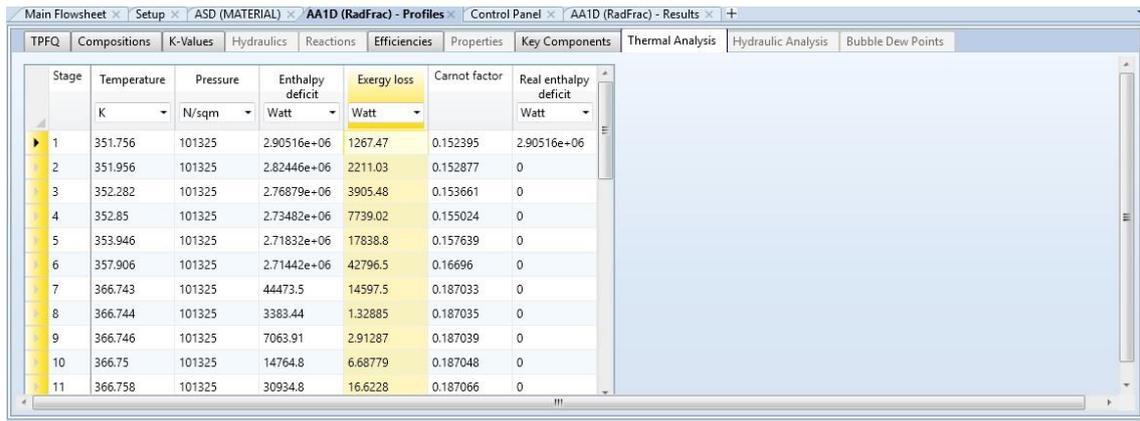


Figura 4.18: Apresentação dos resultados no simulador para a perda de *exergia* de cada estágio.

Em função dos resultados apresentados o simulador pode gerar de diversos perfis ao longo da coluna: perfil de temperatura, perfis de composição e também o perfil de perdas de *exergia* estágio a estágio da coluna (Figuras 4.19, 4.20 e 4.21). Desta forma, pode-se pela análise deste perfil propor um sistema de *retrofit* para o caso estudado.

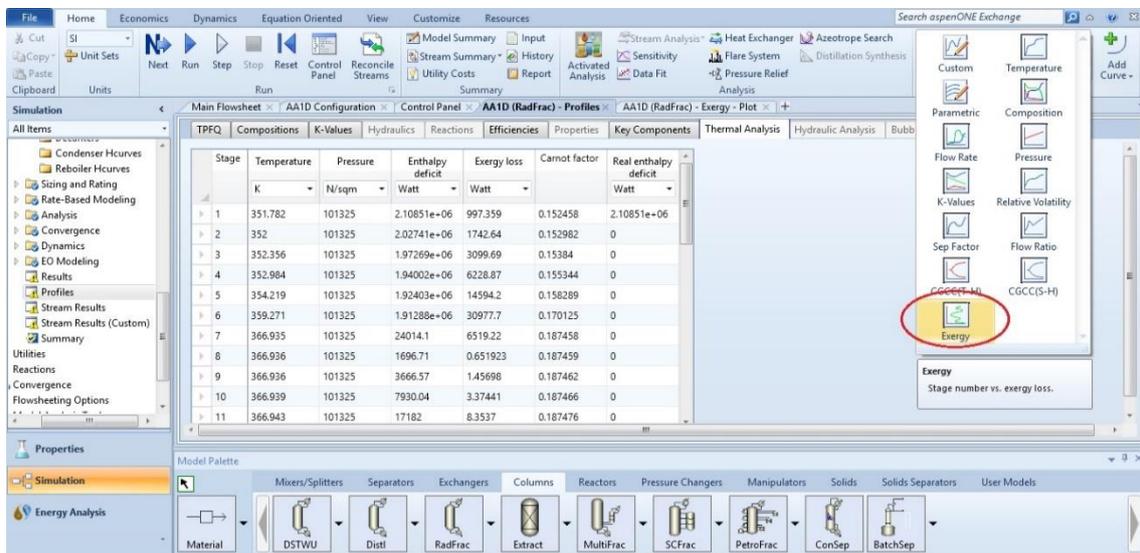
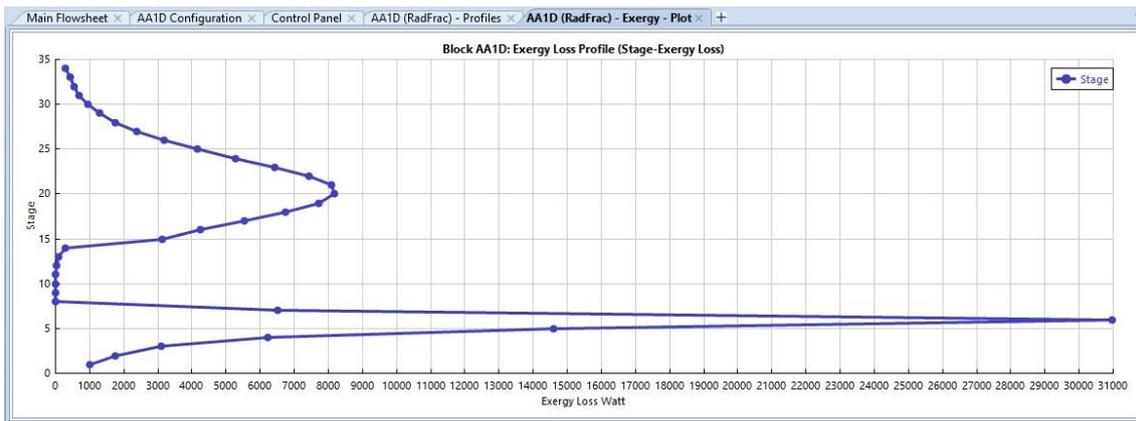
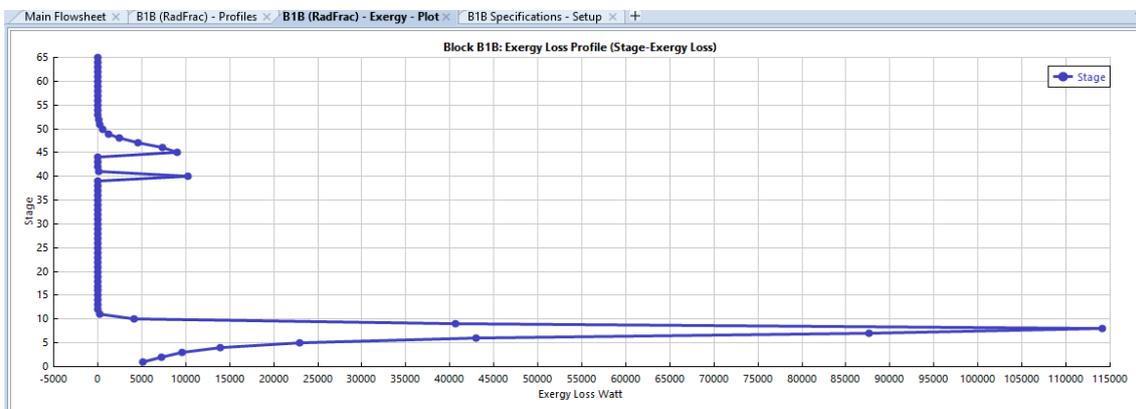


Figura 4.19: Seleção do perfil de perdas de *exergia* estágio a estágio da coluna.



**Figura 4.20:** Perfil de *exergia* perdida apresentado pelo simulador para a coluna AA1D.



**Figura 4.21:** Perfil de *exergia* perdida apresentado pelo simulador para a coluna B1B.

#### 4.9 Classificação de Cada Zona de Processo de Acordo com a sua Eficiência

A eficiência *exérgica* torna possível a determinação dos pontos críticos do sistema em estudo. Isto significa que a *exergia* cria uma hierarquia das zonas do processo, de tal maneira, que as medidas a serem adotadas para melhoramento do processo devem ser implementadas prioritariamente sobre as zonas em que elas podem ser mais eficazes. Esta etapa possibilita localizar os principais pontos para economia de energia. Neste caso, a eficiência *exérgica* no software está representada pelo fator de Carnot e como será discutido no capítulo 5 a primeira coluna apresenta uma perda de *exergia* bem superior a segunda coluna, portanto as medidas deverão ser aplicadas primordialmente sobre a primeira coluna.

#### 4.10 Proposta de um Esquema de *Retrofit*

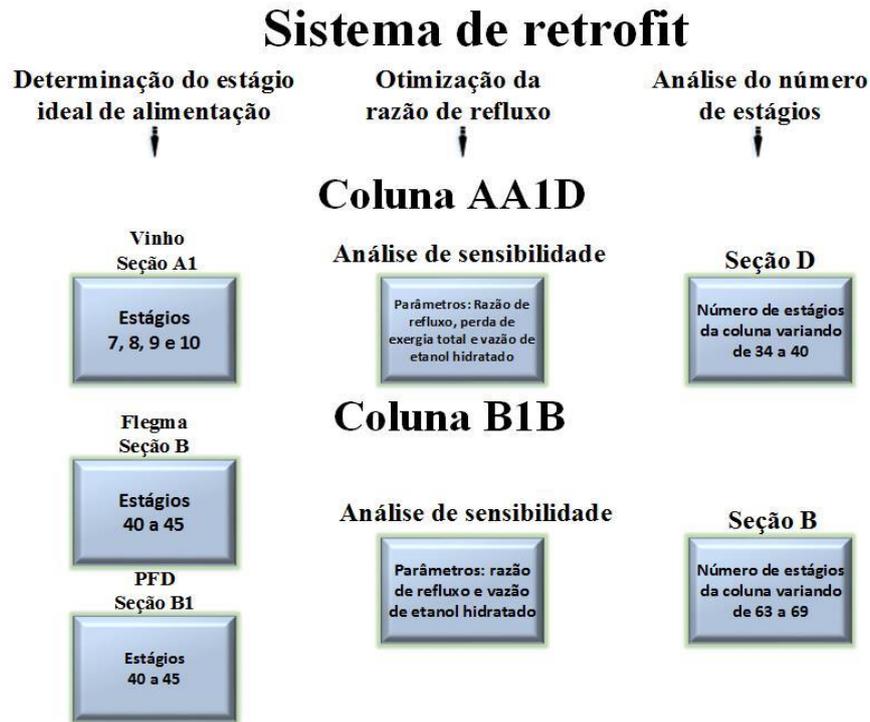
Como já mencionado, a maioria dos estudos de casos envolvendo colunas de destilação na literatura param no final da segunda fase porque não realizam a análise econômica do processo resultante da redução das perdas exergéticas do processo. Na metodologia, propomos a terceira etapa para, a partir dos resultados da segunda, identificar e reduzir as principais perdas de *exergia*. Para esse efeito, cada zona funcional é analisada mais precisamente.

Em primeiro lugar, uma representação gráfica das perdas de *exergia* externas e internas que ocorrem em cada operação unitária deve ser realizada. Em seguida, são propostas soluções. De um modo geral, as perdas de *exergia* podem ser reduzidas por meio do desenvolvimento de tecnologias ou da otimização do processo.

Muitas vezes, as soluções propostas não podem ser executadas, por razões econômicas ou por causa de limitações técnicas inerentes ao processo. Finalmente, a simulação do esquema de *retrofit* é realizada a fim de verificar a exatidão das soluções propostas.

De acordo com os parâmetros da otimização de uma coluna de destilação já discutidos neste trabalho (razão de refluxo, condição térmica da alimentação, número de estágios da coluna, estágio de alimentação e inserção de refeeders intermediários na coluna) as restrições do processo nos impedem de alterarmos a condição térmica da alimentação devido ao uso de trocadores de calor do tipo placa anteriores a primeira coluna de destilação e também nos impede de inserirmos trocadores de calor intermediários em função da brusca modificação as colunas já existentes em operação.

Logo, o sistema de *retrofit* proposto irá trabalhar as demais variáveis em intervalos e passos que estão ilustrados na Figura 4.21. A justificativa para cada um destes intervalos será apresentada juntamente com os resultados das simulações no capítulo 5.



**Figura 4.22:** Sistema de *retrofit* proposto.

#### 4.11 Otimização Energética do Processo

O sistema anterior pode apresentar alguns graus de liberdade de acordo com os parâmetros de operação da coluna de destilação (por exemplo, temperatura de operação, razão de refluxo, estágio de alimentação, número de estágios, dentre outros). Por esse motivo, o último estágio da metodologia recomenda que por meio da otimização determine-se os valores ideais para estes parâmetros. Para encontrar a solução ideal, um *trade-off* entre a eficiência *exergética* e o custo de investimento para o novo processo dever ser realizada, dando origem ao estudo *exergoeconômico*.

As restrições são:

Todas as variáveis  $\geq 0$

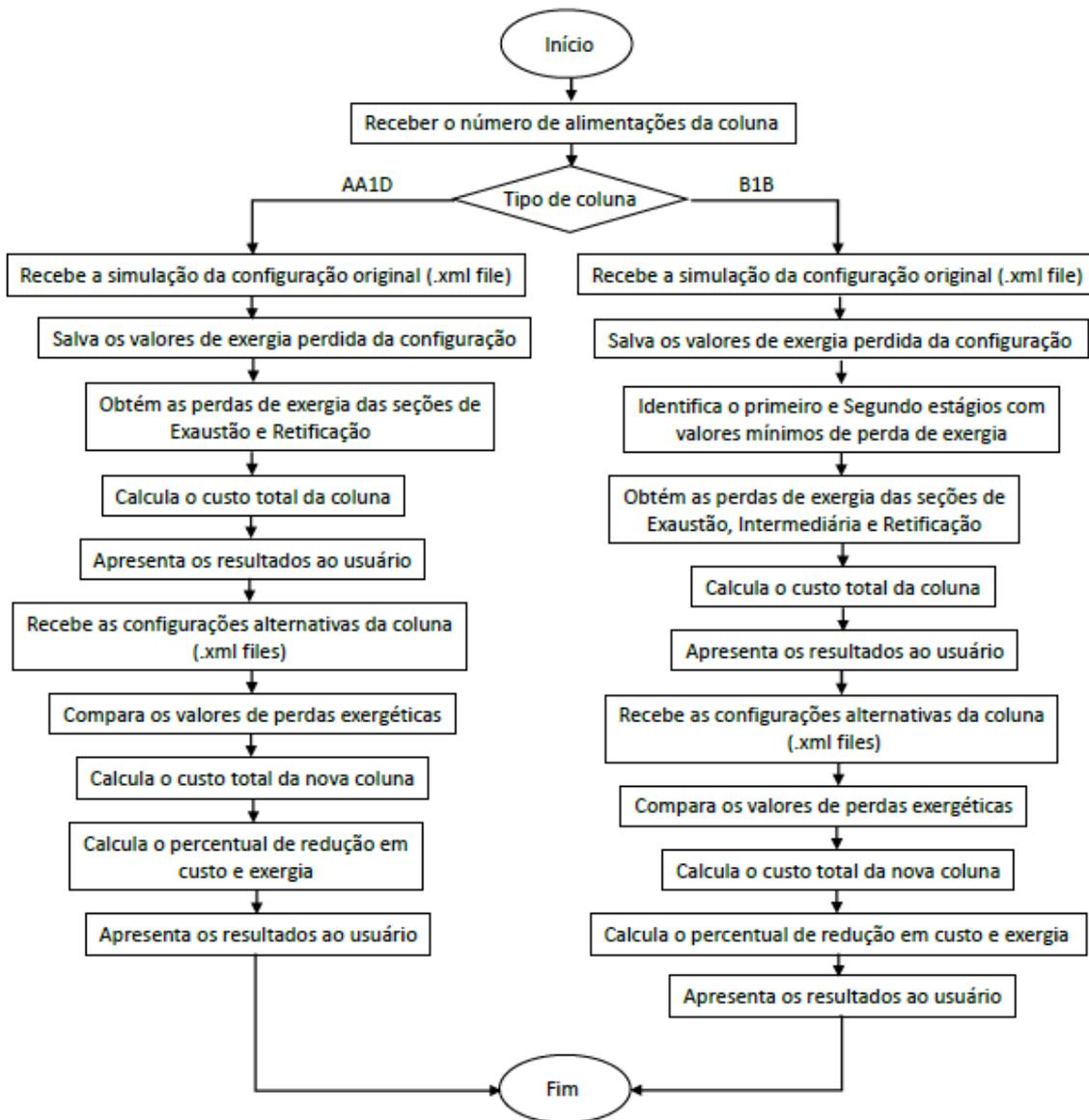
Pureza da corrente de PFD  $\geq 39\%$  e  $\leq 40\%$  em massa.

Pureza da corrente de Flegma  $\geq 36\%$  e  $\leq 39\%$  em massa.

Pureza da corrente de Etanol Hidratado  $\geq 92,6\%$  e  $\leq 93,8\%$  em massa.

De acordo com os parâmetros das colunas de destilação já discutidos na metodologia (estágio de alimentação, razão de refluxo e número de estágios) o sistema de retrofit é então executado em um código desenvolvido no software Matlab® capaz de

receber os resultados obtidos das simulações em arquivos salvos com a extensão “.xml” e realizar a otimização exergoeconômica do sistema, como indicado na Figura 4.22.



**Figura 4.23:** Diagrama de blocos do algoritmo desenvolvido no Matlab.

#### 4.12 Modelagem Exergoeconômica

O balanço de custos totais do sistema pode ser escrito como:

$$\sum_{j=1}^n C_{j,entrada} + CTE_k^{total} = \sum_{j=1}^n C_{j,saída} \quad (4.7)$$

Onde  $C_j$  é o custo do componente  $j$  e CTE é o custo total do equipamento.

O que significa que:

$$C_{alim} + C_{\Delta vapor} + CTE_k^{total} = C_{dest} + C_{fund} + C_{\Delta resf} \quad (4.8)$$

A corrente de fundo (a vinhaça) é aproveitada para fins de irrigação, então seu valor será desconsiderado. Adiante, o valor da corrente de água de resfriamento do condensador também será desconsiderado, pois geralmente seu valor é mínimo diante das demais variáveis de custo. Logo, a equação *exergoeconômica* pode ser escrita como:

Para a coluna AA1D:

$$\begin{aligned} c_{vinho}^F m_{vinho} Ex_{vinho}^F + c_{vinho}^Q m_{vinho} Ex_{vinho}^Q + m_{vapor} c_{vapor} (Ex_{vapor,ent} - \\ Ex_{vapor,sai}) + Z_{total}^{CI} = c_{flegma}^F m_{flegma} Ex_{flegma}^F + c_{flegma}^Q m_{flegma} Ex_{flegma}^Q + \\ c_{PFD}^F m_{PFD} Ex_{PFD}^F + c_{PFD}^Q m_{PFD} Ex_{PFD}^Q \end{aligned} \quad (4.9)$$

Onde  $Z$  é o custo associado ao capital de investimento do sistema para cada umas das colunas.

Para a coluna B1B:

$$\begin{aligned} c_{flegma}^F m_{flegma} Ex_{flegma}^F + c_{flegma}^Q m_{flegma} Ex_{flegma}^Q + c_{PFD}^F m_{PFD} Ex_{PFD}^F + \\ c_{PFD}^Q m_{PFD} Ex_{PFD}^Q + m_{vapor} c_{vapor} (Ex_{vapor,in} - Ex_{vapor,out}) + Z_{total}^{CI} + Z_{total}^{OM} = \\ c_{et}^F m_{et} Ex_{et}^F + c_{et}^Q m_{et} Ex_{et}^Q \end{aligned} \quad (4.10)$$

A diferença relativa do custo final é calculada pela equação 4.11:

$$C_{total} = c_{vapor} + c_{alim} (m_{alim} e_{alim} - m_{fundo} e_{fundo} - m_{dest} e_{dest}) = C_{vapor} + C_{Exd} \quad (4.11)$$

### 4.13 Otimização Exergoeconômica do Processo

De acordo com a análise de sensibilidade do sistema, o estágio de alimentação, a razão de refluxo e o número de estágios são as variáveis de decisão. As variáveis

independentes de primeira ordem são:  $m_{et,dest}$ ,  $Q_{ref}$ ,  $x_{Et,dest}$  e as variáveis independentes de segunda ordem são:  $m_{vapor}$ ,  $CTE_{tot}$ , e  $E_{perd}$ .

Obter uma estimativa altamente precisa do custo de uma coluna no estágio da concepção do seu projeto é geralmente impossível. Porém para um estudo comparativo e tomada de decisões de projeto, como obter as condições ótimas de operação, o custo total é pouco influenciado pelos fatores que são dificilmente estimados precisamente. Trabalhos mais recentes como Motta e Faria (2009) e Seider (2010) abordam e aprimoram a metodologia proposta por Guthrie (1974), que será descrita a seguir.

O custo de uma coluna de destilação instalada pode ser estimado a partir de correlações como aquelas desenvolvidas por Guthrie (1974). Estas correlações para o custo podem ser frequentemente atualizadas, baseando-se em dados de custo atuais.

Quando a informação atual não é disponibilizada, o custo é determinado segundo dados da literatura que podem ser ajustados por meio de um “fator de escala”, como o índice Marshall e Swift (M&S). Para tanto é necessário o conhecimento do ano utilizado como base e da estimativa do índice M&S para o período de tempo em que a fabricação do equipamento é antecipada, pois a taxa da variação deste índice entre ano em questão para o ano no qual a correlação de custo é utilizada como um múltiplo para que a inflação do período seja levada em consideração.

Uma coluna de destilação é basicamente um vaso de pressão, e seu custo de fabricação depende de fatores como a espessura de suas paredes, altura e diâmetro. Guthrie (1974) propõe uma correlação para a estimativa do custo do vaso e uma correlação separada para a estimativa do custo dos internos da coluna, os pratos. O custo de um vaso de pressão vertical de aço-carbono, incluindo o suporte e aberturas de acesso, pode ser correlacionada como:

$$C_S = C_{S0} \left( \frac{d}{d_0} \right) \left( \frac{H}{H_0} \right)^{a_s} \quad (4.14)$$

Em que:

$$C_{S0} = c_{S0} \left( \frac{M\&S}{M\&S_{base}} \right) (F_m F_p - 1 + F_I F_D) \quad (4.15)$$

De forma similar, o custo dos internos adicionados a coluna pode ser estimado:

$$C_t = C_{t0} \left( \frac{d}{d_0} \right)^{a_t} \left( \frac{H}{H_0} \right) \quad (4.16)$$

Em que:

$$C_{t0} = c_{t0} \left( \frac{M\&S}{M\&S_{base}} \right) (F_S + F_t + F_m) \quad (4.17)$$

Portanto o custo total (em dólares) da coluna instalada é dado pela Equação 4.18:

$$CTE = C_S + C_t \quad (4.18)$$

Os valores dos coeficientes e fatores das correlações apresentadas estão dispostos nas Tabelas a seguir (4.4 a 4.7).

**Tabela 4.3:** Parâmetros usados nas correlações de custo de uma coluna.

Parâmetro	Valor	Fator de Custo (F)
$d_0$	1	Fator do diâmetro
$H_0$	6.1	Fator de altura
$M\&S_{base}$	301	Fator de escala base
$M\&S_{atual}$	100	Fator de escala base atual
$F_D$	3	Fator de custo direto
$F_I$	1.38	Fator de custo indireto

**Tabela 4.4:** Custo do vaso de pressão.

Parâmetro	Valor	Observação	
$c_{s0}$	5000	Valor relativo ao trabalho de Guthrie	
$A_s$	0.82	Parâmetro de potência do vaso	
$F_p$	1	Para $P \leq P_0 = 4,5$ bar	
	$1 + t(1 - e^{-t/2})$	Para $P > P_0$	
$T$	0	Para $P < 360$ bar	
$F_m$	<b>Revestido</b>	<b>Sólido</b>	<b>Material</b>
	1,00	1,00	Aço-Carbono
	2,30	3,50	Liga 304
	2,60	4,25	Liga 316
	4,50	9,75	Monel
	4,89	10,6	Titânio

**Tabela 4.5:** Custo dos pratos

Parâmetro	Valor	Observação
$C_{t0}$	500	Valor relativo ao trabalho de Guthrie
$A_t$	1.8	Parâmetro de potência dos internos
<b>Espaçamento entre pratos</b>		
$F_s$	1	60 cm
	1,3	45 cm
	2	30 cm
<b>Tipo de Prato</b>		
$F_t$	0,0	Grade
	0,0	Prato
	0,0	Sieve
	0,3	Válvula
	1.6	Bubble cap
	3,2	Koch

**Tabela 4.6:** Custo do material dos pratos.

	<b>Material</b>	
$F_m$	0	Aço-Carbono
	1,5	Ligas
	8.5	Monel

É possível perceber que o número de pratos influencia diretamente no tamanho da coluna de destilação e afeta seu custo diretamente. Combinando os resultados das equações com as informações dos sistemas em estudo vê-se na Equação 4.11 que o custo total do processo ( $C_{tot}$ ) é função da quantidade de vapor utilizada como utilidade quente nos refeedores do processo ( $m_{vapor}$ ) e do custo da *exergia* perdida ( $C_{Ep}$ ) que associaremos ao custo do equipamento, pois anteriormente, vimos que  $CTE_{equipamento}$  é função do número de estágios de cada coluna.

#### 4.14 Conclusões do Procedimento

Este capítulo apresenta a formulação de uma metodologia para análise de *exergia* aplicada a um processo real de destilação. Para isso, além da *exergia* fluxos materiais de entrada e saída do processo, a *exergia* das correntes internas da coluna também é calculada. Após a determinação do perfil de perdas de *exergia*, seus resultados são explorados de modo a fazer modificações operacionais para reduzir estas perdas. Dividindo as perdas de *exergia* em duas categorias, a *exergia* perdida em cada estágio e a perda de *exergia* total da coluna. Para cada uma das perdas de *exergia*, a fonte de perdas e o caminho para o melhoramento foram apresentados. Os resultados obtidos por esta análise podem vir a ser uma ferramenta de orientação para servir engenheiros a propor soluções e melhorias em outros processos de destilação.

Além das perdas de *exergia*, para otimizar o processo de forma adequada, as eficiências termodinâmicas, com base nas perdas de *exergia* são revistas para encontrar a mais adequada configuração a ser implementada no simulador de processos. Verificou-se de maneira bastante ilustrada o passo a passo da simulação do sistema estudado, como determinar a perda de *exergia* total das colunas e maneiras de reduzi-la. O passo seguinte nos leva a avaliar economicamente as colunas de destilação otimizadas, nos conduzindo a alcançar o objetivo principal deste trabalho.

# CAPÍTULO 5

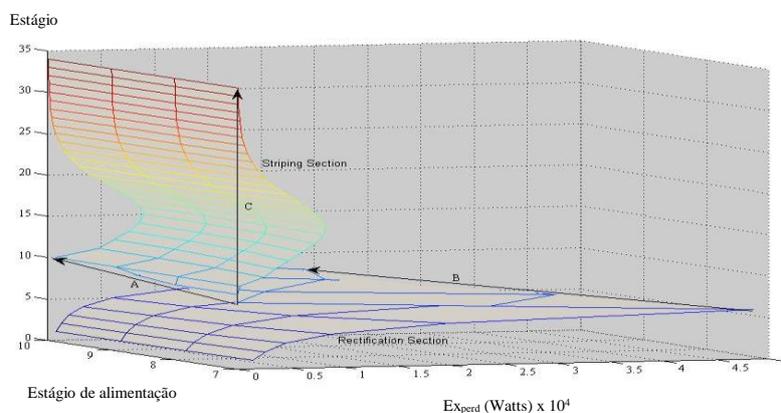
## RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 5.1 Simulação do sistema de destilação original

Em um primeiro momento após a simulação do sistema original no simulador *Aspen Plus*, determinou-se o perfil de perdas de *exergia* e as demais variáveis de análise para ambas as colunas de destilação, para posteriormente compararmos com os resultados do sistema otimizado. Os relatórios destas simulações estão apresentados nos anexos A.1 a B.4. Em função do esquema de *retrofit* proposto, os resultados das análises realizadas serão apresentados seguindo a mesma ordem, primeiro para a zona funcional 1 e posteriormente para a zona funcional 2. Após a simulação individual das colunas AA1D e B1B, os resultados apresentados a seguir foram obtidos.

### 5.2 Estágio de alimentação da zona funcional 1

Para o estágio de alimentação da primeira coluna, variou-se seu intervalo de alimentação entre os estágios 7 a 10 da coluna, pois são os estágios cabíveis de serem alimentados na coluna na qual a corrente é alimentada (coluna A1), que possui um total de 4 estágios. Na Figura 5.1, a seta A indica a variação do estágio de alimentação, a seta B indica que as perdas de *exergia* se reduzem significativamente na seção de retificação e a seta C indica que o comportamento do perfil quase não se altera ao longo da seção de exaustão.

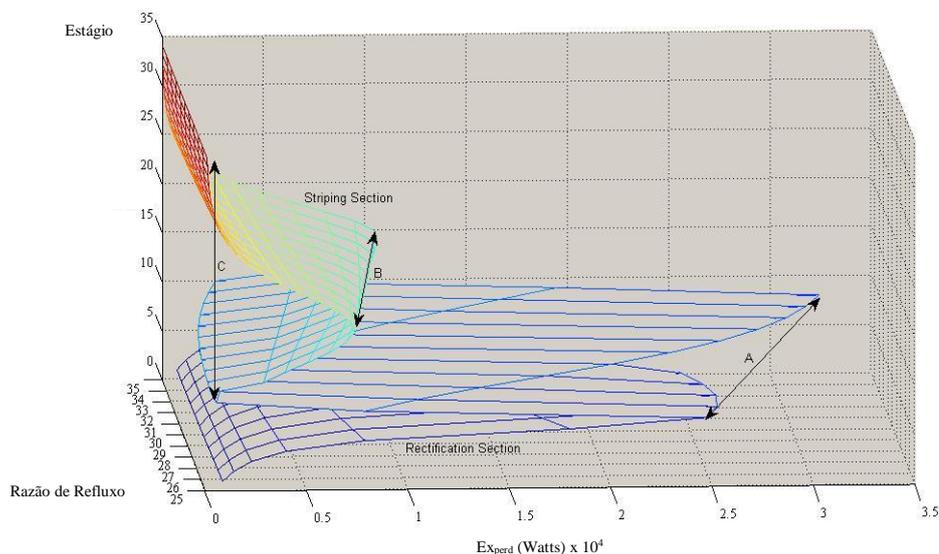


**Figura 5.1:** Variação do perfil de perdas de *exergia* de acordo com o estágio de alimentação na coluna AA1D.

Foi possível observar que a quantidade de conteúdo *exergético* perdido da coluna diminuiu conforme a alimentação variou para os estágios abaixo do estágio 7, aumentando a eficiência termodinâmica da coluna, portanto deste ponto em diante optou-se por variar os demais parâmetros mantendo-se a alimentação da coluna no estágio 10.

### 5.3 Razão de refluxo da zona funcional 1

Em seguida variou-se a razão de refluxo da coluna em seu intervalo possível de ser trabalhado para o sistema real de forma a atender as especificações do processo em relação as concentrações de etanol nas correntes de PFD e Flegma que saem da primeira coluna, onde a razão de refluxo da coluna AA1D é de uma razão de refluxo mínima  $L/D = 25$  e uma razão de refluxo máxima de  $L/D = 35$ , pois valores fora deste intervalo não seriam capazes de produzir uma corrente de Flegma com concentração entre 36 e 39% e uma corrente de PFD com concentração de etanol entre 39 e 40%. Estes resultados mostram que a razão de refluxo relaciona-se quase linearmente com a perda total de *exergia* da coluna e os perfis de perdas de *exergia* indicam que a *exergia* perdida se reduz em todas as regiões da coluna de acordo com as setas A, B e C na Figura 5.2.



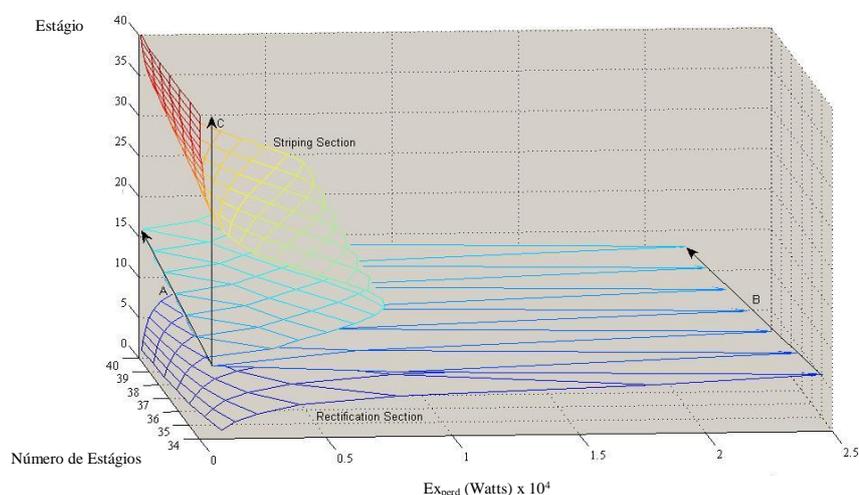
**Figura 5.2:** Variação do perfil de perdas de *exergia* de acordo com a razão de refluxo da coluna AA1D.

Estes resultados nos mostram que a razão de refluxo se relaciona de maneira linear com a perda de *exergia* total da coluna, desde que mantido constante o número de

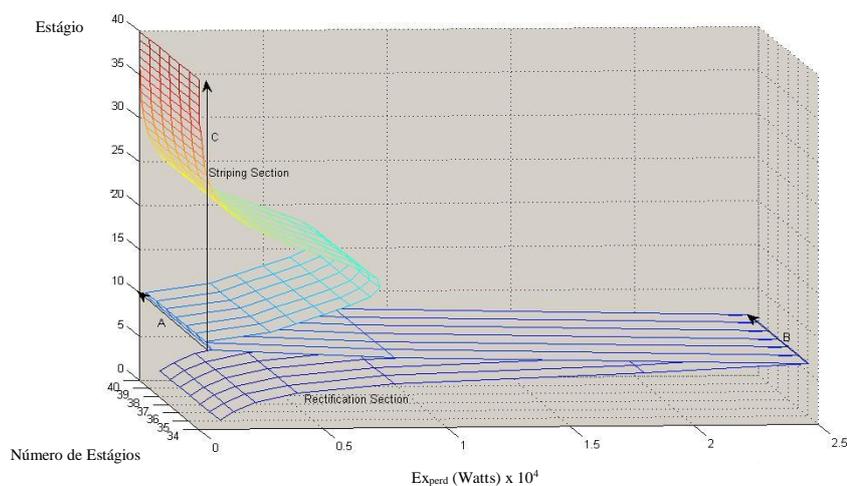
estágios da coluna. No entanto, falta-nos no seguinte tópico avaliar separadamente a influência do número de estágios na perda de *exergia* total da coluna.

#### 5.4 Número de estágios da zona funcional 1

Para analisar a influência do número de estágios da coluna na perda de *exergia* total da coluna, variou-se o número de estágios da coluna desde seu valor no sistema original (34 estágios) até 40 estágios, onde posteriormente percebemos que este número é suficiente para a análise econômica. Decidiu-se incrementar o estágio e mambas as seções da coluna, retificação e exaustão, para se observar e comparar o fato de que a região da coluna que recebe o estágio deve ser levada em consideração.

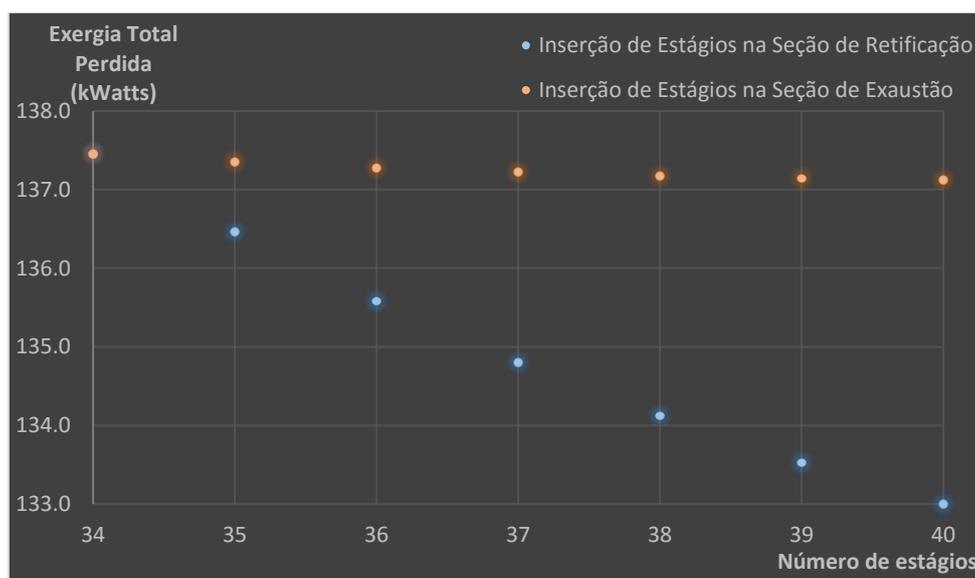


**Figura 5.3:** Variação do perfil de perdas de *exergia* de acordo com a inserção de estágios na seção de retificação da coluna AA1D.



**Figura 5.4:** Variação do perfil de perdas de *exergia* de acordo com a inserção de estágios na seção de exaustão da coluna AA1D.

Como esperado, foi verificado nas Figuras 5.3 e 5.4 que a entrada de novos estágios na coluna pode significativamente reduzir ou não a perda total de *exergia* da coluna, dependendo onde o estágio é inserido. Em ambas as figuras, a seta A indica a variação do número de estágios e as setas B e C mostram que houve redução de perdas de *exergia* apenas quando os estágios foram inseridos na seção de retificação da coluna, onde as maiores perdas ocorreram, porque a seção de exaustão permaneceu praticamente inalterada, a não ser por um efeito mínimo causada pelas correntes alteradas na seção.



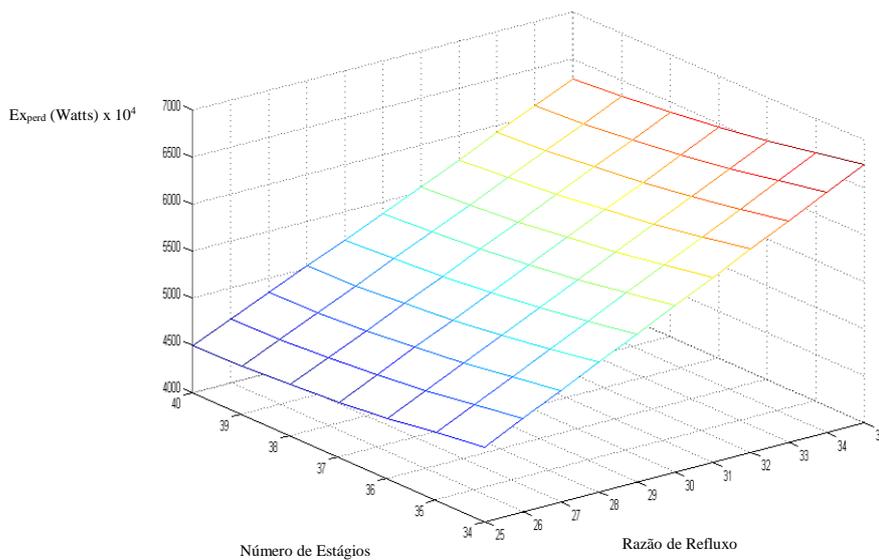
**Figura 5.5:** Variação da perda total de *exergia* de acordo com a inserção de estágios em ambas as seções da coluna AA1D.

Verificou-se então na Figura 5.5 a existência de uma relação não linear entre o número de estágios da coluna e a quantidade de *exergia* total perdida no interior da coluna. Como esperado, vemos que a medida que acrescentamos estágios na coluna a *exergia* perdida diminui e a eficiência da coluna aumenta, porém em percentuais cada vez menores em relação a redução ocasionada pelo acréscimo do estágio anterior. Em outras palavras, colunas com um maior número de estágios apresentam uma maior eficiência termodinâmica em separação e em aproveitamento energético.

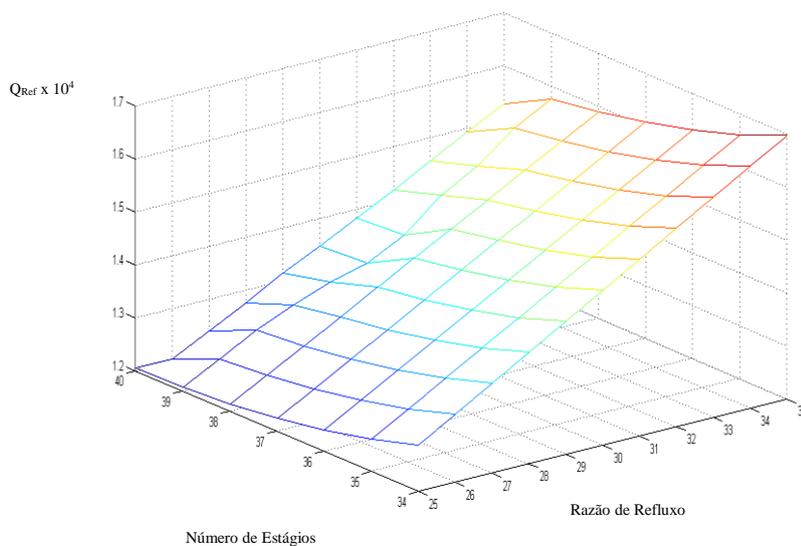
### 5.5 Análise paramétrica da coluna AA1D

Após ser observado a influência da razão de refluxo e do número de estágios sobre a perda de *exergia* total da primeira coluna, realizou-se um estudo paramétrico

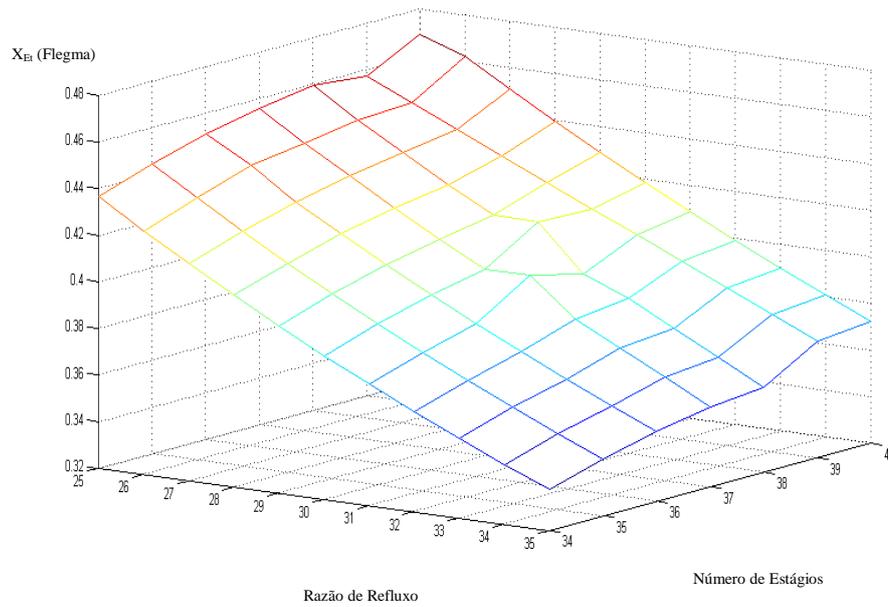
variando-se ambas estas variáveis sobre seus limites já especificados e especificando-se como variáveis respostas as variáveis que influenciarão diretamente na análise *exergoeconômica* do modelo proposto: *exergia* total perdida, carga térmica do refeedor e frações mássicas de etanol nas correntes de saída da coluna AA1D. Os resultados destas simulações estão apresentados nos anexos C.1 a C.4 e a representação tridimensional destas variáveis são ilustradas nas Figuras 5.6 à 5.9.



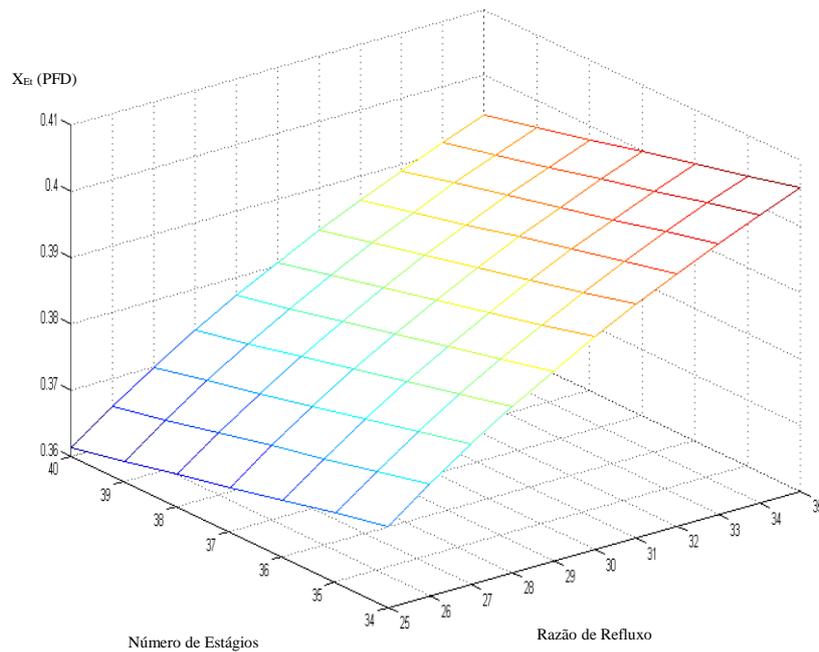
**Figura 5.6:** Resultados da análise paramétrica para determinação da *exergia* total perdida da coluna AA1D em função da razão de refluxo e do número de estágios.



**Figura 5.7:** Resultados da análise paramétrica para determinação da carga térmica do refeedor da coluna AA1D em função da razão de refluxo e do número de estágios.



**Figura 5.8:** Resultados da análise paramétrica para fração mássica de etanol na corrente de Flegma da coluna AA1D em função da razão de refluxo e do número de estágios.



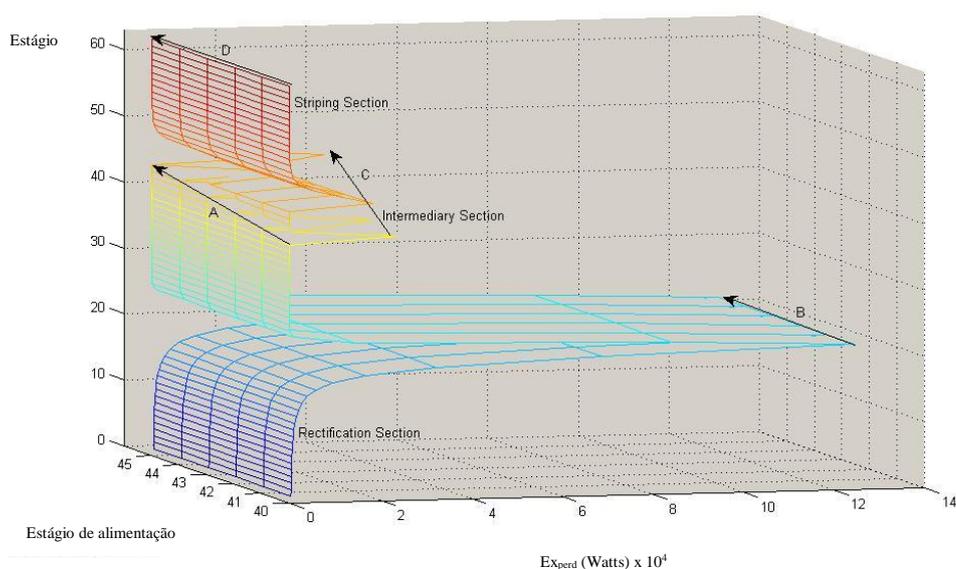
**Figura 5.9:** Resultados da análise paramétrica para determinação da fração mássica de etanol na corrente PFD da coluna AA1D em função da razão de refluxo e do número de estágios.

### 5.6 Estágio de alimentação da corrente PFD na zona funcional 2

As mesmas análises foram realizadas para a segunda coluna (coluna B1B), porém com a variação nas duas correntes de alimentação contidas nesta coluna. Decidiu-se variar cada uma das correntes mantendo-se a outra alimentação constante para avaliar o comportamento do perfil de perdas de *exergia* e a partir dos resultados apresentados escolher a melhor combinação entre elas para seguir com a avaliação econômica do trabalho.

Para o estágio de alimentação da corrente PFD na segunda coluna, variou-se seu intervalo de alimentação entre os estágios 40 a 45 da coluna, pois foram observadas em simulações anteriores que alimentando-se acima do estágio do sistema original (estágio 40) a perda de *exergia* total da coluna aumentaria e variando a alimentação na direção da exaustão a coluna B possui um total de 45 estágios.

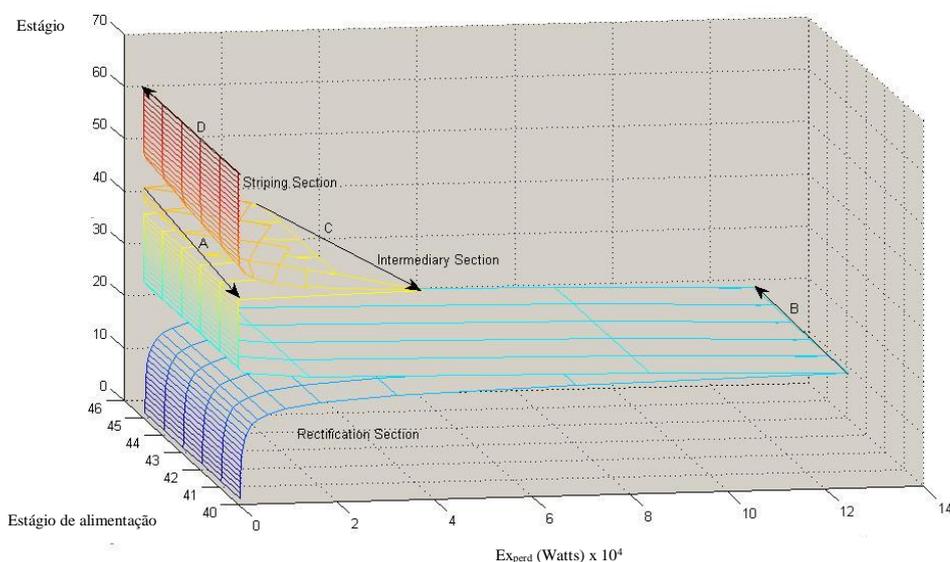
É possível observar na Figura 5.10 que a quantidade de conteúdo *exergético* perdido da coluna diminuiu conforme a alimentação variou para os estágios abaixo do estágio 40, aumentando a eficiência termodinâmica da coluna, portanto deste ponto em diante optou-se por variar os demais parâmetros mantendo-se a alimentação da coluna no estágio 45. A seta A representa a variação do estágio de alimentação, a seta B indica a perda de *exergia* na seção de retificação, a seta C indica o mesmo, porém na seção intermediária e a seta D na seção de exaustão.



**Figura 5.10:** Variação do perfil de perdas de *exergia* em função da variação do estágio de alimentação da corrente PFD na coluna B1B.

### 5.7 Estágio de Alimentação da corrente de Flegma na zona funcional 2

Para o estágio de alimentação da corrente de Flegma na segunda coluna, variou-se seu intervalo de alimentação entre os estágios 40 a 45 da coluna, pois foram observadas em simulações prévias que alimentando-se acima do estágio do sistema original (estágio 45) a perda de *exergia* total da coluna seria maior e seguindo na direção da exaustão da coluna B a corrente de Flegma já é alimentada no último estágio. Tais observações são constatadas na representação feita pela Figura 5.11. A seta A representa a variação do estágio de alimentação, a seta B indica a perda de *exergia* na seção de retificação, a seta C indica o mesmo, porém na seção intermediária e a seta D na seção de exaustão.

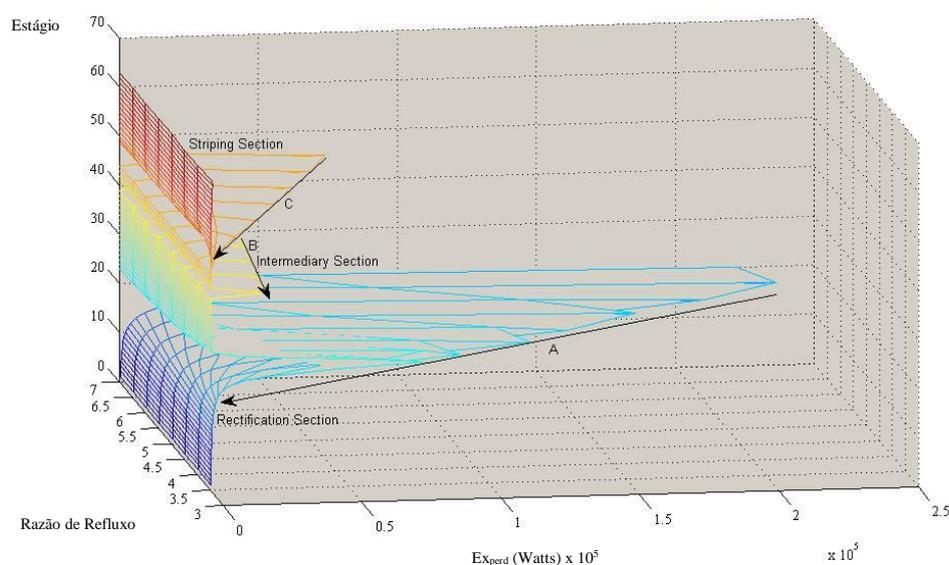


**Figura 5.11:** Variação do perfil de perdas de *exergia* em função da variação do estágio de alimentação da corrente Flegma na coluna B1B.

Foi possível observar que a quantidade de conteúdo *exergético* perdido da coluna aumentou conforme a alimentação foi variada para os estágios abaixo do estágio 40, aumentando a eficiência termodinâmica da coluna, portanto deste ponto em diante optou-se por variar os demais parâmetros mantendo-se a alimentação da coluna no estágio 45.

### 5.8 Razão de Refluxo da zona funcional 2

Em seguida variou-se a razão de refluxo da coluna B1B em seu intervalo possível de ser trabalhado para o sistema real de forma a atender a especificação do processo em relação a concentração de etanol na corrente de etanol hidratado que sai da coluna, onde a razão de refluxo mínima da coluna B1B é de uma razão de refluxo mínima  $L/D = 3,5$  e uma razão de refluxo máxima de  $L/D = 7$ , pois valores fora deste intervalo não seriam capazes de produzir uma corrente de etanol hidratado com concentração mínima de 92,8% em massa de etanol e também não seriam capazes de alcançar uma concentração maior do que a concentração do azeótropo formado nestas condições, aproximadamente 95% em massa de etanol. Os resultados desta análise estão apresentados na Figura 5.12. As setas A, B e C indicam que houve redução das perdas de *exergia* em todas as seções da coluna.

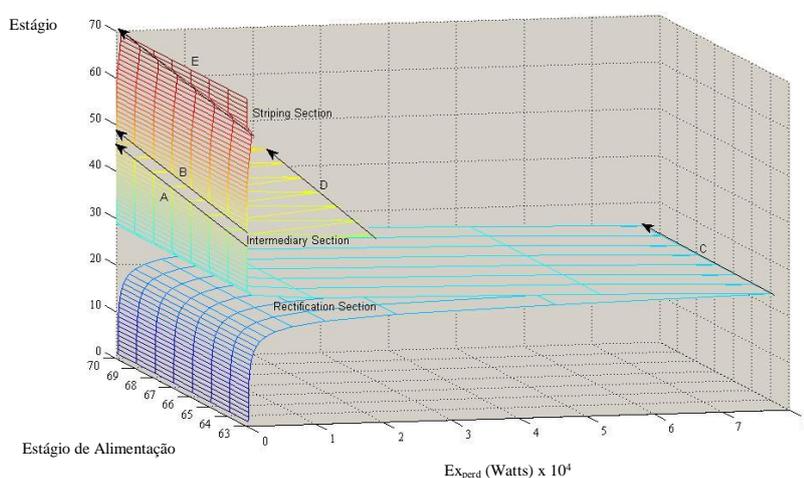


**Figura 5.42:** Variação do perfil de perdas de *exergia* em função da razão de refluxo na coluna B1B.

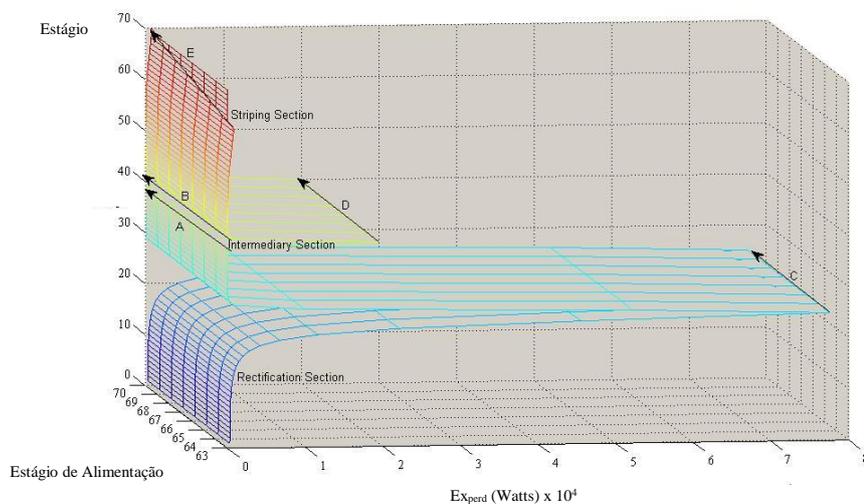
Estes resultados nos mostram que a razão de refluxo se relaciona de maneira praticamente linear com a perda de *exergia* total da coluna B1B, desde que mantido constante seu número de estágios.

### 5.9 Número de estágios da zona funcional 2

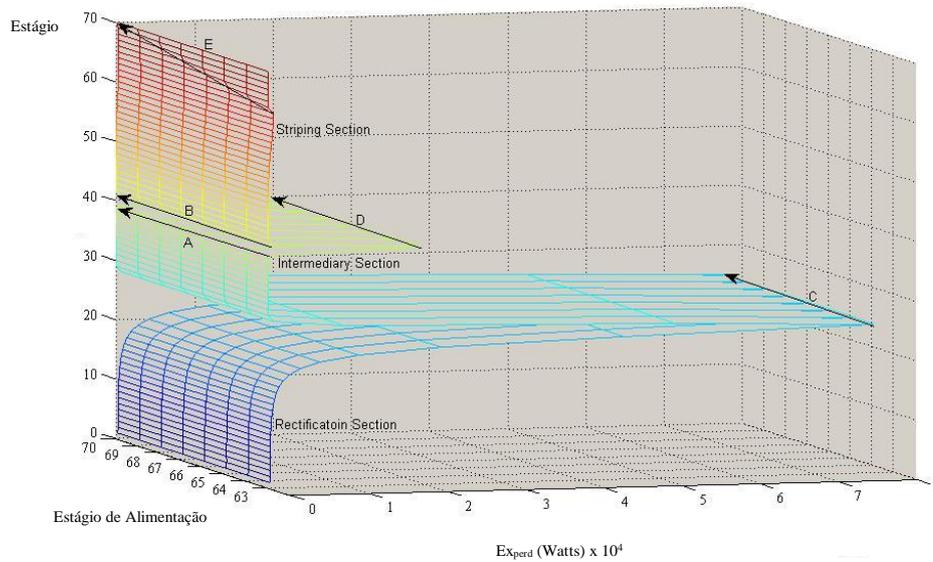
Por fim, analisando-se a influência do número de estágios da coluna na perda de *exergia* total da coluna B1B, variou-se o número de estágios da coluna desde seu valor no sistema original (63 estágios) adotando-se o mesmo critério utilizado para a avaliação deste efeito na primeira coluna simulada. Decidiu-se realizar o acréscimo dos estágios na coluna B, devido ao fato de ser a região da coluna onde ocorrem as maiores perdas de *exergia* segundo os resultados apresentados no resultado de sua simulação apresentados no anexos B.1 a B.4. Foi verificado nas Figuras 5.13, 5.14 e 5.15 que a inserção de novos estágios na coluna podem manter ou ainda aumentar a perda total de *exergia* da coluna, dependendo da região onde for inserido.



**Figura 5.53:** Variação do perfil de perdas de *exergia* de acordo com a inserção de estágios na seção de retificação da coluna B1B.

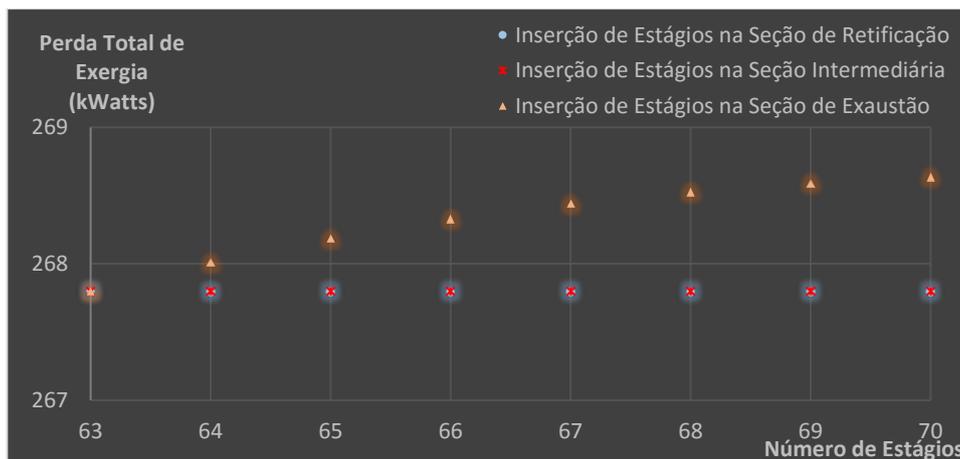


**Figura 5.64:** Variação do perfil de perdas de *exergia* de acordo com a inserção de estágios na seção intermediária da coluna B1B.



**Figura 5.75:** Análise da variação da *exergia* total perdida da coluna B1B com o número de estágios da coluna.

Em todas as figuras, as setas A e B indicam o estágio de alimentação que dividem as regiões da coluna, a seta C indica a variação da perda de *exergia* na seção de retificação, a seta D indica a variação da *exergia* perdida na seção de exaustão e a seta E indica a variação causada pela inserção es estágios na coluna. Inserindo estágios nas seções de retificação e intermediária, a *exergia* total perdida permanece inalterada, no entanto com a inserção de estágios na seção de exaustão a *exergia* total perdida é aumentada de forma ineficaz, como mostrado na Figura 5.16.



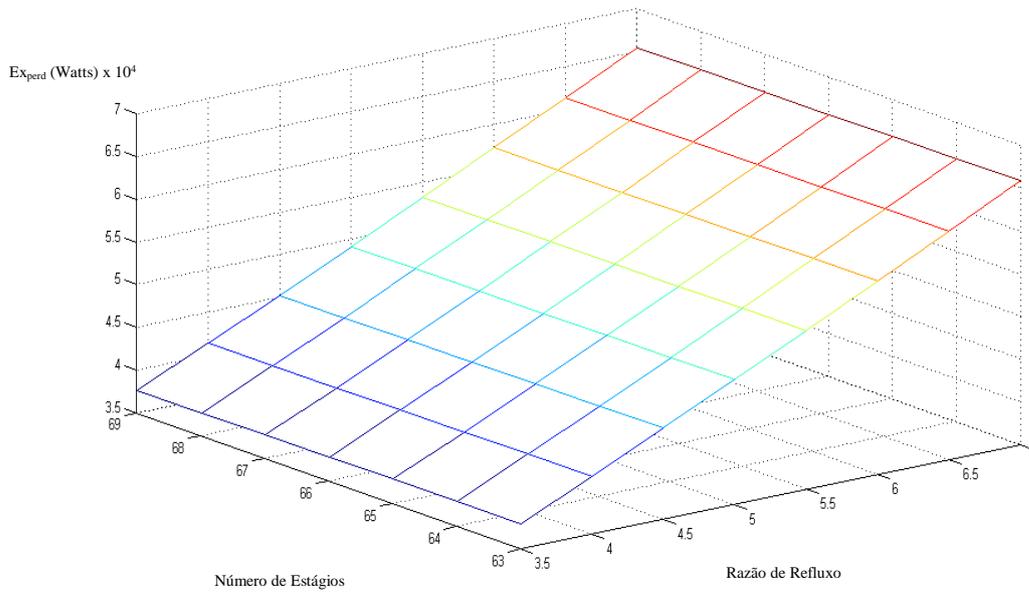
**Figura 5.86:** Análise da variação da *exergia* total perdida da coluna B1B com a inserção de estágios em ambas as regiões da coluna.

Verificou-se então a existência de uma praticamente linear e de pouca variação entre o número de estágios da coluna e a quantidade de *exergia* total perdida no interior da coluna. Como esperado, vemos que a medida que acrescentamos estágios na coluna a *exergia* perdida diminui e a eficiência da coluna aumenta para uma mesma produção de etanol, porém em percentuais cada vez menores em relação a redução ocasionada pelo acréscimo do estágio anterior. Em outras palavras, colunas com um maior número de estágios apresentam uma maior eficiência termodinâmica em separação e em aproveitamento energético.

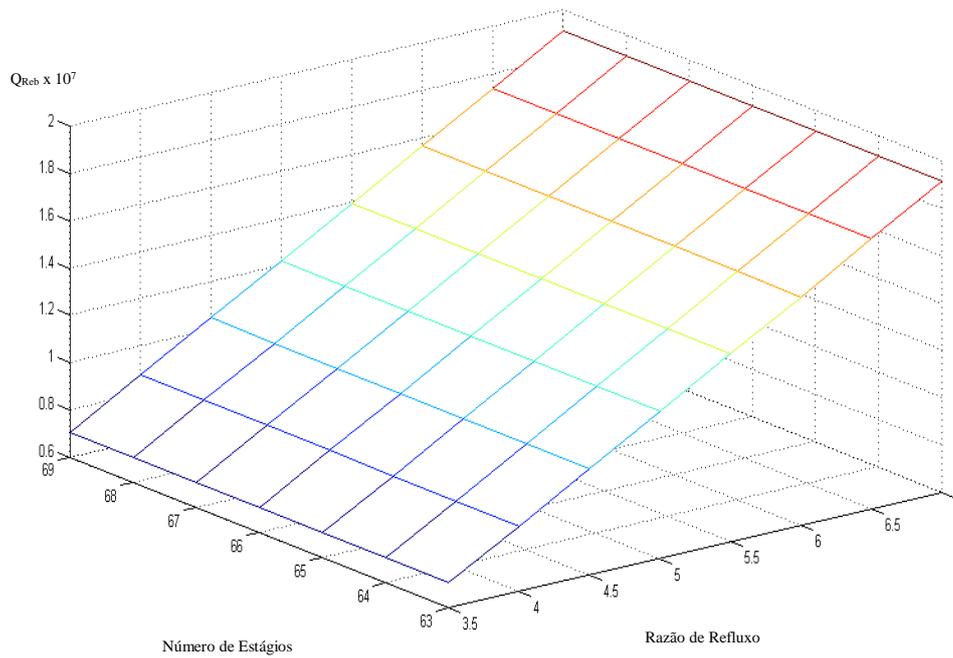
As mesmas análises realizadas para o aumento no número de estágios da coluna AA1D podem ser neste ponto consideradas.

### **5.10 Análise paramétrica da coluna B1B**

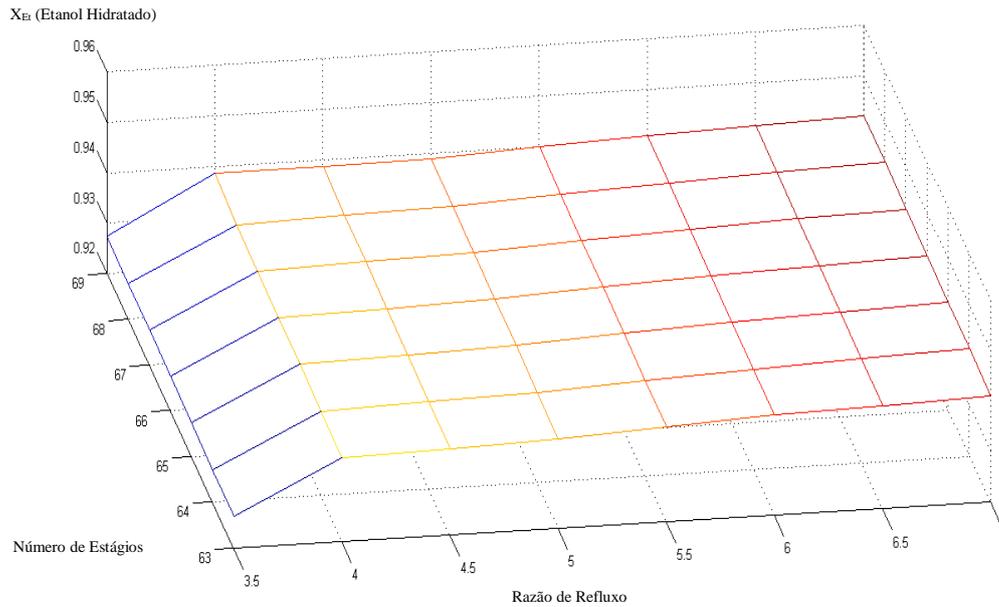
Após ser observado a influência da razão de refluxo e do número de estágios sobre a perda de *exergia* total da primeira coluna, realizou-se um estudo paramétrico variando-se ambas estas variáveis sobre seus limites já especificados e especificando-se como variáveis respostas as variáveis que influenciarão diretamente na análise *exergoeconômica* do modelo proposto: *exergia* total perdida no interior da coluna, carga térmica do refulvedor, fração mássica de etanol na corrente de etanol hidratado e quantidade de etanol hidratado produzida na corrente de destilado desta coluna. Os resultados destas simulações estão apresentados nos anexos D.1 a D.4 e a representação tridimensional das variáveis nas Figuras 5.17 à 5.20.



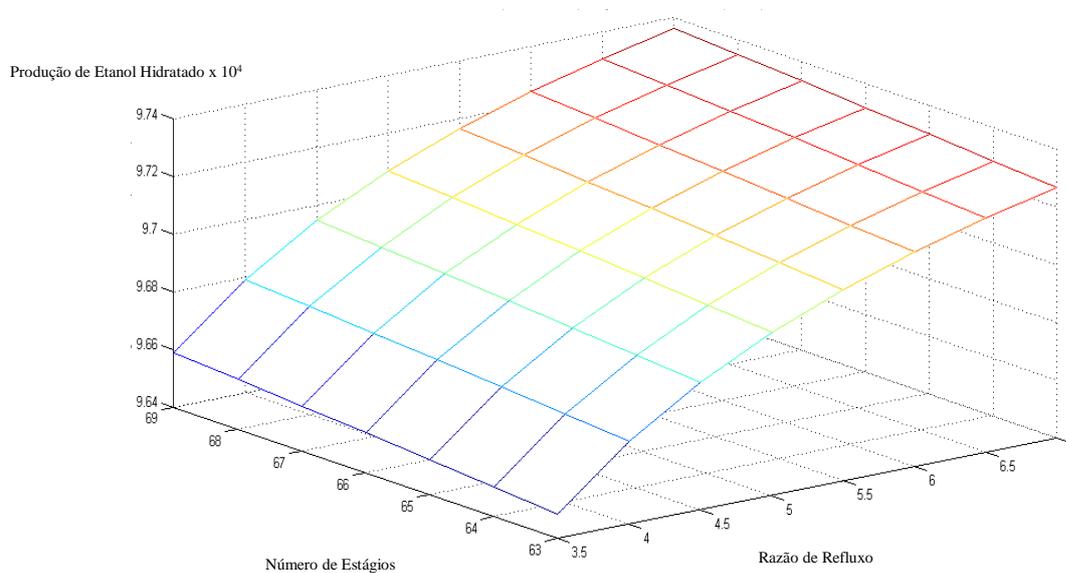
**Figura 5.97:** Resultados da análise paramétrica para determinação da *exergia* total perdida da coluna B1B em função da razão de refluxo e do número de estágios.



**Figura 5.108:** Resultados da análise paramétrica da carga térmica requerida pelo refeedor da coluna B1B em função da razão de refluxo e do número de estágios.



**Figura 5.119:** Resultados da análise paramétrica da fração mássica de etanol na corrente de etanol hidratado produzida na coluna B1B em função da razão de refluxo e do número de estágios da coluna.



**Figura 5.20:** Resultados da análise paramétrica para produção de etanol da coluna B1B em função da razão de refluxo e do número de estágios.

Os resultados até aqui apresentados mostram que os modelos utilizados para análise *exergética* permitem obter informações consistentes da quantidade de exergia perdida para as condições operacionais das simulações realizadas. A aplicação do

modelo de *retrofit* proposto permitiu-nos procurar condições operacionais otimizadas para a coluna de destilação, que visa minimizar a perda de exergia em cada etapa de separação e torna-la mais eficiente termodinamicamente.

No entanto, cabe-se agora discutir até que ponto é viável do ponto de vista econômico operar em uma destilaria com uma coluna de destilação maior, obtendo-se uma melhor eficiência termodinâmica e um menor consumo de utilidades no processo, porém sob a aplicação de investimento maior para a implantação desta coluna.

Como dito no início do trabalho, o objetivo da análise econômica neste estudo coube avaliar esta questão e propor um modelo que relacione as variáveis de custo de projeto e manutenção da coluna de destilação e determine qual a escolha ótima para melhor rentabilidade econômica do processo.

### 5.11 Avaliação Econômica do Sistema de Destilação

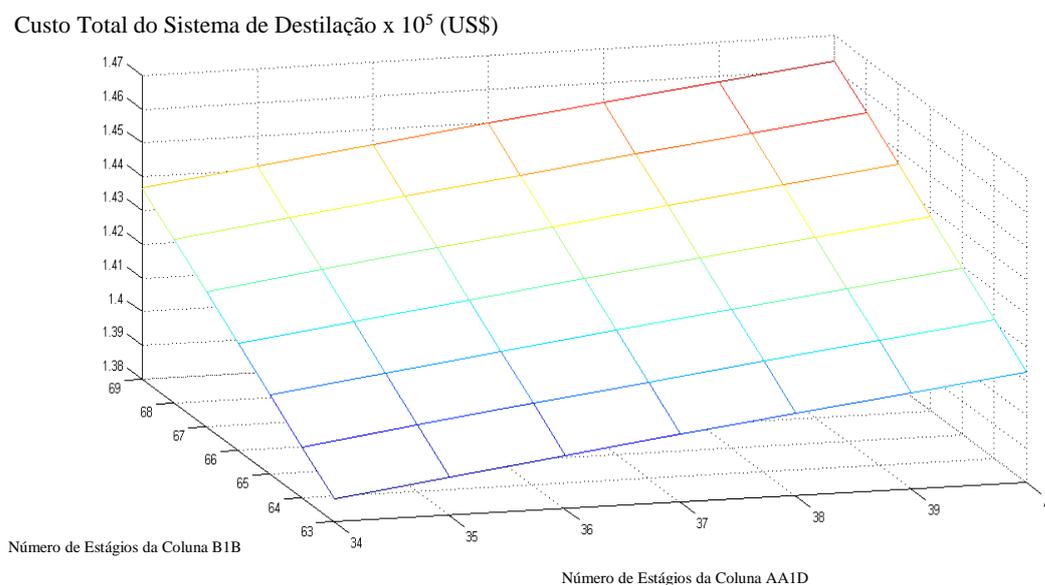
Após esta análise dos resultados da parte de avaliação *exergética* das colunas, podemos concluir as condições melhoradas e otimizadas de operação e projeto para ambos os sistemas de estudo, pois colunas maiores que possuem um maior número de estágios certamente terão uma menor perda de *exergia*, porém dispenderão de um maior custo de investimento para implantação destas colunas. No entanto, para avaliação do novo sistema proposto deve-se por meio da metodologia proposta avaliar economicamente cada um dos sistemas (o sistema original e o sistema otimizado). Por meio das equações apresentadas no capítulo 4, pode-se determinar o custo total de cada uma das colunas do sistema original. Tais valores são apresentados na Tabela 5.1.

**Tabela 5.1:** Custo total (CTE) de cada uma das colunas do sistema original.

Parâmetro	Coluna D (\$)	Coluna A1 (\$)	Coluna A (\$)	Coluna B (\$)	Coluna B1 (\$)
CTE (\$)	3090,01	7411,97	52767,61	51406,84	24010,18
Cs (\$)	2744,24	6270,88	41404,12	37953,78	19268,90
Ct (\$)	345,77	1141,09	11363,48	13453,07	4741,27
Cso (\$)	5215,95	5215,95	5215,95	5215,95	5215,95
Cto (\$)	598,01	481,73	431,89	598,01	481,73
d (m)	1,5	3	3,6	3,3	3,3
H (m)	1,7	2	16	16	7
Custo AA1D (%)	4,9	11,7	83,4	0	0
Custo B1B (%)	0	0	0	68,2	31,8

Determinado o custo de cada uma das colunas, coube avaliar o custo de cada uma das possíveis configurações para o sistema em função das condições operacionais avaliadas e correlacionar tais valores com as demais variáveis estudadas nas análises paramétricas realizadas anteriormente, buscando a melhor solução capaz de perder a menor quantia de *exergia* possível no processo de destilação como um todo e produzir a maior quantidade de etanol hidratado possível dentro das especificações do processo. A Figura 5.21 ilustra a análise paramétrica do custo total do sistema de destilação industrial em função do número de estágios das colunas AA1D e B1B.

A solução ótima encontrada pelo Matlab® para um sistema capaz de produzir etanol sob as condições especificadas pelo processo e seu custo de investimento estão apresentadas a seguir nas tabelas 5.2 e 5.3.



**Figura 5.21:** Resultados da análise paramétrica do custo total do sistema de destilação industrial em função do número de estágios das colunas AA1D e B1B.

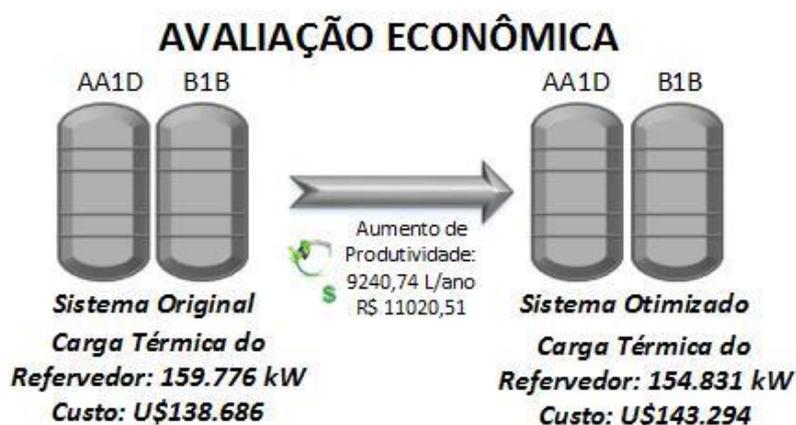
**Tabela 5.2:** Comparação entre as variáveis de decisão do sistema original e do sistema otimizado da coluna AA1D

Variável de decisão	Coluna original	Coluna otimizada
R	30	30
N	34	35
Q <sub>ref</sub> (kW)	149265	146070
$\dot{m}_{\text{para coluna B1B}} \left( \frac{\text{Ton}}{\text{ano}} \right)$	279370	279371
Custo Total da Coluna (\$)	63269,59	63721,81 (>1%)

**Tabela 5.3:** Comparação entre as variáveis de decisão do sistema original e do sistema otimizado da Coluna B1B

Variável de decisão	Coluna original	Coluna otimizada
R	4,5	4
N	63	69
$Q_{ref}$ (kW)	10511,86	8761,06
$\dot{m}_{Etanol\ Hid.}$ ( $\frac{Ton}{ano}$ )	96843,20	96931,22
Custo Total da Coluna (\$)	75417,02	79572,19 (>5,5%)

Comparando o custo de ambos os sistemas, chegamos à conclusão que o sistema otimizado proposto é mais caro em termos de seu investimento para ser implantado, porém sua economia em consumo energético deve ser suficiente para pagar o investimento realizado em pouco menos de 2 anos após sua implantação como veremos a seguir. Percebe-se isto não somente devido ao fato da economia de vapor gerada, o qual possui um custo significativo para a indústria, pois o custo do vapor como combustível deste processo já deve ser pago pelo lucro gerado com as vendas de etanol hidratado, mas também devido ao aumento da produtividade de etanol hidratado com um sistema capaz de realizar a sua produção com uma menor razão de refluxo na coluna B, o que proporciona uma maior taxa de saída do produto, como indica a Figura 5.22.

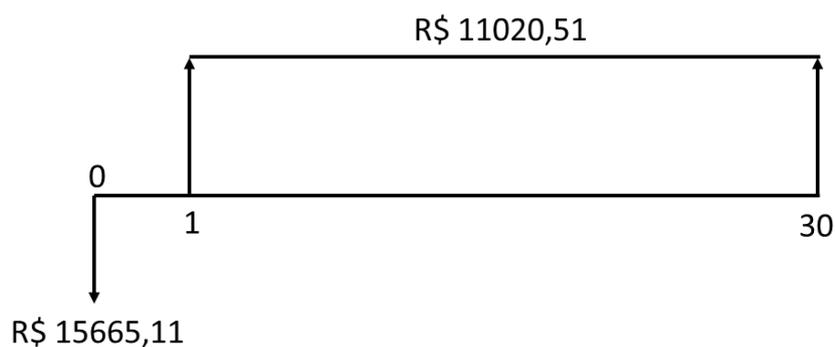


**Figura 5.22:** Comparativos de custos de projeto entre o sistema original e o sistema otimizado do sistema de destilação.

É economicamente viável alterar as condições de operação do sistema. Para as novas plantas de produção de álcool hidratado, em particular, seria mais vantajoso comprar uma coluna maior, dependendo das condições de investimento e *pay-back*.

Para efeitos de investigar uma situação prática, consideraremos uma TMA de 10% para as colunas de destilação como apontado em Ghazi et al. (2012) e um período  $n$  de 30 anos como a vida útil das colunas de destilação, foram feitos os cálculos dos métodos de tomada de decisão de investimento apresentados no capítulo 2 (*pay-back*, VPL, VAUE e TIR).

Primeiramente fez-se o fluxo de caixa considerando as despesas com a implantação da coluna otimizada e as receitas anuais obtidas com a utilização desta. As despesas foram obtidas através da diferença do custo de implantação do sistema de colunas otimizado para o custo do sistema original. As receitas, por sua vez, foram obtidas pela diferença da quantidade de etanol produzido através da utilização de cada um dos sistemas. Após a obtenção desses dados chegou-se ao fluxo de caixa mostrado na Figura 5.23.



**Figura 5.23:** Fluxo de caixa do investimento das colunas otimizadas.

Na Figura 5.23 a seta para baixo representa o investimento inicial feito (período 0) e a seta para cima indica as receitas obtidas com a implantação do sistema otimizado. A linha unindo as duas setas para cima representa que o ganho é uniforme ao longo do período considerado de 30 anos (ano 1 ao ano 30).

Para a obtenção do valor das despesas, foi considerado um custo de implantação do sistema de colunas original de U\$ 13886,61 e do sistema otimizado de U\$ 143293,99.

A diferença entre esses dois valores foi de U\$ 4607,39 que através da utilização de uma taxa de câmbio média em 2015 de aproximadamente R\$ 3,40 (BOVESPA) resultou em uma diferença total de R\$ 15665,11, utilizada no fluxo de caixa como investimento.

A obtenção da receita foi feita considerando uma produção de etanol de 96843 ton/ano com a utilização do sistema original e uma produção de 96850 ton/ano com a

---

utilização do sistema otimizado. A diferença entre esses dois valores foi de 7,39259 ton/ano que representa 7392,59 kg/ano. A partir desse valor pode-se determinar a quantidade de etanol produzido em litros com o uso da densidade do etanol hidratado = 0,8 kg/L (ANP), o que corresponde a um aumento na produtividade de etanol hidratado em 9240,74 L/ano. Esse valor pode ser convertido em termos financeiros com a multiplicação deste pelo valor de venda médio do litro de etanol em 2015 (CONAB) de R\$1,1926. Após a realização dos cálculos obtém-se o valor de R\$11020,51/ano que corresponde ao ganho anual com a utilização do sistema de colunas otimizado e é um valor aceitável para o sistema estudado em função de um rápido *pay-back*.

O cálculo do *pay-back* é mostrado no Anexo G.1, nele pode-se observar que em um prazo de 2 anos o saldo a recuperar passa a ser positivo. O cálculo do VPL, por sua vez, forneceu um valor de R\$ 88224,29. O VAUE foi de 9358,77 e a TIR foi de 70,35%. Valores que nos levam a algumas das conclusões apresentadas no capítulo a seguir.

## CAPÍTULO 6

### CONCLUSÕES

Ao término deste trabalho, podemos concluir que para sistemas nos quais se deseja uma concentração específica de etanol, como é o caso da planta de produção de álcool hidratado, a complexidade do sistema de colunas aumenta, sendo muitas vezes necessário um encadeamento de colunas. Esse encadeamento pode levar a um alto número de colunas presentes no sistema, tornando inviável qualquer tipo de estudo diretamente na planta de produção, e fazendo com que a simulação do processo se torne uma ferramenta altamente útil e eficaz. Os resultados obtidos com a simulação da planta de produção de álcool hidratado, comparados com os resultados obtidos por MARQUINI (2007), nos levaram a concluir que o simulador *Aspen Plus* conseguiu reproduzir com boa confiabilidade o processo em questão, inclusive na determinação da quantidade de *exergia* perdida no interior das colunas do sistema de destilação e na construção de perfis de análise da *exergia* perdida estágio a estágio de forma consistente.

O mesmo trabalho da autora citada no parágrafo acima, serviu para o desenvolvimento do estudo da otimização do processo. Foi possível concluir que quase apenas algumas das variáveis estudadas estavam em seu ponto ótimo, indicando que o processo de destilação alcoólica está em um nível de conhecimento a ser trabalhado e evoluído, não sendo necessariamente serem grandes os ajustes para um melhoramento do processo. Concluindo, podemos dizer que o simulador *Aspen Plus* cumpriu muito bem seu papel mostrando-se uma ferramenta confiável para o estudo do processo de destilação aplicada à produção de álcool hidratado carburante.

Muita dessa confiabilidade mostrada nas simulações é oriunda de um vasto banco de dados contendo informações sobre parâmetros de interesse no processo de produção de álcool, além de uma fiel reprodução do sistema encontrado na indústria.

Como proposto na introdução do trabalho podemos afirmar que a análise *exérgica* é uma ferramenta útil, porém quando utilizada isoladamente proporciona apenas o direcionamento do quanto a operação ou processo pode ser melhorado do ponto de vista da termodinâmica. Este fato é uma limitação, pois não se pode afirmar que um processo otimizado *exergeticamente* é vantajoso do ponto de vista econômico,

sendo necessária a realização de uma análise econômica capaz de verificar se o processo termodinamicamente otimizado é viável financeiramente.

A análise *exergética* permitiu a otimização termodinâmica do processo, reduzindo a quantidade de *exergia* perdida nos estágios da coluna em 1,6% e também a carga térmica total de utilidade quente necessária para operar o sistema de destilação em aproximadamente 3,0%. Além disso, foi capaz de aumentar em aproximadamente 7,4 toneladas por ano a produção de etanol hidratado, quantidade que quando traduzida em termos econômicos demonstra a viabilidade da instalação da coluna otimizada considerando uma vida útil de 30 anos para o sistema.

O sistema de destilação industrial para produção de etanol hidratado foi simulado e otimizado por meio da análise paramétrica de diversas variáveis de decisão apresentadas capazes de influenciar diretamente na análise *exergoeconômica*. As variáveis de primeira ordem baseadas na análise de sensibilidade escolhidas para otimização foram o estágio de alimentação, a razão de refluxo e o número de estágios das colunas, capazes de gerar conclusões a respeito do comportamento das perdas de *exergia* de forma equivalente à de trabalhos anteriores que investigaram sua influência no processo.

A modelagem e otimização *exergoeconômica* de uma coluna de destilação de etanol hidratado foi realizada e um modelo baseado nas equações MESH, análise de *exergia* e análise econômica foi possível de ser aplicado ao caso em estudo.

No sistema de colunas otimizado, a razão de refluxo da coluna AA1D continuou sendo a mesma do sistema original e a razão de refluxo da coluna B1B se reduziu de 4,5 para 4. A primeira coluna aumentou seu tamanho em apenas 1 estágio, enquanto a segunda foi acrescida de 5 estágios.

A carga térmica total dos refeedores no sistema otimizado se reduziu de 159766 kW para 154831 kW e a perda de *exergia* do sistema passou de 5814,57 kW para 5715,98 kW;

O modelo econômico do sistema é desenvolvido tendo como base os métodos *pay-back*, VPL, VAUE e TIR. O custo total de cada coluna do sistema foi determinado e as equações *exergoeconômicas* do sistema foram demonstradas. Apesar do processo otimizado possuir um custo de investimento maior que o processo original, a implantação do processo é perfeitamente viável. Tal viabilidade foi verificada por meio da aplicação dos seguintes métodos de análise de viabilidade econômica: *pay-back*, VPL, VAUE e TIR. O *pay-back* mostrou que o investimento na coluna otimizada se

---

paga em dois anos. O valor apresentado pelo VPL mostra que a instalação da coluna otimizada é viável para a usina. O VAUE indica que o capital investido rende 10% (referentes a TMA observada) de retorno ao ano, mais um saldo líquido anual de R\$ 9358,77. O último método utilizado para análise é a TIR, que por apresentar um valor maior que a TMA, demonstra a viabilidade econômica do investimento no sistema de colunas otimizadas.

Pode-se então concluir que o projeto apresenta ganhos tanto em termos de *exergia* quanto em termos econômicos, sendo uma alternativa cabível para implantação em novas usinas de bioetanol.

A metodologia proposta por este trabalho para otimização *exergoeconômica* apresenta ao engenheiro responsável pela modelagem do sistema a opção de se utilizar das vantagens da análise *exergética* e econômica. Esse método pode ser utilizado para otimizar a colunas de destilação de sistemas simples até sistemas mais complicados, tais aqueles com refeedores e condensadores intermediários à coluna.

---

### SUGESTÕES PARA COMPLEMENTAÇÃO DO TRABALHO

- Elaboração de um algoritmo com a metodologia de otimização *exergoeconômica* para colunas de destilação proposta neste trabalho capaz de ser implantada em simuladores de processos convencionais e que atendam algumas das interpretações feitas apenas pelo usuário, como a decisão do local de inserção/remoção de estágios na coluna.

- Avaliação e quantificação dos efeitos de economia de energia causados pela redução da carga térmica nos refeedores das colunas otimizadas, aplicando-se uma análise direta da quantia de vapor economizada pelo sistema de destilação.

- Avaliação e quantificação da redução dos impactos ambientais relacionados com a redução da quantidade de vapor requerida pelo refeedor da coluna de destilação em função da economia de combustível a ser queimado na caldeira da destilaria. Entre as emissões gasosas de uma destilaria de etanol, aquelas gerada pela queima do bagaço da cana na caldeira da destilaria são as mais importantes. Assim, justifica-se um estudo para avaliar os impactos ambientais causados pela queima de bagaço de cana e sua relação com a quantidade de vapor produzido para a manutenção do processo. Uma vez que os métodos de otimização podem reduzir a quantidade de vapor utilizado no processo, então é possível medir a quantidade de emissões de gases que são liberadas para a atmosfera. Pode ser avaliado a relação econômica entre a quantidade de vapor produzido e a quantidade de emissões geradas pela sua produção em termos de *ecopoints*. Analisando os gases gerados pela queima do bagaço da cana de açúcar em uma caldeira de uso convencional em destilarias de etanol pode-se utilizar o banco de dados *Ecoinvent* para calcular os montantes de das emissões gasosas a partir da queima do bagaço como combustível.

---

**TRABALHOS REALIZADOS DURANTE O MESTRADO**

ROCHA, L. B.; FARIA, S. H. B. de; GIMENES M. L.; DE SOUZA M. **Análise de diferentes modelos de predição de propriedades termodinâmicas para balanços de exergia na destilação etanol/água.** Artigo completo publicado no COBEQ 2014 – XX Congresso Brasileiro de Engenharia Química.

ROCHA L. B., JIMÉNEZ L., FARIA, S. H. B., BOER, D. **Validação da análise exérgica usando Aspen Plus para o sistema metanol/água – Um caso de estudo.** Artigo completo aprovado para o COBEQ 2016 – XX Congresso Brasileiro de Engenharia Química.

ROCHA L. B., SILVA, R.O., TISKI V. C., DEFENDI R. O., , LIMA, O. C. M., JIMÉNEZ L., JORGE L. M. M.; **Integrated Analysis of an Evaporation and Distillation Bioethanol Industrial System Using Direct and Indirect Heating.** Artigo completo publicado no 12th International Symposium on Process Systems Engineering and 25th European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Copenhagen, Denmark, 2015.

ROCHA L. B.; FARIA, S. H. B. de; GIMENES M. L.; JIMÉNEZ L., CAVALI T. S.; **A New Methodology to Reduce the Exergy Loss of Distillation Columns Using Rigorous Process Simulation.** Artigo completo aprovado para o 26th European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Portoroz, Slovenia, 2016.

ROCHA, L.B.; FARIA, S. H. B. de; GIMENES M. L.; JIMÉNEZ L. **Exergoeconomic analysis and optimisation of an industrial distillation system to produce bioethanol** Submetido um artigo completo para publicação no “International Journal of Exergy”.

## CAPÍTULO 7

### REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABBASPOUR, M.; SARAELI, A. R.; Thermo-economic Analysis and Multi-Objective Optimization of a LiBr-Water Absorption Refrigeration System. **International Journal of Environmental Research**, Tehran, v. 9, n. 1, p. 61-68, 2005.

ABBOTT, M. M.; VAN NESS, H. C. Thermodynamics of solutions containing reactive species. **Fluid Phase Equilibria**, v. 77, p. 53-119. 1992.

ABUSOGLU A.; KANOGLU M. Exergoeconomic Analysis and optimization of combined heat and power production: A review. **Renewable and sustainable energy reviews**, Gaziantep, v. 13, p. 2296-2307, mai. 2009.

ALVES, L. G. **Análise Exergoeconômica e Otimização de Diferentes Processos de Processos de Produção de Hidrogênio a Partir de Gás Metano**. 2007. 245 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2013.

AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO. **Evolução do mercado de combustíveis e derivados: 2000-2012**. [s.l]: ANP, 2013.

AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO. Resolução Nº 7 de 9 de Fevereiro de 2011. **Diário Oficial da União**, Brasília, DF, 7 fev. 2005.

ARAÚJO, A. B.; BRITO R. P.; VASCONCELOS, L. S. Exergetic analysis of distillation processes - A case study. **Science Direct**, v. 32, p. 1185-1193, 2007.

ASPEN TECHNOLOGY. **Aspen Plus 12.1 User Guide**. Estados Unidos: Cambridge. 2003.

ATALA, D. I. P. **Montagem, Instrumentação, Controle e Desenvolvimento Experimental de um Processo Fermentativo Extrativo de Produção de Etanol.** 2004, Tese (Doutorado em Engenharia de Alimentos) – Instituto de Engenharia de Alimentos, Departamento de Engenharia de Alimentos, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2004.

BATISTA, F. R. M.; **Estudo do processo de destilação alcoólica contínua: Simulação de Plantas Industriais de Produção de Álcool Hidratado, Álcool Neutro e Cachaça.** 200 f., 2008, Dissertação (Mestrado em Engenharia de Alimentos) – Faculdade de Engenharia de Alimentos, Departamento de Engenharia de Alimentos, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2008.

BEJAN, A.; TSATSARONIS, G.; MORAN, M. **Thermal Design and Optimization,** [S.l.]: Jhon Wiley & Sons, 1999.

BOSCOLO, M. et al. Identification And Dosage By Hrgc Of Minor Alcohols And Esters In Brazilian Sugar-Cane Spirit. **Journal of The Brazilian Chemical Society,** v. 11, n. 1, p. 86, 2000.

BRIDGES, C. et al. **Equipment and Fixtures Index, Percent Good and Valuation Factors.** California: California State Board of Equalization, 2015. Assessor's Handbook.

BUCKLEY, P. S.; LUYBEN, W. L.; SHUNTA, J. P. **Design Of Distillation Column Control Systems.** New York: Edward Arnold, 1985, 532 p.

CARDOSO, D. R. et al. Influência do Material do Destilador na Composição Química das Aguardentes de Cana - Parte II. **Química Nova,** v. 26, n. 2, p. 165, 2003.

CARNOT, S. **Réflexions sur la Puissance Motrice du Feu set sur les Machines Propres à Développer cette Puissance.** Paris. 1824.

CERIANI, R.; MEIRELLES, A. J. Predicting vapor-liquid equilibria of fatty systems. **Fluid Phase Equilibria,** v. 215, p. 227-236, 2004.

CHANG, H.; LI, J. A new exergy method for process analysis and optimization. **Chemical Engineering Science**, v. 60, p. 2771 – 2784, 2005.

CLAUSIUS, R.; **On the motive power of heat, and on the laws which can be deduced from it for the theory of heat**. Dover.1960.

CLAUSIUS, R. **The mechanical theory of heat**. [S.l.]: MacMillan.1879.

CLAYPERON, E. **Mémoire sur la puissance motrice de la chaleur**. [S.l.]: J. Gabay.1834.

CONAB – Companhia nacional de abastecimento. **Segundo levantamento da safra de cana-de-açúcar**. [S.l.], fev. 2014. Disponível em: <<http://www.conab.gov.br>>. Acesso em: 10 fev. 2015.

DENBIGH, K. G. The Second-law Efficiency of Chemical Processes. **Chemical Engineering Science**, v. 6, p. 1-9, 1956.

DHOLE, V. R.; LINNHOFF, B. Distillation columns targets. **Computers and Chemical Engineering**, v. 17, p. 549-560, 1993.

FARIA, S. H. B. **Estudo Energético de Colunas de Destilação através de Análise Exérgica - Sistemas não ideais**. 199 f., 2003, Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2002.

FARIA, S. H. B.; ZEMP R. J. Using exergy loss profiles and enthalpy–temperature profiles for the evaluation of thermodynamic efficiency in distillation column. **Thermal Engineering**. v. 4, n. 1, p. 76–82, 2005.

FONYO, Z. et al. Energy savings of integrated and coupled distillation systems. **Computers & Chemical Engineering**, v. 25, p. 119-140, 2001.

GHANNADZADEH, A. **Exergetic Balances and Analysis in a Process Simulator**, 215 f., Tese (Doutorado Engenharia Química) - Université de Toulouse, Toulouse, 2012.

GHAZI, M. et al. Modelling and Optimization of the water-ethanol distillation column based on exergoeconomic analysis. **International Journal of Exergy**, v. 11, n. 2, 2012.

GMEHLING, J.; ONKEN, U. **Vapor-liquid equilibrium data collection**. Frankfurt: Dechema, 1981.

GOUY, M.; **Sur la théorie thermodynamique de la capillarité et de l'électrocapillarité**, 1901.

HAYDEN, J. G.; O'CONNELL, J. P. A. Generalized Method for Predicting Second Virial Coefficients. **Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development**, v. 14, n. 3, p. 209-216, 1975.

HENLEY, E. J.; SEADER, J. D. **Equilibrium-Stage Separation Operation in Chemical Engineering**. United States: Jonhy Willey., 1981, 742 p.

FILHO, N. C.; KOPITKE, B. H. **Análise de Investimentos**. 11. ed. São Paulo: Atlas, 2010, 411 p.

HIMMELBLAU, D. M.; BISCHOFF, K. B. **Process Analysis and Simulation: Deterministic System**. United States: John Wiley & Sons, 1968, 360 p.

HIMMELBLAU, D. M.; EDGAR, T. F.; LASDON, L. **Optimization of Chemical Process**, 2. Ed., United States: McGraw-Hill, 2001. 666 p.

HINDERINK, A. P. et al. Exergy analysis with a flowsheeting simulator-I. Theory: calculating exergies of material streams. **Chemical Engineering Science**, v. 51, n. 20, p. 4693–4700, 1996.

JORGE, L. M. M. et al. simulação de um sistema industrial de colunas de destilação de bioetanol utilizando o hysys: safra 2009/2010. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 18., 2010, Foz do Iguaçu. **Anais...** Foz do Iguaçu: UFSC, 2010.

KHOA, T. D. et. al. Optimal design of distillation column using three dimensional exergy analysis curves. **Energy**, [S.l.], n. 35, p. 5309-5319, 2010.

KING, C.J.; **Separation Processes**, United States: Mc GrawHill Book Company, 1980.

KISTER, Henry Z. **Distillation Design**. United States: McGraw-Hill, 1992. 709 p.

KISTER, Henry Z. **Distillation Operation**. United States: McGraw-Hill, 1992. 729 p.

KOTAS, T. J.; MAYHEW, Y. R.; RAICHURA, R. C.; Nomenclature for exergy analysis. **Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy**, v. 209, n. 4, p. 275-280, 1987.

KOTAS, T. J. **The Exergy Method of Thermal Plants Analysis**. [S.l.]: Krieger Publishing Company, 1995.

MAGALHÃES, J. P. A.; KUPERMAN, N.; MACHADO, R. C. **PROÁLCOOL: Uma Avaliação Global**. Rio de Janeiro: Astel, 1991. 194 p.

MANH, R. S. H.; NICHOLAS JR., J. J; WODNIK, R. B. Distillation with Secondary Reflux and Vaporization: A Comparative Evaluation. **AICHE Journal**, v. 23, n. 5, p. 651-658, 1977.

MARQUINI, M. F. **Análise de um Sistema Industrial de Colunas de Destilação**. 2007, 112 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Instituto de Engenharia Química, Departamento de Desenvolvimento de Processos, Universidade Estadual de Maringá, Maringá, 2007.

MCAVOY, J. T.; STANLEY, G. T. Dynamic Energy Conservation Aspects of Distillation Control. **Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals**, [S.l.], v. 24, p. 439-443, 1985.

MEJÍA, S. M.; ESPINAL, J. F.; MONDRAGÓN, F. Estudio del Azeotropo Etanol-Agua. Caracterización Molecular de Dímeros de Etanol, Heterodímeros y Heterotrímeros de Etanol-Agua. **Energética**, v. 36, p. 5-18, 2006.

MORAN, M. J.; SHAPIRO, H. N. **Fundamentals of Engineering Thermodynamics**. [S.l.]: John Wiley & Sons. 2006.

NISENFELD, A. E.; SEEMAN, R. C. **Distillation Columns**. United States: Instrument Society of America, 1891, 238 p.

NOTHNAGEL K.H.; ABRAMS, D. S.; PRAUSNITZ, J. Generalized Correlation for Fugacity Coefficients in Mixtures at Moderate Pressures. **Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development**, [S.l.], v. 12, n. 1, p. 25-35, 1973.

OLIVEIRA, E. S. **Características Fermentativas, Formação de Compostos Voláteis e Qualidade da Aguardente de Cana obtida por Linhagens de Leveduras Isoladas de Destilarias Artesanais**. 2001. Tese (Doutorado em Tecnologia de Alimentos) – Faculdade de Engenharia de Alimentos, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2001.

ONORI, G.; SANTUCCI, A. Dynamical and structural properties of water/alcohol mixtures, **Journal of Molecular Liquids**, [S.l.], v. 69, p. 161–181, 1996.

PAMPLONA, C.; **PROÁLCOOL**: Impacto em termos técnico-econômicos e sociais do programa no Brasil. 2. ed. Belo Horizonte: Sopral, 1984, 93 p.

PÉREZ, O., ZUMALACÁRREGUI, L. and GOZÁ, O. Simplificaciones en el Cálculo de Columnas de Destilación Alcohólica **Información Tecnológica**, v.21, p. 103-112, 2010.

PLATT, G. M.; DE MEDEIROS, J. L. Simulation of reactive distillation processes. In: CONGRESSO DE ENGENHARIA DE PROCESSOS DO MERCOSUL, 2., 1999, Florianópolis. **Anais...** Florianópolis: UFSC, 1999.

PORTAL DO BIODÍSEL. **Álcool – Etanol Brasileiro**. Disponível em <<http://www.biodieselbr.com/energia/alcool/etanol.htm>>. Acesso em: 10 mar. 2015.

PORTAL DO BIODÍSEL. **Futuro para o mercado de álcool e açúcar**. Disponível em <<http://www.biodieselbr.com/energia/alcool/mercado-etanol.htm>>. Acesso em: 10 mar. 2015.

PORTAL DO BIODIESEL. **Perspectivas do Álcool/Etanol**. Disponível em <<http://www.biodieselbr.com/energia/alcool/cenario-perspectivaetanol.htm>>. Acesso em: 10 mar. 2015.

PRAUSNITZ, J. et al. **Computer Calculations for Multicomponent Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Equilibria**. New Jersey: Prentice-Hall, p. 1-89, 1980.

PRAUSNITZ, J.; JIANG, J. Equation of state for thermodynamic properties of chain fluids near-to and far-from the vapor–liquid critical region. **Journal of Chemistry and Physics**, [S.l.], v. 111, 1999, 5964 p.

RANKINE, W.J.M. Laws of the elasticity of solid bodies. **Cambridge and Dublin Mathematical Journal**, v. 6, p. 47–80. 1851.

RANT, Z. Exergie, ein neues Wort für technische Arbeitsfähigkeit. **Forsch. Ingenieurwes**, [S.l.], v. 22, n. 1. p. 36–37. 1956.

REID, R. C.; PRAUSNITZ, J. M.; POLING, B. E. **The Properties of Gases & Liquids**. 4. Ed. United States: McGraw-Hill, 1987, 741 p.

REID, R. C.; ENGEL, T.; **Thermodynamics, Statistical Thermodynamics and Kinetics**. Harlow: Pearson. 1990, 648 p.

RIVERO R.; ANAYA A. Exergy Analysis of Industrial Processes: Energy-Economy-Ecology. **Latin American Applied Research**, [S.l.] v. 27, n. 4, p. 191-205, 1997.

RIVERO, R.; RENDÓN, C.; SALVADOR, G. Exergy and exergoeconomic analysis of a crude oil combined distillation unit. **Energy**, [S.l.], n. 29, p. 1909-1927, 2004.

ROCHA, L.B.; FARIA, S. H. B ; GIMENES M. L.; De Souza M. Análise de diferentes modelos de predição de propriedades termodinâmicas para balanços de *exergia* na destilação etanol/água. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 20., 2014, Florianópolis. **Anais...** Florianópolis: UFSC, 2014.

RODRIGUES, M. I.; IEMMA, A. F.; **Planejamento de Experimentos e Otimização de Processos: Uma estratégia sequencial de planejamento**. 1. Ed. Campinas, SP: Casa do Pão, 2005, 325 p.

SAHOO, P. K. Exergoeconomic analysis and optimization of a cogeneration system using evolutionary programming, **Applied Thermal Engineering**, [S.l.], v. 28, 2008.

SAMANTA, A. N.; KIRAN, B.; JANA, A. K.; A novel intensified heat integration in multicomponent distillation. **Energy**, v. 41, p. 443-453, 2012.

SANDLER, S. I. **Chemical and Engineering Thermodynamics**. 3. Ed. Nova York, USA: John Wiley & Sons, 1999.

SANTOS, A. D. S.; VALLE, M. L. M.; GIANNINI, R. G. A experiência brasileira no desenvolvimento de um combustível binário álcool-diesel. **Economia & Energia**, [S.l.], v.20, mai. 2000.

SCIUBBA, E.; WALL, G. A brief Commented History of Exergy From the Beginnings to 2004. **International Journal of Thermodynamics**, [S.l.], v. 10, n. 1, p. 1–26, 2007.

SCHEFFLAN, R. **Teach Yourself the Basics of Aspen Plus By Ralph**, [S.l.]: AICHe and Wiley, 2011.

SILVA, R.O., TISKI V. C., DEFENDI R. O., ROCHA L. B., LIMA, O. C. M., JIMENÉNEZ L., JORGE L. M. M.; **Integrated Analysis of an Evaporation and Distillation Bioethanol Industrial System Using Direct and Indirect Heating**, Copenhagen, 2015.

SINNOT, R. K. **Chemical Engineering Design**. 4. ed. Oxford: Elsevier, 2005. 1038 p.

SMEJKAL, Q.; SOÓS, M. Comparison of computer simulation of reactive distillation using ASPEN PLUS and HYSYS software. **Chemical Engineering and Processing**, [S.l.], v. 41, p. 413-418, 2002.

STODOLA, A. **Die Kreisprozesse der Gasmachine**. Z. Ver.; dt. Ing. 42. p. 1086–1091. 1898.

SULEIMAN B., OLAWALE A.S., WAZIRI S.M.; Exergetic and Economic Assessment of Distillation Hybrid Configurations for Bioethanol Refining. **International Journal of Thermophysics**, [S.l.], v. 17, p. 221-231, 2014.

SZARGUT; The notation of exergy in contradistinction to energy and the possibility of practical application of exergy. **Energetyka Przemysłowa**, Polska, v. 10, n. 11, p. 374-378. 1962.

TAIT, P.G.; **Sketch of thermodynamics**. [S.l.]: D. Douglas, 1877.

TARIGHALESAMI, A. H. et. al. Thermodynamic evaluation of distillation columns using exergy loss profiles: a case study on the crude oil atmospheric distillation column. **Clean Technologies and Environmental Policy**. [S.l.], v. 14, p. 381–387, 2012.

TSATSARONIS, G., CZIELA, F.; **Thermoeconomics**. in Meyers R (Ed.): Encyclopedia of physical science and technology. 3 ed., [S.l.]: Academic Press, v. 16. p. 659-680, 2002.

THOMSON, W. On the dynamical theory of heat. **Transactions of Royal Society of Edinburgh**. Edinburgh, v. 20, p. 261–283, 1853.

---

THOMSON, W.; KELVIN, L.; TAIT, P. G. **Principles of mechanics and dynamics**. Dover.1962.

VISWANATHAN J.; GROSSMAN I. E. An alternative MINLP model for finding the number of trays for a specified separation objective. **Computer Chemical Engineering**, [S.l.], v. 17, p. 949-955, 1993.

WEINGÄRTNER; **Über die thermologische Seite der Exergiebegriffe**. Energie u. Technik, vol. 21, n. 2, German, p. 461-462, 1969.

YANG, B. et al. Multiplicity Analysis in Reactive Distillation Column Using ASPEN PLUS. **Chinese Journal Chemical Engineering**, V. 14, p. 301-308, 2006.

ZEMP, R. J.. **Thermodynamic Analysis of Separation Systems**. Tese (Doutorado em Engenharia Química), University of Manchester Institute of Science and Technology, 1994.

ZEMP, R. J.; FARIA, S. H. B.; MAIA, M. L. O.; GOMIERO, V. Thermodynamics Analysis of Distillation Columns: Driving Force Distribution and Exergy Loss. In: JORDANIAN CHEMICAL ENGINEERING CONFERENCE, 2., 1996, Irbid. **Proceedings...** Irbid, 1996.

ZEMP, R. J.; FARIA, S. H. B.; MAIA, M. L.O. Driving force distribution and exergy loss in the thermodynamic analysis of distillation columns. **Computers and Chemical Engineering**, v. 21, p. S523-S528, 1997.

ZHIFA, S.; YAOWEN, H.; CHUSHENG, J. Exergy Analysis of Distillation Stages by Non-Equilibrium Thermodynamics. **Journal of Chemical Industry and Engineering**, v. 2, n. 1, p. 104-114, jan. 1985.

## ANEXOS

**Anexo A.1:** Resultados da simulação do sistema original para a coluna AA1D.

<i>Condensador</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidade</i>	<i>Refrvedor</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidade</i>
Temperatura	351,95	K	Temperatura	373,17	K
Carga Térmica	-129560325	Watt	Carga Térmica	1,5E+08	Watt
Taxa de Destilado	3,83	kg/sec	Taxa do Produto de Fundo	43,56	kg/sec
Taxa de Refluxo	115	kg/sec	Taxa de Refluxo do Refervedor	65,89	kg/sec
Razão de Refluxo	30		Razão de Refluxo do Refervedor	1,51	

## Anexo A.2: Resultados da simulação do sistema original para a coluna AA1D.

<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Carga Térmica</i>	<i>Alimentação Líquida</i>	<i>Alimentação Vaporizada</i>	<i>Produto Líquido</i>	<i>Produtor Vaporizado</i>	<i>Entalpia do Líquido</i>	<i>Entalpia do Vapor</i>	<i>Taxa de Líquido fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Taxa de Vapor fornecida para o estágio posterior</i>
	K	N/sqm	Watt	kg/sec	kg/sec	kg/sec	kg/sec	J/kmol	J/kmol	kg/sec	kg/sec
1	351,95	101325	129560325	0	0	3,83	0	-274440257	-234106541	115	0
2	352,28	101325	0	0	0	0	0	-275120825	-234695707	109,12	118,83
3	352,86	101325	0	0	0	0	0	-276138280	-235167985	100,47	112,95
4	353,98	101325	0	0	0	0	0	-277757790	-235854244	86,93	104,31
5	357,02	101325	0	0	0	0	0	-279942634	-236882006	67,95	90,76
6	365,67	101325	0	0	0	0	0,94	-280636671	-238233078	57,49	71,78
7	371,20	101325	0	55,64	0,62	0	0	-280485487	-239134057	55,69	62,26
8	372,30	101325	0	0	0	0	0	-280440183	-239335575	55,46	60,46
9	372,46	101325	0	0	0	0	0	-280433491	-239364789	55,45	60,24
10	372,15	101325	0	0	0	0	0	-280446866	-239382467	109,82	60,23
11	372,95	101325	0	0	0	0	7,93	-280412151	-239546883	109,53	58,33
12	373,12	101325	0	0	0	0	0	-280404406	-239581697	109,47	65,96
13	373,16	101325	0	0	0	0	0	-280402791	-239588940	109,45	65,90
14	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402458	-239590429	109,45	65,89
15	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402390	-239590734	109,45	65,89

(Continua)

(Conclusão)

<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Carga Térmica</i>	<i>Alimentação Líquida</i>	<i>Alimentação Vaporizada</i>	<i>Produto Líquido</i>	<i>Produtor Vaporizado</i>	<i>Entalpia do Líquido</i>	<i>Entalpia do Vapor</i>	<i>Taxa de Líquido fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Taxa de Vapor fornecida para o estágio posterior</i>
16	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402376	-239590797	109,45	65,89
17	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590810	109,45	65,89
18	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590812	109,45	65,89
19	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	109,45	65,89
20	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	109,45	65,89
21	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	109,45	65,89
22	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	109,45	65,89
23	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	109,45	65,89
24	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	109,45	65,89
25	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	109,45	65,89
26	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	109,45	65,89
27	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	109,45	65,89
28	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	109,45	65,89
29	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	109,45	65,89
30	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	109,45	65,89
31	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	109,45	65,89
32	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	109,45	65,89
33	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	109,45	65,89
34	373,17	101325	149264548	0	0	43,56	0	-280402373	-239590813	43,56	65,89

**Anexo A.3:** Resultados da simulação do sistema original para a coluna AA1D.

<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Déficit de Entalpia</i>	<i>Perda de Exergia</i>	<i>Fator de Carnot</i>	<i>Déficit Real de Entalpia</i>
	K	N/sqm	Watt	Watt		Watt
1	351,95	101325	129560325	95877,34	0,15	129560325
2	352,28	101325	125380960	178332,36	0,15	0
3	352,86	101325	122668702	352379,54	0,15	0
4	353,98	101325	121129530	811341,15	0,16	0
5	357,02	101325	119675344	1891008,61	0,16	0
6	365,67	101325	110952153	1696182,41	0,18	0
7	371,20	101325	68721860,1	326620,12	0,20	0
8	372,30	101325	17775375,1	20385,23	0,20	0
9	372,46	101325	2695503,12	737,14	0,20	0
10	372,15	101325	109975298	390068,24	0,20	0
11	372,95	101325	135159381	80644,014	0,20	0
12	373,12	101325	135333409	16838,12	0,20	0
13	373,16	101325	135369220	3463,57	0,20	0
14	373,17	101325	135376564	710,28	0,20	0
15	373,17	101325	135378069	145,57	0,20	0
16	373,17	101325	135378378	29,83	0,20	0
17	373,17	101325	135378441	6,11	0,20	0
18	373,17	101325	135378454	1,25	0,20	0
19	373,17	101325	135378457	0,26	0,20	0
20	373,17	101325	135378457	0,053	0,20	0
21	373,17	101325	135378457	0,011	0,20	0
22	373,17	101325	135378457	0,0022	0,20	0
23	373,17	101325	135378458	0,00045	0,20	0
24	373,17	101325	135378458	0,00045	0,20	0
25	373,17	101325	135378463	0,00045	0,20	0
26	373,17	101325	135378483	0,00045	0,20	0
27	373,17	101325	135378582	0,00045	0,20	0
28	373,17	101325	135379065	0,00045	0,20	0
29	373,17	101325	135381414	0,00045	0,20	0
30	373,17	101325	135392929	0,00045	0,20	0
31	373,17	101325	135449397	0,00045	0,20	0
32	373,17	101325	135725010	0,00045	0,20	0
33	373,17	101325	137095871	0,00045	0,20	0
34	373,17	101325	149264548	3,35E-08	0,20	149264548

**Anexo A.4:** Resultados da simulação do sistema original para a coluna AA1D.

	<i>VINHO</i>	<i>ASD</i>	<i>VINHACA</i>	<i>PFD</i>	<i>FLEGMA</i>
Etanol kmol/sec	0,079	0,069	1,49E-19	0,0073	0,0024
Água kmol/sec	2,92	0,036	2,42	0,034	0,43
Fluxo Total kmol/sec	3,00	0,11	2,42	0,041	0,44
Fluxo Total kg/sec	56,26	3,83	43,56	0,94	7,93
Fluxo Total m <sup>3</sup> /sec	0,82	0,00502436	0,047	1,20	13,14
Temperatura K	367,15	351,95	373,17	365,67	372,95
Pressão N/m <sup>2</sup>	101325	101325	101325	101325	101325
Fração de Vapor	0,0086	0	0	1	1
Fração Líquida	0,99	1	1	0	0
Fração Sólida	0	0	0	0	0
Entalpia J/kmol	-280250000	-274440000	-280400000	-238230000	-239550000
Entalpia J/kg	-14945000	-7528400	-15565000	-10356000	-13185000
Entalpia Watt	-840830000	-28859000	-678020000	-9742900	-104510000
Entropia J/kmol.K	-151150	-262230	-146840	-65214,5	-38157,78
Entropia J/kg.K	-8060,48	-7193,40	-8150,88	-2834,76	-2100,23
Desidade kmol/m <sup>3</sup>	3,65	20,93	50,97	0,0339694	0,033
Desidade kg/m <sup>3</sup>	68,39	762,95	918,27	0,7814794	0,60
Média PM	18,75	36,45	18,01	23,01	18,17
Liq. Vol. 60F <sup>o</sup> m <sup>3</sup> /sec	0,057	0,0047	0,044	0,0010	0,0080

**Anexo B.1:** Resultados da simulação do sistema original para a coluna B1B.

<i>Condensador</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidade</i>	<i>Refervedor</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidade</i>
Temperatura	351,31	K	Temperatura	352,88	K
Carga Térmica	-19458250	Watt	Carga Térmica	10511858	Watt
Taxa de Destilado	3,8333333	kg/sec	Taxa do Produto de Fundo	5,034	kg/sec
Taxa de Refluxo	17,25	kg/sec	Taxa de Refluxo do Refervedor	9,62	kg/sec
Razão de Refluxo	4,5		Razão de Refluxo do Refervedor	1,91	

## Anexo B.2: Resultados da simulação do sistema original para a coluna B1B.

<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Carga Térmica</i>	<i>Alimentação Líquida</i>	<i>Alimentação Vaporizada</i>	<i>Produto Líquido</i>	<i>Produto Vaporizado</i>	<i>Entalpia do Vapor</i>	<i>Taxa de Líquido fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Taxa de Vapor fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Vazão mássica de Vapor</i>
	K	N/sqm	Watt	kg/sec	kg/sec	kg/sec	kg/sec	J/kmol	J/kmol	kg/sec	kg/sec
1	351,31	101325	-19458249,7	0	0	0	3,83	-272092467	-232880130	17,25	0
2	351,31	101325	0	0	0	0	0	-272116385	-232906786	17,22	21,08
3	351,31	101325	0	0	0	0	0	-272139881	-232922387	17,20	21,06
4	351,32	101325	0	0	0	0	0	-272163025	-232937699	17,17	21,03
5	351,32	101325	0	0	0	0	0	-272185884	-232952768	17,14	21,00
6	351,32	101325	0	0	0	0	0	-272208520	-232967638	17,12	20,98
7	351,32	101325	0	0	0	0	0	-272230994	-232982350	17,09	20,95
8	351,32	101325	0	0	0	0	0	-272253366	-232996944	17,07	20,92
9	351,33	101325	0	0	0	0	0	-272275693	-233011459	17,04	20,90
10	351,33	101325	0	0	0	0	0	-272298033	-233025931	17,01	20,87
12	351,33	101325	0	0	0	0	0	-272342979	-233054899	16,96	20,82
13	351,34	101325	0	0	0	0	0	-272365704	-233069469	16,94	20,80
14	351,34	101325	0	0	0	0	0	-272388677	-233084147	16,91	20,77
15	351,34	101325	0	0	0	0	0	-272411963	-233098971	16,88	20,74
16	351,34	101325	0	0	0	0	0	-272435628	-233113983	16,86	20,72

(Continua)

(Continuação)

<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Carga Térmica</i>	<i>Alimentação Líquida</i>	<i>Alimentação Vaporizada</i>	<i>Produto Líquido</i>	<i>Produto Vaporizado</i>	<i>Entalpia do Vapor</i>	<i>Taxa de Líquido fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Taxa de Vapor fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Vazão mássica de Vapor</i>
17	351,35	101325	0	0	0	0	0	-272459745	-233129225	16,83	20,69
18	351,35	101325	0	0	0	0	0	-272484388	-233144743	16,80	20,66
19	351,35	101325	0	0	0	0	0	-272509641	-233160584	16,77	20,63
20	351,36	101325	0	0	0	0	0	-272535593	-233176800	16,74	20,61
21	351,36	101325	0	0	0	0	0	-272562343	-233193447	16,71	20,58
22	351,37	101325	0	0	0	0	0	-272589998	-233210588	16,68	20,55
23	351,37	101325	0	0	0	0	0	-272618680	-233228288	16,65	20,51
24	351,38	101325	0	0	0	0	0	-272648523	-233246624	16,61	20,48
25	351,38	101325	0	0	0	0	0	-272679680	-233265680	16,58	20,45
26	351,39	101325	0	0	0	0	0	-272712324	-233285548	16,54	20,41
27	351,39	101325	0	0	0	0	0	-272746651	-233306337	16,50	20,38
28	351,40	101325	0	0	0	0	0	-272782888	-233328166	16,46	20,34
29	351,41	101325	0	0	0	0	0	-272821300	-233351176	16,42	20,29
30	351,42	101325	0	0	0	0	0	-272862192	-233375528	16,37	20,25
31	351,43	101325	0	0	0	0	0	-272905925	-233401408	16,32	20,20
32	351,44	101325	0	0	0	0	0	-272952927	-233429036	16,27	20,16
33	351,45	101325	0	0	0	0	0	-273003709	-233458671	16,21	20,10
34	351,46	101325	0	0	0	0	0	-273058887	-233490622	16,15	20,04

(Continua)

(Continuação)

<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Carga Térmica</i>	<i>Alimentação Líquida</i>	<i>Alimentação Vaporizada</i>	<i>Produto Líquido</i>	<i>Produto Vaporizado</i>	<i>Entalpia do Vapor</i>	<i>Taxa de Líquido fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Taxa de Vapor fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Vazão mássica de Vapor</i>
35	351,48	101325	0	0	0	0	0	-273119213	-233525258	16,08	19,98
36	351,50	101325	0	0	0	0	0	-273185611	-233563030	16,00	19,91
37	351,52	101325	0	0	0	0	0	-273259233	-233604488	15,92	19,84
38	351,54	101325	0	0	0	0	0	-273341536	-233650315	15,83	19,76
39	351,57	101325	0	0	0	0	0	-273434381	-233701367	15,72	19,66
40	351,60	101325	0	0,50	0,59	0	0	-273540197	-233758735	15,61	19,56
41	351,64	101325	0	0	0	0	0	-273662201	-233823827	15,47	19,44
42	351,69	101325	0	0	0	0	0	-273804755	-233898494	15,31	19,30
43	351,76	101325	0	0	0	0	0	-273973914	-233985218	15,12	19,14
44	351,84	101325	0	0	0	0	0	-274178366	-234087406	14,89	18,95
45	352,05	101325	0	0,56	0,378	0	0	-274644379	-234202816	15,17	18,72
46	352,05	101325	0	0	0	0	0	-274644428	-234185018	15,17	10,14
47	352,05	101325	0	0	0	0	0	-274644510	-234185075	15,17	10,14
48	352,05	101325	0	0	0	0	0	-274644646	-234185171	15,17	10,14
49	352,05	101325	0	0	0	0	0	-274644872	-234185330	15,17	10,14
50	352,05	101325	0	0	0	0	0	-274645249	-234185595	15,17	10,14
51	352,05	101325	0	0	0	0	0	-274645877	-234186035	15,17	10,14
52	352,04	101325	0	0	0	0	0	-274646922	-234186769	15,17	10,13

(Continua)

(Conclusão)

<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Carga Térmica</i>	<i>Alimentação Líquida</i>	<i>Alimentação Vaporizada</i>	<i>Produto Líquido</i>	<i>Produto Vaporizado</i>	<i>Entalpia do Vapor</i>	<i>Taxa de Líquido fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Taxa de Vapor fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Vazão mássica de Vapor</i>
53	352,05	101325	0	0	0	0	0	-274648662	-234187991	15,17	10,13
54	352,05	101325	0	0	0	0	0	-274651560	-234190025	15,16	10,13
55	352,05	101325	0	0	0	0	0	-274656387	-234193411	15,16	10,13
56	352,06	101325	0	0	0	0	0	-274664430	-234199052	15,15	10,12
57	352,06	101325	0	0	0	0	0	-274677842	-234208450	15,13	10,11
58	352,07	101325	0	0	0	0	0	-274700233	-234224118	15,11	10,10
59	352,09	101325	0	0	0	0	0	-274737686	-234250263	15,06	10,07
60	352,12	101325	0	0	0	0	0	-274800534	-234293964	14,99	10,03
61	352,17	101325	0	0	0	0	0	-274906560	-234367212	14,87	9,96
62	352,27	101325	0	0	0	0	0	-275087219	-234490542	14,65	9,83
63	352,88	101325	10511857,7	0	0	0	5,03	-276162543	-234669103	5,03	9,62

**Anexo B.3:** Resultados da simulação do sistema original para a coluna B1B.

<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Deficit de Entalpia</i>	<i>Perda de Exergia</i>	<i>Fator de Carnot</i>	<i>Deficit Real de Entalpia</i>
	K	N/sqm	Watt	Watt		Watt
1	351,31	101325	19458249,7	54,19	0,15	19458249,7
2	351,31	101325	15920123,1	61,20	0,15	0
3	351,31	101325	13432631	58,22	0,15	0
4	351,32	101325	11597014,9	55,70	0,15	0
5	351,32	101325	10193313,8	53,60	0,15	0
6	351,32	101325	9090254,41	51,87	0,15	0
7	351,32	101325	8204707,75	50,48	0,15	0
8	351,32	101325	7481519,04	49,39	0,15	0
9	351,33	101325	6882690,2	48,58	0,15	0
10	351,33	101325	6381219,84	48,04	0,15	0
11	351,33	101325	5957418,4	47,75	0,15	0
12	351,33	101325	5596611,6	47,72	0,15	0
13	351,34	101325	5287658,38	47,94	0,15	0
14	351,34	101325	5021965,55	48,42	0,15	0
15	351,34	101325	4792815,6	49,16	0,15	0
16	351,34	101325	4594897,65	50,18	0,15	0
17	351,35	101325	4423973,71	51,50	0,15	0
18	351,35	101325	4276637,12	53,14	0,15	0
19	351,35	101325	4150135,08	55,14	0,15	0
20	351,36	101325	4042236,72	57,53	0,15	0
21	351,36	101325	3951133,87	60,38	0,15	0
22	351,37	101325	3875366,03	63,74	0,15	0
23	351,37	101325	3813763,31	67,70	0,15	0
24	351,38	101325	3765403,14	72,36	0,15	0
25	351,38	101325	3729577,53	77,83	0,15	0
26	351,39	101325	3705768,94	84,28	0,15	0
27	351,39	101325	3693633,02	91,91	0,15	0
28	351,40	101325	3692987,22	100,95	0,15	0
29	351,41	101325	3703804,63	111,73	0,15	0
30	351,42	101325	3726212,64	124,65	0,15	0
31	351,43	101325	3760496,26	140,25	0,15	0
32	351,44	101325	3807106,36	159,23	0,15	0
33	351,45	101325	3866673,17	182,52	0,15	0
34	351,46	101325	3940025,73	211,37	0,15	0
35	351,48	101325	4028218,45	247,52	0,15	0

(Continua)

						(Conclusão)
<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Deficit de Entalpia</i>	<i>Perda de Exergia</i>	<i>Fator de Carnot</i>	<i>Deficit Real de Entalpia</i>
36	351,50	101325	4132566,19	293,36	0,15	0
37	351,52	101325	4254689,97	352,29	0,15	0
38	351,54	101325	4396576,07	429,20	0,15	0
39	351,57	101325	4560652,19	531,34	0,15	0
40	351,60	101325	4749885,62	669,65	0,15	0
41	351,64	101325	4967909,59	861,16	0,15	0
42	351,69	101325	5219185,53	1133,22	0,15	0
43	351,76	101325	5509209,43	1531,42	0,15	0
44	351,84	101325	5845509,52	2135,50	0,15	0
45	352,05	101325	1011290,51	30940,95	0,15	0
46	352,05	101325	928,06	0,0016	0,15	0
47	352,05	101325	1544,88	0,0030	0,15	0
48	352,05	101325	2571,67	0,0055	0,15	0
49	352,05	101325	4280,94	0,010	0,15	0
50	352,05	101325	7126,34	0,023	0,15	0
51	352,05	101325	11863,18	0,051	0,15	0
52	352,05	101325	19749,07	0,12	0,15	0
53	352,05	101325	32878,40	0,31	0,15	0
54	352,05	101325	54740,06	0,79	0,15	0
55	352,05	101325	91148,72	2,12	0,15	0
56	352,06	101325	151802,63	5,73	0,15	0
57	352,06	101325	252897,37	15,65	0,15	0
58	352,07	101325	421530,51	43,05	0,15	0
59	352,09	101325	703168,94	118,93	0,15	0
60	352,12	101325	1174387,33	329,78	0,15	0
61	352,17	101325	1964618,45	918,42	0,15	0
62	352,27	101325	3295458,86	2579,03	0,15	0
63	352,88	101325	10511857,70	9065,73	0,15	10511857,7

**Anexo B.4:** Resultados da simulação do sistema original para a coluna B1B.

	<i>FLEGMA</i>	<i>PFD</i>	<i>HIDRAT</i>	<i>FLEGMACA</i>
Etanol	0,15	0,0081	0,079	0,079
Água	0,057	0,032	0,012	0,077
Fluxo Total kmol/sec	0,21	0,040	0,090	0,16
Fluxo Total kg/sec	7,93	0,94	3,83	5,03
Fluxo Total m <sup>3</sup> /sec	6,11	0,36	0,0052	0,0064
Temperatura K	367,91	359,63	351,31	352,88
Pressão N/m <sup>2</sup>	101325	101325	101325	101325
Fração de Vapor	1	0,31	0	0
Fração Líquida	0	0,69	1	1
Fração Sólida	0	0	0	0
Entalpia J/kmol	-233010000	-266530000	-272090000	-276160000
Entalpia J/kg	-6085300	-11236000	-6408500	-8579100
Entalpia Watt	-48234000	-10571000	-24566000	-43186000
Entropia J/kmol.K	-158210	-147680	-300740	-235760
Entropia J/kg.K	-4131,63	-6225,50	-7083,24	-7324,04
Desidade kmol/m <sup>3</sup>	0,0338949	0,1101151	17,51	24,28
Desidade kg/m <sup>3</sup>	1,30	2,61	743,30	781,54
Média PM	38,29	23,72	42,46	32,19
Liq. Vol. 60F° m <sup>3</sup> /sec	0,0097	0,0010	0,0048	0,0060

**Anexo C.1:** Resultados da análise paramétrica da coluna AA1D para de terminação da fração mássica de etanol na corrente de Flegma.

$\begin{matrix} N \\ R \end{matrix}$	34	35	36	37	38	39	40
25	0,44	0,44	0,45	0,46	0,46	0,46	0,36
26	0,42	0,43	0,45	0,44	0,45	0,45	0,46
27	0,41	0,42	0,43	0,43	0,44	0,44	0,45
28	0,40	0,41	0,42	0,42	0,42	0,44	0,44
29	0,39	0,40	0,41	0,41	0,41	0,43	0,43
30	0,38	0,39	0,40	0,40	0,41	0,42	0,42
31	0,37	0,38	0,39	0,40	0,39	0,41	0,41
32	0,36	0,37	0,38	0,38	0,38	0,41	0,40
33	0,35	0,36	0,37	0,38	0,38	0,39	0,39
34	0,35	0,35	0,36	0,36	0,37	0,38	0,38
35	0,34	0,34	0,35	0,35	0,36	0,37	0,37

**Anexo C.2:** Resultados da análise paramétrica da coluna AA1D para determinação da fração mássica de etanol na corrente de PFD.

$\begin{matrix} N \\ R \end{matrix}$	34	35	36	37	38	39	40
25	0,37	0,38	0,38	0,38	0,39	0,39	0,40
26	0,38	0,38	0,38	0,39	0,39	0,40	0,40
27	0,38	0,38	0,39	0,39	0,40	0,40	0,40
28	0,39	0,39	0,39	0,40	0,40	0,40	0,41
29	0,39	0,39	0,40	0,40	0,40	0,41	0,41
30	0,39	0,40	0,40	0,40	0,41	0,41	0,42
31	0,40	0,40	0,40	0,41	0,41	0,42	0,42
32	0,40	0,40	0,41	0,41	0,41	0,42	0,42
33	0,40	0,40	0,41	0,41	0,42	0,42	0,43
34	0,40	0,41	0,41	0,42	0,42	0,42	0,43
35	0,41	0,41	0,41	0,42	0,42	0,43	0,43

**Anexo C.3:** Resultados da análise paramétrica da coluna AA1D para determinação da exergia total perdida (kW).

$\begin{matrix} N \\ R \end{matrix}$	34	35	36	37	38	39	40
25	4793,68	4713,70	4642,72	4583,36	4537,85	4509,73	4499,31
26	4988,45	4905,57	4831,76	4769,51	4720,58	4688,08	4674,04
27	5183,38	5097,60	5021,02	4956,03	4903,96	4867,40	4849,36
28	5378,44	5289,79	5210,48	5142,84	5087,86	5047,61	5025,39
29	5573,61	5482,12	5400,12	5329,90	5272,21	5228,58	5202,23
30	5768,89	5674,57	5589,91	5517,18	5456,92	5410,21	5379,91
31	5964,27	5867,13	5779,84	5704,65	5641,93	5592,39	5558,40
32	6159,74	6059,80	5969,88	5892,28	5827,20	5775,02	5737,65
33	6355,29	6252,55	6160,03	6080,05	6012,68	5958,04	5917,55
34	6550,92	6445,38	6350,29	6267,94	6198,36	6141,38	6098,04
35	6746,61	6638,29	6540,62	6455,95	6384,19	6325,00	6279,01

**Anexo C.4:** Resultados da análise paramétrica da coluna AA1D para determinação da carga térmica do refeedor (kW).

R \ N	34	35	36	37	38	39	40
25	128725	126061	124000	122439	121324	120668	120430
26	132830	130058	128000	126262	125060	124300	120430
27	136937	134059	131816	130092	128808	127952	123981
28	141045	138061	135730	133928	132567	130952	127542
29	145154	142065	139645	137768	136335	131622	131118
30	149264	146070	143564	141612	136335	135308	134710
31	153375	150077	147484	145612	143890	139007	138318
32	157487	154084	151406	149309	147675	146436	141944
33	161600	158093	155329	153309	151464	150163	145584
34	165713	162103	159254	157015	155257	153896	149238
35	169827	166114	163180	160871	159052	157634	152904

**Anexo D.1:** Resultados da análise paramétrica da coluna B1B para determinação da carga térmica do refeedor (kW).

R \ N	63	64	65	66	67	68	69
3,5	7061	7056	7052	7047	7043	7039	7036
4,0	8784	8779	8774	8769	8765	8761	8756
4,5	10511	10506	10500	10495	10490	10485	10481
5,0	12241	12235	12229	12223	12218	12212	12207
5,5	13972	13965	13959	13953	13947	13942	13936
6,0	15672	15698	15691	15685	15678	15672	15667
6,5	17439	17431	17424	17417	17411	17405	17399
7,0	19174	19166	19158	19151	19144	19138	19132

**Anexo D.2:** Resultados da análise paramétrica da coluna B1B para determinação da vazão total de etanol hidratado (ton/ano).

R \ N	63	64	65	66	67	68	69
3,5	96484,83	96503,78	96522,01	96539,36	96556,11	96572,11	96587,5
4,0	96687,71	96706,92	96725,26	96742,86	96759,73	96850,59	96791,49
4,5	96843,2	96862,4	96880,87	96898,47	96915,34	96931,22	96947,1
5,0	96965,45	96984,65	97002,87	97020,48	97037,22	97053,35	97068,86
5,5	97063,69	97082,52	97100,62	97117,98	97134,6	97150,6	97165,87
6,0	97147,26	97162,54	97180,39	97197,51	97213,88	97229,64	97244,78
6,5	97213,92	97228,9	97246,5	97263,37	97279,5	97294,89	97309,78
7,0	97269,94	97284,67	97301,9	97318,52	97334,4	97349,55	97364,07



**Anexo E.1:** Resultados da simulação do sistema otimizado para a coluna AA1D.

<i>Condensador</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidade</i>	<i>Refrervedor</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidade</i>
Temperatura	351,81	K	Temperatura	373,17	K
Carga Térmica	-122253537	Watt	Carga Térmica	146070375	Watt
Taxa de Destilado	3,83	kg/sec	Taxa do Produto de Fundo	43,56	kg/sec
Taxa de Refluxo	111,17	kg/sec	Taxa de Refluxo do Refrervedor	62,71	kg/sec
Razão de Refluxo	30		Razão de Refluxo do Refrervedor	1,44	

## Anexo E.2: Resultados da simulação do sistema otimizado para a coluna AA1D.

<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Carga Térmica</i>	<i>Alimentação Líquida</i>	<i>Alimentação Vaporizada</i>	<i>Produto Vaporizado</i>	<i>Entalpia do Líquido</i>	<i>Entalpia do Vapor</i>	<i>Taxa de Líquido fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Taxa de Vapor fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Vazão mássica de Vapor</i>
	K	N/sqm	Watt	kg/sec	kg/sec	kg/sec	kg/sec	J/kmol	J/kmol	kg/sec	kg/sec
1	351,81	101325	-12225353	0	0	3,83	0	-274103320	-233968794	111,17	0
2	352,04	101325	0	0	0	0	0	-274635141	-234449246	106,80	115
3	352,43	101325	0	0	0	0	0	-275394951	-234823523	100,64	110,63
4	353,13	101325	0	0	0	0	0	-276555136	-235345820	91,40	104,47
5	354,54	101325	0	0	0	0	0	-278404628	-236118205	76,82	95,24
6	359,05	101325	0	0	0	0	0	-280376830	-237251065	59,69	80,65
7	368,03	101325	0	0	0	0	0,94	-280591304	-238593241	53,31	63,52
8	371,72	101325	0	0	0	0	0	-280464600	-239222933	52,39	58,08
9	372,35	101325	0	0	0	0	0	-280438367	-239338463	52,27	57,16
10	372,43	101325	0	55,64	0,62	0	0	-280434671	-239354606	52,27	57,04
11	372,09	101325	0	0	0	0	0	-280449126	-239371240	106,65	57,05
12	372,93	101325	0	0	0	0	7,93	-280412877	-239543518	106,35	55,16
13	373,12	101325	0	0	0	0	0	-280404600	-239580808	106,29	62,79
14	373,16	101325	0	0	0	0	0	-280402839	-239588719	106,28	62,73
15	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402470	-239590376	106,27	62,71
16	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402393	-239590722	106,27	62,71
17	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402377	-239590794	106,27	62,71
18	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402374	-239590809	106,27	62,71

(Continua)

(Conclusão)

<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Carga Térmica</i>	<i>Alimentação Líquida</i>	<i>Alimentação Vaporizada</i>	<i>Produto Vaporizado</i>	<i>Entalpia do Líquido</i>	<i>Entalpia do Vapor</i>	<i>Taxa de Líquido fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Taxa de Vapor fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Vazão mássica de Vapor</i>
19	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590812	106,27	62,71
20	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	106,27	62,71
21	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	106,27	62,71
22	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	106,27	62,71
23	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	106,27	62,71
24	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	106,27	62,71
25	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	106,27	62,71
26	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	106,27	62,71
27	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	106,27	62,71
28	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	106,27	62,71
29	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	106,27	62,71
30	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	106,27	62,71
31	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	106,27	62,71
32	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	106,27	62,71
33	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	106,27	62,71
34	373,17	101325	0	0	0	0	0	-280402373	-239590813	106,27	62,71
35	373,17	101325	142065031	0	0	43,56	0	-280402373	-239590813	43,56	62,71

**Anexo E.3:** Resultados da simulação do sistema otimizado para a coluna AA1D.

<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Deficit de Entalpia</i>	<i>Perda de Exergia</i>	<i>Fator de Carnot</i>	<i>Deficit Real de Entalpia</i>
	K	N/sqm	Watt	Watt		Watt
1	351,81	101325	122253537	62620,40	0,15	122253537
2	352,04	101325	118178419	110896,77	0,15	0
3	352,43	101325	115432391	201447,29	0,15	0
4	353,13	101325	113808158	415909,20	0,16	0
5	354,54	101325	112984876	999009,86	0,16	0
6	359,05	101325	110924768	1992801,09	0,17	0
7	368,03	101325	96136294,4	1127192,03	0,19	0
8	371,72	101325	46157784,4	145739,13	0,20	0
9	372,35	101325	9400354,7	7054,58	0,20	0
10	372,43	101325	1342152,24	271,90	0,20	0
11	372,09	101325	103350558	378521,93	0,20	0
12	372,93	101325	127970238	81360,20	0,20	0
13	373,12	101325	128155879	17327,49	0,20	0
14	373,16	101325	128194801	3631,52	0,20	0
15	373,17	101325	128202932	758,56	0,20	0
16	373,17	101325	128204629	158,34	0,20	0
17	373,17	101325	128204984	33,05	0,20	0
18	373,17	101325	128205057	6,90	0,20	0
19	373,17	101325	128205073	1,44	0,20	0
20	373,17	101325	128205076	0,30	0,20	0
21	373,17	101325	128205077	0,063	0,20	0
22	373,17	101325	128205077	0,013	0,20	0
23	373,17	101325	128205077	0,0027	0,20	0
24	373,17	101325	128205077	0,00057	0,20	0
25	373,17	101325	128205078	0,00012	0,20	0
26	373,17	101325	128205083	0,00012	0,20	0
27	373,17	101325	128205106	0,00012	0,20	0
28	373,17	101325	128205217	0,00012	0,20	0
29	373,17	101325	128205755	0,00012	0,20	0
30	373,17	101325	128208343	0,00012	0,20	0
31	373,17	101325	128220678	0,00012	0,20	0
32	373,17	101325	128279744	0,00012	0,20	0
33	373,17	101325	128566468	0,00012	0,20	0
34	373,17	101325	129966414	0,00012	0,20	0
35	373,17	101325	142065031	0,00012	0,20	142065031

**Anexo E.4:** Resultados da simulação do sistema otimizado para a coluna AA1D.

	<i>VINHO</i>	<i>ASD</i>	<i>VINHACA</i>	<i>PFD</i>	<i>FLEGMA</i>
Etanol	0,079	0,071	2,4371E-19	0,0056	0,0026
Água	2,92	0,032	2,42	0,038	0,43
Fluxo Total kmol/sec	3,00	0,10	2,42	0,044	0,44
Fluxo Total kg/sec	56,26	3,83	43,56	0,94	7,93
Fluxo Total m <sup>3</sup> /sec	0,82	0,0050	0,047	1,29	13,13
Temperatura K	367,15	351,81	373,17	368,03	372,93
Pressão N/m <sup>2</sup>	101325	101325	101325	101325	101325
Fração de Vapor	0,0086	0	0	1	1
Fração Líquida	0,99	1	1	0	0
Fração Sólida	0	0	0	0	0
Entalpia J/kmol	-280250000	-274100000	-280400000	-238590000	-239540000
Entalpia J/kg	-14945000	-7348400	-15565000	-11048000	-13176000
Entalpia Watt	-840830000	-28169000	-678020000	-10395000	-104440000
Entropia J/kmol.K	-151150	-267560	-146840	-56930,61	-38213,51
Entropia J/kg.K	-8060,48	-7172,90	-8150,88	-2636,22	-2101,94
Desidade kmol/m <sup>3</sup>	3,65	20,37	50,97	0,0337171	0,033
Desidade kg/m <sup>3</sup>	68,39	759,81	918,27	0,73	0,60
Média PM	18,75	37,30	18,02	21,60	18,18
Liq. Vol. 60F <sup>o</sup> m <sup>3</sup> /sec	0,057	0,0047	0,044	0,0010	0,0080

**Anexo F.1:** Resultados da simulação do sistema otimizado para a coluna B1B.

<i>Nome</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidade</i>	<i>Nome</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidade</i>
Temperatura	351,31	K	Temperature	352,87	K
Carga Térmica	-		Temperatura	8761067.26	Watt
Taxa de Destilado	17703203,7	Watt	Carga Térmica	5,034	kg/sec
Taxa de Refluxo	3,83	kg/sec	Taxa do Produto de Fundo	8,02	kg/sec
Razão de Refluxo	15,33	kg/sec	Taxa de Refluxo do Refervedor	1,59	
	4		Razão de Refluxo do Refervdor		

## Anexo F.2: Resultados da simulação do sistema otimizado para a coluna B1B.

<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Carga Térmica</i>	<i>Alimentação Líquida</i>	<i>Alimentação Vaporizada</i>	<i>Produto Líquido</i>	<i>Entalpia do Líquido</i>	<i>Entalpia do Vapor</i>	<i>Taxa de Líquido fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Taxa de Vapor fornecida para o estágio posterior</i>
	K	N/sqm	Watt	kg/sec	kg/sec	kg/sec	J/kmol	J/kmol	kg/sec	kg/sec
1	351,31	101325	-17703204	0	0	3,833333	-272104269	-232888115	15,33	0
2	351,31	101325	0	0	0	0	-272129738	-232916201	15,31	19,17
3	351,32	101325	0	0	0	0	-272154459	-232932435	15,28	19,14
4	351,32	101325	0	0	0	0	-272178521	-232948177	15,26	19,12
5	351,32	101325	0	0	0	0	-272202009	-232963486	15,23	19,09
6	351,32	101325	0	0	0	0	-272224997	-232978414	15,21	19,07
7	351,32	101325	0	0	0	0	-272247557	-232993013	15,19	19,04
8	351,33	101325	0	0	0	0	-272269752	-233007325	15,16	19,02
9	351,33	101325	0	0	0	0	-272291646	-233021395	15,14	19,00
10	351,33	101325	0	0	0	0	-272313296	-233035261	15,12	18,98
11	351,33	101325	0	0	0	0	-272334759	-233048960	15,10	18,95
12	351,33	101325	0	0	0	0	-272356088	-233062530	15,08	18,93
13	351,34	101325	0	0	0	0	-272377336	-233076003	15,06	18,91
14	351,34	101325	0	0	0	0	-272398556	-233089414	15,03	18,89
15	351,34	101325	0	0	0	0	-272419797	-233102795	15,01	18,87
16	351,34	101325	0	0	0	0	-272441113	-233116178	14,99	18,85

(Continua)

(Continuação)

<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Carga Térmica</i>	<i>Alimentação Líquida</i>	<i>Alimentação Vaporizada</i>	<i>Produto Líquido</i>	<i>Entalpia do Líquido</i>	<i>Entalpia do Vapor</i>	<i>Taxa de Líquido fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Taxa de Vapor fornecida para o estágio posterior</i>
17	351,35	101325	0	0	0	0	-272462555	-233129597	14,97	18,82
18	351,35	101325	0	0	0	0	-272484178	-233143083	14,95	18,80
19	351,35	101325	0	0	0	0	-272506035	-233156670	14,92	18,80
20	351,36	101325	0	0	0	0	-272528186	-233170393	14,90	18,76
21	351,36	101325	0	0	0	0	-272550690	-233184288	14,88	18,74
22	351,36	101325	0	0	0	0	-272573611	-233198391	14,86	18,71
23	351,37	101325	0	0	0	0	-272597019	-233212742	14,83	18,69
24	351,37	101325	0	0	0	0	-272620987	-233227383	14,81	18,67
25	351,38	101325	0	0	0	0	-272645595	-233242360	14,78	18,64
26	351,38	101325	0	0	0	0	-272670931	-233257721	14,76	18,62
27	351,38	101325	0	0	0	0	-272697091	-233273520	14,73	18,59
28	351,39	101325	0	0	0	0	-272724183	-233289815	14,70	18,56
29	351,40	101325	0	0	0	0	-272752324	-233306671	14,67	18,54
30	351,40	101325	0	0	0	0	-272781649	-233324159	14,65	18,51
31	351,41	101325	0	0	0	0	-272812308	-233342361	14,61	18,48
32	351,41	101325	0	0	0	0	-272844474	-233361367	14,58	18,45
33	351,42	101325	0	0	0	0	-272878342	-233381280	14,55	18,41
34	351,43	101325	0	0	0	0	-272914139	-233402216	14,51	18,38

(Continua)

(Continuação)

<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Carga Térmica</i>	<i>Alimentação Líquida</i>	<i>Alimentação Vaporizada</i>	<i>Produto Líquido</i>	<i>Entalpia do Líquido</i>	<i>Entalpia do Vapor</i>	<i>Taxa de Líquido fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Taxa de Vapor fornecida para o estágio posterior</i>
35	351,44	101325	0	0	0	0	-272952126	-233424312	14,47	18,34
36	351,45	101325	0	0	0	0	-272992608	-233447721	14,43	18,31
37	351,46	101325	0	0	0	0	-273035947	-233472627	14,39	18,27
38	351,47	101325	0	0	0	0	-273082568	-233499240	14,34	18,22
39	351,48	101325	0	0	0	0	-273132982	-233527812	14,29	18,17
40	351,50	101325	0	0	0	0	-273187802	-233558643	14,24	18,12
41	351,51	101325	0	0	0	0	-273247780	-233592090	14,18	18,07
42	351,53	101325	0	0	0	0	-273313836	-233628591	14,11	18,01
43	351,55	101325	0	0	0	0	-273387121	-233668678	14,04	17,94
44	351,58	101325	0	0	0	0	-273469085	-233713013	13,95	17,87
45	351,61	101325	0	0,38	7,93	0	-273561586	-233762425	13,86	17,79
46	351,64	101325	0	0	0	0	-273667039	-233817970	13,76	17,69
47	351,69	101325	0	0	0	0	-273788650	-233881010	13,63	17,59
48	351,74	101325	0	0	0	0	-273930755	-233953333	13,49	17,47
49	351,81	101325	0	0	0	0	-274099371	-234037340	13,33	17,33
50	351,89	101325	0	0	0	0	-274303134	-234136314	13,12	17,16
51	352,12	101325	0	0	0	0	-274790729	-234246860	13,43	16,95
52	352,12	101325	0	0	0	0	-274790755	-234239015	13,43	8,40

(Continua)

										(Conclusão)
<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Carga Térmica</i>	<i>Alimentação Líquida</i>	<i>Alimentação Vaporizada</i>	<i>Produto Líquido</i>	<i>Entalpia do Líquido</i>	<i>Entalpia do Vapor</i>	<i>Taxa de Líquido fornecida para o estágio posterior</i>	<i>Taxa de Vapor fornecida para o estágio posterior</i>
53	352,12	101325	0	0	0	0	-274790800	-234239047	13,43	8,40
54	352,12	101325	0	0	0	0	-274790877	-234239103	13,43	8,40
55	352,12	101325	0	0	0	0	-274791008	-234239199	13,43	8,40
56	352,12	101325	0	0	0	0	-274791235	-234239365	13,43	8,40
57	352,12	101325	0	0	0	0	-274791624	-234239649	13,43	8,40
58	352,12	101325	0	0	0	0	-274792292	-234240136	13,43	8,40
59	352,12	101325	0	0	0	0	-274793440	-234240973	13,43	8,40
60	352,12	101325	0	0	0	0	-274795412	-234242412	13,43	8,39
61	352,12	101325	0	0	0	0	-274798800	-234244883	13,42	8,39
62	352,12	101325	0	0	0	0	-274804624	-234249128	13,42	8,39
63	352,13	101325	0	0	0	0	-274814637	-234256424	13,41	8,38
64	352,14	101325	0	0	0	0	-274831869	-234268968	13,39	8,37
65	352,15	101325	0	0	0	0	-274861567	-234290549	13,36	8,36
66	352,18	101325	0	0	0	0	-274912871	-234327723	13,31	8,32
67	352,22	101325	0	0	0	0	-275001866	-234391892	13,21	8,27
68	352,30	101325	0	0	0	0	-275157546	-234503051	13,05	8,18
69	352,87	101325	8756870,5	0	0	5,03	-276157047	-234667614	5,034	8,02

**Anexo F.3:** Resultados da simulação do sistema otimizado para a coluna B1B.

<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Deficit de Entalpia</i>	<i>Perda de Exergia</i>	<i>Fator de Carnot</i>	<i>Déficit Real de Entalpia</i>
	K	N/sqm	Watt	Watt		Watt
1	351,31	101325	17703203,7	55,99	0,15	17703203,7
2	351,31	101325	14161961,6	60,45	0,15	0
3	351,32	101325	11741267,2	56,10	0,15	0
4	351,32	101325	9990774,72	52,39	0,15	0
5	351,32	101325	8672515,14	49,22	0,15	0
6	351,32	101325	7648832,2	46,51	0,15	0
7	351,32	101325	6834637,53	44,21	0,15	0
8	351,33	101325	6174556,04	42,25	0,15	0
9	351,33	101325	5631035,1	40,60	0,15	0
10	351,33	101325	5177736,9	39,22	0,15	0
11	351,33	101325	4795665,03	38,08	0,15	0
12	351,33	101325	4470791,12	37,17	0,15	0
13	351,34	101325	4192545,23	36,47	0,15	0
14	351,34	101325	3952824,69	35,96	0,15	0
15	351,34	101325	3745325,02	35,64	0,15	0
16	351,34	101325	3565077,54	35,50	0,15	0
17	351,35	101325	3408122,8	35,53	0,15	0
18	351,35	101325	3271275,77	35,75	0,15	0
19	351,35	101325	3151954,22	36,15	0,15	0
20	351,36	101325	3048051,39	36,73	0,15	0
21	351,36	101325	2957840,39	37,52	0,15	0
22	351,36	101325	2879901,65	38,52	0,15	0
23	351,37	101325	2813067,3	39,75	0,15	0
24	351,37	101325	2756378,3	41,24	0,15	0
25	351,38	101325	2709051,28	43,02	0,15	0
26	351,38	101325	2670452,72	45,11	0,15	0
27	351,38	101325	2640079,13	47,58	0,15	0
28	351,39	101325	2617541,74	50,46	0,15	0
29	351,40	101325	2602555,15	53,84	0,15	0
30	351,40	101325	2594929,13	57,80	0,15	0
31	351,41	101325	2594563,13	62,43	0,15	0
32	351,41	101325	2601443,41	67,88	0,15	0
33	351,42	101325	2615642,43	74,31	0,15	0
34	351,43	101325	2637320,52	81,93	0,15	0
35	351,44	101325	2666730	91,00	0,15	0

(Continua)

(Conclusão)						
<i>Estágio</i>	<i>Temperatura</i>	<i>Pressão</i>	<i>Deficit de Entalpia</i>	<i>Perda de Exergia</i>	<i>Fator de Carnot</i>	<i>Déficit Real de Entalpia</i>
36	351,45	101325	2704221,78	101,88	0,15	0
37	351,46	101325	2750254,87	115,01	0,15	0
38	351,47	101325	2805409,19	131,00	0,15	0
39	351,48	101325	2870402,37	150,62	0,15	0
40	351,50	101325	2946111,34	174,94	0,15	0
41	351,51	101325	3033600	205,44	0,15	0
42	351,53	101325	3134154,46	244,13	0,15	0
43	351,55	101325	3249327,89	293,92	0,15	0
44	351,58	101325	3380997,94	358,97	0,15	0
45	351,61	101325	3531440,3	445,42	0,15	0
46	351,64	101325	3703423,39	562,59	0,15	0
47	351,69	101325	3900330,47	724,98	0,15	0
48	351,74	101325	4126317,18	955,85	0,15	0
49	351,81	101325	4386513,35	1293,99	0,15	0
50	351,89	101325	4688128,34	1807,35	0,15	0
51	352,12	101325	520400,925	29414,27	0,15	0
52	352,12	101325	406,868523	0,0013	0,15	0
53	352,12	101325	698,819916	0,0022	0,15	0
54	352,12	101325	1200,26698	0,0038	0,15	0
55	352,12	101325	2061,54469	0,0068	0,15	0
56	352,12	101325	3540,88258	0,013	0,15	0
57	352,12	101325	6081,86617	0,027	0,15	0
58	352,12	101325	10446,5616	0,060	0,15	0
59	352,12	101325	17944,4013	0,14	0,15	0
60	352,12	101325	30826,0044	0,37	0,15	0
61	352,12	101325	52961,6336	1,02	0,15	0
62	352,12	101325	91012,485	2,87	0,15	0
63	352,13	101325	156459,96	8,25	0,15	0
64	352,14	101325	269141,74	23,97	0,15	0
65	352,15	101325	463469,65	70,19	0,15	0
66	352,18	101325	799509,174	206,43	0,15	0
67	352,22	101325	1383052,64	609,40	0,15	0
68	352,30	101325	2405177,76	1810,45	0,15	0
69	352,87	101325	8756870,54	6972,61	0,16	8756870,54

**Anexo F.4:** Resultados da simulação do sistema otimizado para a coluna B1B.

	<b>FLEGMA</b>	<b>PFD</b>	<b>HIDRAT</b>	<b>FLEGMACA</b>
Etanol	0,15	0,0081	0,079	0,080
Água	0,06	0,032	0,012	0,077
Fluxo Total kmol/sec	0,21	0,040	0,090	0,16
Fluxo Total kg/sec	7,93	0,94	3,83	5,03
Fluxo Total m <sup>3</sup> /sec	6,11	0,36	0,0052	0,0064
Temperatura K	367,91	359,63	351,31	352,87
Pressão N/m <sup>2</sup>	101325	101325	101325	101325
Fração de Vapor	1	0,3143882	0	0
Fração Líquida	0	0,6856118	1	1
Fração Sólida	0	0	0	0
Entalpia J/kmol	-233010000	-266530000	-272100000	-276160000
Entalpia J/kg	-6085300	-11236000	-6413400	-8575300
Entalpia Watt	-48234000	-10571000	-24585000	-43167000
Entropia J/kmol.K	-158210	-147680	-300540	-235850
Entropia J/kg.K	-4131,63	-6225,50	-7083,59	-7323,55
Desidade kmol/m <sup>3</sup>	0,034	0,11	17,52	24,27
Desidade kg/m <sup>3</sup>	1,30	2,61	743,39	781,48
Média PM	38,29	23,72	42,43	32,20
Liq. Vol. 60F° m <sup>3</sup> /sec	0,0097	0,0010	0,0048	0,0060

**Anexo G.1:** Fluxo de caixa e resultado do *pay-back*.

<i>Ano</i>	<i>Despesa</i>	<i>Receita</i>	<i>Saldo a recuperar</i>
0	-15665,11	0	-15665,11
1	0	11020,51	-4644,60
2	0	11020,51	6375,91
3	0	11020,51	17396,42
4	0	11020,51	28416,93
5	0	11020,51	39437,44
6	0	11020,51	50457,95
7	0	11020,51	61478,46
8	0	11020,51	72498,97
9	0	11020,51	83519,48
10	0	11020,51	94539,99
11	0	11020,51	105560,50
12	0	11020,51	116581,01
13	0	11020,51	127601,52
14	0	11020,51	138622,03
15	0	11020,51	149642,54
16	0	11020,51	160663,06
17	0	11020,51	171683,57
18	0	11020,51	182704,08
19	0	11020,51	193724,59
20	0	11020,51	204745,10
21	0	11020,51	215765,61
22	0	11020,51	226786,12
23	0	11020,51	237806,63
24	0	11020,51	248827,14
25	0	11020,51	259847,65
26	0	11020,51	270868,16
27	0	11020,51	281888,67
28	0	11020,51	292909,18
29	0	11020,51	303929,69
30	0	11020,51	314950,20