

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

***MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO SISTEMA DE
EVAPORADORES DE MISCELA DE UMA
DESTILARIA DE OLEO DE SOJA***

Eduardo Rasi de Almeida Prado
Engenheiro Químico, UEM

Orientador: Prof. Dr. Luiz Mário de Matos Jorge
Co-orientador: Prof. Dr. Paulo Roberto Paraiso

Dissertação de Mestrado submetida à
Universidade Estadual de Maringá,
Como parte dos requisitos necessários
Para a obtenção do grau de mestre em
Engenharia Química, área de
Desenvolvimento de Processos.

Maringá – PR – Brasil

Maio de 2013

Sumário

1.	INTRODUÇÃO.....	17
1.1	Problemática.....	17
1.2	Objetivos	23
1.3	Metodologia de trabalho	24
1.4	Estrutura do trabalho	25
2.	REVISÃO DE LITERATURA	26
2.1	A Soja.....	26
2.2	Etapas do processo de fabricação de óleo de soja	31
2.2.1	Recepção e armazenamento dos grãos	33
2.1.2.	Ressecagem	34
2.1.3	Preparação do Grão da Soja	35
2.1.4	Extração do Óleo da Soja.....	40
2.1.4.1	Tipos de Extratores que utilizam hexano	44
2.1.4.1.1	Extratores por Percolação.....	45
2.1.4.1.2	Extrator Rotatório.....	45
2.1.4.1.3	Extrator a Corrente e Cestos.....	46
2.1.4.1.4	Extrator de Correias Perfuradas	47
2.1.4.1.5	Extrator tipo Filtro.....	48
2.1.4.1.6	Extratores por Imersão	49
2.1.5	Separação do Óleo e Solvente.....	49
2.1.6	Dessolventização e Tostagem da Torta	54
2.1.7	Separação solvente-agua	58
2.1.8	Secagem do farelo	58
2.1.9	Peletização do Farelo de Soja.....	59
2.1.10	Degomagem do Óleo Bruto.....	59

2.2	Obtenção do Óleo bruto: destilação da miscela	61
2.2.1.	Separação do Óleo de Soja do Solvente Hexano	65
2.2.2.	Evaporadores	70
2.2.2.1.	Classificação dos Equipamentos para vaporização	70
2.2.2.2.	Comparação entre a evaporação numa planta de potencia e a evaporação química	71
2.2.2.3.	Evaporadores Químicos	74
2.2.2.3.1.	Evaporadores com tubo horizontal.....	74
2.2.2.3.2.	Evaporador com tubos vertical fechado (<i>Calandra</i>)	75
2.2.2.3.3.	Evaporador vertical tipo cesta	76
2.2.2.3.4.	Evaporadores verticais com tubos longos	77
2.2.2.4.	Evaporadores com circulação forçada.....	78
2.2.2.5.	Evaporadores do tipo casco-tubo na obtenção de óleo de soja	80
2.2.2.6.	Evaporadores do tipo " <i>Stripper</i> "	83
2.3.	Equilíbrio Líquido-Vapor do sistema óleo de soja/hexano	85
2.3.1.	Introdução	85
2.3.2.	Equilíbrio Líquido-Vapor.....	86
2.3.3.	A abordagem " γ - ϕ "	87
2.3.4.	Método UNIFAC.....	88
2.3.5.	Caracterização dos componentes.....	92
2.3.5.1.	Óleo de Soja	92
2.3.5.2.	Mistura Binária.....	93
2.4.	Modelo matemático para obter óleo bruto	94
2.4.1.	Introdução	94
2.5.	Software para simulação: modelagem, simulação e análise do processo de destilação da miscela no <i>HYSYS</i>	95
3.	MODELAGEM SIMULAÇÃO E ANÁLISE DO OLEO DE SOJA.....	100
3.2.	Introdução	100
3.3.	Óleo de soja.....	101

3.4.	Modelagem do óleo de soja como um composto-hipotético no HYSYS.....	104
3.5.	Resultados e análises parcial.....	108
3.4.1	Densidade mássica.....	108
3.4.2	Capacidade calorífica.....	110
3.4.3	Tensão superficial.....	111
3.4.4	Condutividade térmica.....	113
3.4.5	Viscosidade dinâmica.....	114
3.5	Conclusões parciais.....	115
4	Modelagem e simulação da miscela de óleo de soja e hexano.....	116
4.1	Introdução.....	116
4.2	Modelagem da miscela hipotética de óleo de soja e hexano.....	118
4.3	Resultados e discussões parciais.....	119
4.3.1	Densidade mássica.....	119
4.3.2	Viscosidade dinâmica.....	122
4.4	Conclusões parciais.....	125
5.	Modelagem, simulação e análise do sistema de evaporação de miscela do processo de destilação da COCAMAR.....	125
5.1.	Introdução.....	125
5.2.	Modelagem do sistema de evaporadores de destilação da miscela da COCAMAR....	131
5.2.1.	Características do processo de destilação da miscela na COCAMAR.....	131
5.2.2.	Modelagem do sistema de evaporação da miscela no HYSYS.....	132
5.2.3.	Modelagem convencional do modelo do sistema de evaporação de miscela.....	134
5.3.	Resultados e discussões parciais.....	138
5.3.1.	Modelagem do sistema de evaporadores da Cocamar, na destilação da miscela, utilizando o <i>HYSYS</i>	138
5.3.2.	Avaliação do modelo de evaporadores na destilação da miscela, da COCAMAR, implementado no <i>HYSYS</i>	142
5.3.3.	Simulações com o modelo implementado no HYSYS.....	149
5.3.3.1.	Avaliação da influencia da temperatura da miscela na entrada do sistema de evaporação	149

5.3.3.2. Avaliação da concentração de óleo na miscela na entrada do sistema de evaporação.....	150
5.3.3.3. Avaliação da influencia da pressão de operação nos evaporadores do sistema de concentração de miscela.....	153
5.4. Conclusões parciais.....	156
6. ANALISE GLOBAL DO SISEMA DE DESTILAÇÃO DA MISCELA DA COCAMAR.....	157
6.1. Introdução	157
6.2. Modelo do sistema de destilação da miscela da COCAMAR no HYSYS.....	158
6.3 Resultados e discussões parciais	160
6.3.1 Avaliação do consumo de vapor de aquecimento	160
6.4 Conclusão parcial	161
7. CONCLUSÕES SOBRE A MODELAGEM, SIMULAÇÃO E ANÁLISE DA DESTILAÇÃO DA MISCELA DA COCAMAR.....	161
8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	164
APÊNDICE A: A SOJA.....	173
A.1. COMPOSIÇÃO DA SOJA	173
A.1.1. Proteínas	173
A.1.2. Carboidratos	175
A.1.3. Óleo.....	176
A.1.3.1. ÁCIDOS GRAXOS PRESENTES NOS TRIGLICERÍDEOS	176
A.1.3.2. ÁCIDOS GRAXOS LIVRES.....	176
A.1.3.3. FOSFATÍDEOS	177
A.1.3.4. ESTERÓIS	178
A.1.3.5. Tocoferóis.....	178
A.1.3.6. HIBROCARBONETOS.....	178
A.1.3.7. Metais	179
A.1.3.8. Cinzas	179
APÊNDICE B: MÉTODOS DE SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS	180
B.1. Método de Diferenças Finitas.....	180

B.1.1 - Aproximação de derivadas por diferenças	180
B.1.2 - Métodos de Euler	182
B.1.3 - Método de Crank-Nicholson	183
B.1.4 - Método Modificado de Euler	183
B.1.5 - Métodos de Runge-Kutta	184
B.2 – Erros da Solução Aproximada	185
B.3 – Consistência.....	185
B.4 – Estabilidade	186
B.5 – Rigidez Numérica	186
APÊNDICE C: MONTANDO UMA SIMULÇÃO NO HYSYS	188
C.1. Principais unidades utilizadas e disponíveis no <i>HYSYS</i>	191
C.1.1. Separadores.....	191
C.1.2. Trocadores de calor	192
C.1.3. Compressores	192
C.1.4. Expansor	192
C.1.5. Misturador	193
C.1.6. Coluna de destilação.....	193
C.1.7. Adjust	193
C.1.8. Spreadsheet.....	194

FIGURAS

Figura 1.1 Evolução da produção e área plantada da soja no Brasil.	19
Figura 2.1 Perspectiva de crescimento da produção de soja.	29
Figura 2.2 Capacidade de processamento da soja, por estado brasileiro.....	30
Figura 2.3 Fluxograma simplificado do processamento do grão de soja	33
Figura 2.4 Torre de secagem de grão de soja.	34
Figura 2.5 a: Alimentador de rolo. Figura 2.5 b: alimentador vibratório. ...	38
Figura 2.6 esquema geral da obtenção do óleo bruto de soja.	41
Figura 2.7: Mecanismo de extração do óleo por solvente.....	43
Figura 2.8: Extrator rotatório, tipo reflex	46
Figura 2.9 Extrator a corrente e cesto.....	47
Figura 2.10 Extrator de correias perfuradas, conhecido por extrator De smet.....	48
Figura 2.11 Extrator tipo filtro.	48
Figura 2.12 Curva de pressão de vapor do hexano.....	54
Figura 2.13 Fluxo geral da operação de dessolventização e tostagem.	55
Figura 2.14 Desenho dos pratos internos do dessolventizador e tostador.....	56
Figura 2.15 Detalhes do dessolventizador e tostador: pratos superiores para remover solvente e pratos inferiores para tostagem.	57
Figura 2.16 Degomagem com água, para óleos comestíveis.....	60
Figura 2.17 Fluxograma do projeto original de destilação da miscela.	66
Figura 2.18 Fluxograma do segundo sistema de destilação da miscela	67
Figura 2.19 Esquema do terceiro sistema de destilação da miscela	68
Figura 2.20 Fluxograma do processo de destilação da miscela.....	69
Figura 2.21 Evaporador químico com quatro estágios de operação dispostos para alimentação frontal e realimentação.....	72
Figura 2.22 Evaporador com tubo horizontal.....	75
Figura 2.23 Evaporador com recipiente fechado tipo calandra. (<i>adaptado de KERN,</i> <i>1980</i>).....	76
Figura 2.24 Disposição das chicanas num evaporador tipo calandra, com as direções de escoamento.	76
Figura 2.25: Evaporador tipo cesta	77

Figura 2.26: Evaporador vertical com tubo longo.	78
Figura 2.27: Evaporador Vertical com tubo longo com reciclagem.	78
Figura 2.28: Evaporador com circulação forçada com elemento aquecedor interno vertical.	79
Figura 2.29: Evaporador om circulação forçada com elemento externo vertical.	79
Figura 2.30: Evaporador com circulação forçada com elemento externo horizontal.	80
Figura 2.31 Esquema do evaporador vertical de tubos verticais longos.	81
Figura 2.32 Esquema do evaporador do tipo " <i>stripper</i> ".	84
Figura 2.33 Triglicerídeo que representa o óleo de soja hexano.	92
Figura 2.34 Molécula de hexano.	93
Figura 2.35 Sistema de remoção do solvente da miscela. DT: dessolventizador-tostador da torta e três estágios de evaporação.	94
Figura 3.1 Formação de uma molécula de triacilglicerol, R1, R2 e R3 são cadeias carbônicas de ácidos graxos, saturadas ou insaturadas.	102
Figura 3.2 Estruturas dos Ácidos graxos presentes no óleo de soja.	104
Figura 3.3 Tela de serviço do HYSYS para modelar compostos hipotéticos, utilizando a teoria de contribuição de grupos do método UNIFAC.	106
Figura 3.4 Tela de serviço do HYSYS para modelar a corrente de óleo hipotético de soja.	106
Figura 3.5 tela de serviço do HYSYS na ferramenta <i>Databook</i> , aba <i>Variable</i>	106
Figura 3.6 Tela de serviço do HYSYS da ferramenta <i>Databook</i> , aba <i>case studies</i>	108
Figura 3.7 Comparação da densidade mássica do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS e os resultados da literatura.	109
Figura 3.8 Comparação da densidade mássica do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS com os resultados da literatura.	109
Figura 3.9 Perfil da capacidade calorífica do oleo de soja hipotético simulado no HYSYS e resultados de literatura.	111
Figura 3.10 Comparação da Capacidade Calorífica do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS com resultados da literatura.	111
Figura 3.11 Perfil da Tensão superficial do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS e dos resultados da literatura.	112
Figura 3.12 Comparação da tensão superficial do óleo de soja hipotético no HYSYS com resultados da literatura.	112

Figura 3.13 Perfil da condutividade térmica do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS e resultados da literatura.....	113
Figura 3.14 Comparação da condutividade térmica do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS com resultados da literatura	114
Figura 3.15 Comparação da viscosidade dinâmica do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS e resultados da literatura.....	115
Figura 3.16 Comparação da viscosidade dinâmica do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS com resultados da literatura	115
Figura 4.1 integrantes da corrente de miscela hipotética de óleo de soja e hexano no HYSYS.....	118
Figura 4.2 Comportamento da densidade mássica na miscela a 25°C formada com o óleo de soja hipotético no HYSYS e os resultados da literatura.....	120
Figura 4.3 Comparação da densidade mássica na miscela a 25°C formada com óleo de soja hipotético no HYSYS e os resultados da literatura.....	120
Figura 4.4 Comportamento da densidade mássica na miscela a 40°C formada com óleo de soja hipotético no HYSYS e dos resultados da literatura.....	121
Figura 4.5 Comparação da densidade mássica na miscela formada com o óleo de soja hipotético simulado no HYSYS e resultados da literatura.....	122
Figura 4.6 Comportamento da viscosidade dinâmica na miscela a 25°C formada por óleo de soja hipotético simulado no HYSYS dos resultados da literatura.....	123
Figura 4.7 Comparação da viscosidade dinâmica na miscela formada por óleo de soja hipotético simulado no HYSYS com resultados da literatura, a 25°C.	123
Figura 4.8 Comportamento da viscosidade dinâmica na miscela a 37,8°C formada por óleo de soja hipotético simulado no HYSYS dos resultados da literatura.	124
Figura 4.9 Comparação da viscosidade dinâmica na miscela formada por óleo de soja hipotético simulado no HYSYS com resultados da literatura, a 37,8°C.	124
Figura 5.1 Esquema das correntes de entrada e saída do evaporador.	126
Figura 5.2 Evaporador típico da concentração de miscela.	127
Figura 5.3 Parte interna do evaporador	128
Figura 5.4 Visão do processo de concentração (destilação) da micela na COCAMAR.	132
Figura 5.5 Evaporadores representados no HYSYS	133

Figura 5.6 Modelagem do sistema de evaporadores da COCAMAR, na destilação da miscela, utilizando HYSYS.....	139
Figura 5.7 Comparação entre as vazões estimadas em cada evaporador	143
Figuras 5.8 Coeficiente Global de transferência de calor para cada evaporador.	143
Figura 5.9 Influencia da temperatura, na miscela de saída no evaporador 1.....	144
Figura 5.10 Influencia da temperatura, na miscela de saída no evaporador 2.....	1492
Figura 5.11 Influencia da temperatura, na miscela de saída no evaporador 3.....	145
Figura 5.12 Comparação da influencia da temperatura da miscela alimentada na vazão de fluido de aquecimento no evaporador 1.	146
Figura 5.13 Comparação da influencia da temperatura da miscela alimentada na vazão de fluido de aquecimento no evaporador.....	149
Figura 5.14 Comparação da influencia da temperatura da miscela alimentada na vazão de fluido de aquecimento no evaporador 3	149
Figura 5.15 Comparação da influencia da temperatura da miscela alimentada no coeficiente global de transferência de calor no evaporador 2.	148
Figura 5.16 Comparação da influencia da temperatura da miscela alimentada no coeficiente global de transferência de calor no evaporador 3.	148
Figura 5.17 Influencia da temperatura da miscela na entrada do sistema de evaporação	150
Figura 5.18 Influencia da concentração de óleo a miscela na entrada do sistema de evaporação.....	Erro! Indicador não definido.
Figura 5.19 Influencia da concentração de óleo na miscela na entrada do evaporador 1	151
Figura 5.20 Influencia da concentração de óleo na miscela na entrada do evaporador 2	152
Figura 5.21 Influencia da concentração de óleo na miscela na entrada do evaporador 3	153
Figura 5.22 Influencia da pressão de operação nos evaporadores do sistema de evaporação.....	153

Figura 5.23 Influencia da pressão de operação nos evaporadores do sistema de evaporação.....	151
Figura 5.24 Influencia da pressão de operação nos evaporadores do sistema de evaporação.....	155
Figura 5.25 Influencia da pressão de operação no evaporador 3	156
Figura 6.1 Modelo global do sistema de destilação da miscela da COCAMAR no HYSYS.....	160

TABELAS

Tabela 1.1 Evolução da Soja no Brasil.....	18
Tabela 2.1 Composição da fração de hexano, utilizada para extração de oleaginosas..	52
Tabela 2.2 Pressões de vapor das soluções de óleo de soja - hexano. (<i>Adaptado de SMITH e WECHTER, 1950</i>).....	53
Tabela 2.3 Composição média do óleo bruto e refinado.	61
Tabela 2.4 Composição dos ácidos graxos do óleo de soja.	62
Tabela 2.5: Relação do ponto de fulgor com o hexano residual.	85
Tabela 2.6: Parâmetros de método UNIFAC. (<i>Adaptado de GMEHLING, 1982</i>).	93
Tabela 3.1 Composição do óleo de soja bruto e refinado.	102
Tabela 3.2 Composição dos ácidos graxos no óleo de soja, utilizado na modelagem e simulação do processo.....	103
Tabela 5.1 Parâmetros operacionais da COCAMAR como referencia na simulação.	132
Tabela 5.2 Avaliação das previsões do <i>HYSYS</i> , frente às medidas operacionais do 1º Evaporador.	140
Tabela 5.3 Avaliação das previsões do <i>HYSYS</i> , frente às medidas operacionais do 2º Evaporador.	140
Tabela 5.4 Avaliação das previsões do <i>HYSYS</i> , frente às medidas operacionais do 3º Evaporador.	141
Tabela 6.1 Consumo de vapor d'água nas principais etapas do processo de extração de óleo de soja a solvente.....	158
Tabela 6.2 Consumo de vapor na destilação da miscela	161

LISTA DE SIMBOLOS

Símbolos

A	(m ²)	Área de troca térmica
BPR	(°C)	Boiling point rise
C	(Kg.s ⁻¹)	Corrente de condensado gerado no evaporador
C _p	(kJ.Kg ⁻¹ .°C ⁻¹)	Capacidade calorífica mássica
F	(Kg.s ⁻¹)	Corrente de miscela
h	(J.Kg ⁻¹)	Entalpia
k	(W m ⁻¹ .°C ⁻¹)	Condutividade térmica
P	(mmHg, KPa ou	Pressão do sistema
Q	(W)	Taxa de energia
S	(Kg.s ⁻¹)	Corrente de fluido de aquecimento consumido
T	(°C)	Temperatura
U	(W.m ⁻² .°C ⁻¹)	Coefficiente global de transferência de calor
V	(Kg.s ⁻¹)	Corrente de vapor gerado no topo do
x	(%)	Fração mássica

Letras gregas

ρ	(Kg.m ⁻³)	Densidade mássica
σ	(Kg.s ⁻² .°C ⁻¹)	Tensão superficial
μ	(Kg.m ⁻¹ .s ⁻¹)	Viscosidade dinâmica

Índices

1,2 e 3	Numero sequencial dos evaporadores no
C	Corrente de condensado no evaporador
e	Entrada no sistema
ext	Externa
F	Corrente de miscela alimentada
fg	Índice para entalpia de vaporização
h	Hexano
HYSYS	Obtido do modelo implementado no HYSYS
i	Numero sequencial do evaporador no processo de destilação das miscela
literatura	Comparação de um parâmetro por meio de trabalhos pesquisados
LMDT	Diferença media logarítmica de temperaturas no evaporador
m	Média

Miscela de oleo de soja hipotético	Miscela formada pelo óleo de soja hipotético modelado no HYSYS
Miscela hipotética <i>Índice (continuação)</i>	Miscela formada pelo óleo de soja hipotético
Modelo	Modelo matemático desenvolvido através de equações de balanço de massa e de energia e relação de equilíbrio de fases
o	Óleo de soja
Óleo de soja, miscela	Participação do componente óleo de soja na miscela
Óleo hipotético	Óleo hipotético de soja modelado no HYSYS a partir da fração dos ácidos graxos presentes no óleo de soja real
Óleo, miscela	Participação do componente óleo de soja na miscela
s	Saída do sistema
S	Corrente de fluido de aquecimento
V	Corrente de vapor gerado no evaporador

RESUMO

O processo de obtenção de óleo de soja é um dos mais importantes setores do complexo agroindustrial brasileiro, sendo constituído pelas etapas de secagem, preparação, extração, destilação e recuperação do solvente. Os seus produtos são utilizados em siderúrgicas, indústrias de cosméticos e sua matéria-prima, na produção de alimentos para consumo humano. Com o crescimento da produção industrial de óleo de soja, a redução de custos e desperdícios é fundamental para uma indústria ser competitiva no mercado global. Essa redução de custos pode ocorrer na etapa de destilação, onde ocorre um dos maiores consumo de energia deste processo, sendo esta constituída por três evaporadores e um “*stripper*” e tem como objetivo separar o óleo bruto do solvente hexano com o aquecimento da mistura. Neste contexto, a modelagem e simulação de processos utilizando simuladores como o HYSYS, se torna atrativa devido à possibilidade de analisar uma redução de custos de vapor, pois é o insumo com maior valor pago no custo industrial. Desenvolveu-se um modelo para o óleo de soja, para a miscela e para o sistema de evaporadores de miscela, o qual foi validado com os dados reais de um processo e valores encontrados na literatura. Os resultados obtidos no HYSYS, mostraram que a modelagem e simulação utilizando o HYSYS estão coerentes com as condições reais do processo e próximo aos valores encontrados na literatura, podendo ser utilizado como ferramenta de análise e simulação da etapa de concentração da miscela nos evaporadores, no processo de obtenção de óleo de soja, disponibilizando a análise do processo, antes da realização qualquer mudanças físicas no processo de destilação, podendo ocorrer um grande investimento, sem gerar um retorno esperado.

Palavras-chaves: soja, separação, modelagem e simulação.

ABSTRACT

The process for obtaining soybean oil is one of the most important sectors of Brazilian agroindustrial complex, consisting the steps of drying, preparation, extraction, distillation and solvent recovery. Its products are used in steel mills, cosmetic industries and their raw material in the production of food for human consumption. With the growth of industrial production of soybean oil, reducing costs and waste is essential for an industry to be competitive in the global market. This cost reduction can occur in the distillation step, which is one of the largest energy consumption of this process, which is constituted by three evaporators and a "stripper" and is intended to separate the crude oil from the hexane solvent by heating the mixture. In this context, modeling and process simulation using simulators such as HYSYS, becomes attractive due to the possibility of analyzing a cost reduction of steam, it is the input with the highest amount paid in manufacturing cost. Developed a model for soybean oil to the micelle and the micelle system evaporators, which was validated with the actual data of a process and values found in the literature. The results obtained in HYSYS, showed that modeling and simulation using HYSYS are consistent with the actual process conditions and near to the values found in the literature, can be used as a tool for analysis and simulation of micelle concentration step of the evaporators in process of obtaining soybean oil, disponibilizando the analysis process, prior to any physical changes in the distillation process may occur a large investment without generating an expected return.

Keywords: soy, separation, modeling and simulation.

1. INTRODUÇÃO

1.1 Problemática

A soja é a mais importante oleaginosa cultivada no mundo. Seu alto teor de proteínas proporcionou múltiplas utilizações e a formação de um complexo industrial destinado ao seu processamento.

Introduzida no Brasil em 1908, inicialmente na Região de São Paulo, por imigrantes japoneses. Teve sua cultura iniciada no Rio Grande do Sul, por volta de 1914. No entanto o maior desenvolvimento do cultivo desta leguminosa no Estado gaúcho é da década de 1970 (Amaral, 2006).

A industrialização de oleaginosas constitui-se num dos mais importantes setores do sistema agroindustrial, pela importância de seus produtos nas indústrias siderúrgicas, de cosméticos e como matéria-prima no processamento de alimentos para consumo animal e humano (BOSS, 2000).

A produção mundial de soja, cuja quantidade participa na formação da oferta e da demanda pelo produto, está restrita principalmente a três países: EUA, Brasil e Argentina. Esses países participam com 80% da produção e 90% da comercialização da soja no mundo.

De acordo com Oilseeds (2012), no abastecimento e distribuição mundial das principais oleaginosas, a soja se destaca como a principal, onde em 2011, correspondeu a 58,09% de todas as oleaginosas produzidas mundialmente. Acompanhando o crescimento da produção de soja, destaca-se o crescimento do processamento/esmagamento, onde de 2008 a 2011, houve um crescimento de 8,91%. No abastecimento e distribuição mundial da soja, o Brasil é o segundo maior produtor, correspondendo a 28,93% da produção mundial, ficando atrás somente dos Estados Unidos da América, que corresponde a 31,98%. A China se destaca no setor de importação da soja, onde que a quantidade importada cresceu 38,40% de 2008 a 2011, sendo que neste último ano, este país representou 60,13% de toda a soja importada mundialmente. O Brasil é o segundo país, em exportação de soja, correspondendo 32,41% de toda a soja exportada mundialmente, ficando atrás somente dos Estados Unidos da América, que representa 44,21% das exportações mundiais. No processamento/esmagamento da soja, a China se destacou a partir de 2010, quando se

tornou líder no processamento do grão da soja, sendo que em 2011, correspondeu a 26,21% de toda a soja processada no mundo, neste mesmo ano, o Brasil ocupou a quarta colocação no processamento da soja, correspondendo a 15,91% da soja processada no mundo, ficando atrás da China, Estados Unidos da América e Argentina, respectivamente.

Na Tabela 1.1, pode-se observar que nos últimos dez anos houve um aumento de 56,57% na capacidade de processamento da soja, 44,44% na capacidade de refinar o óleo de soja e 15,24% na capacidade de envasar o óleo de soja. Por tanto, diante deste crescente expansão das indústrias oleaginosas nacional, tem-se que para este crescimento ter continuidade, deverá ter maior conhecimento e otimização do processo envolvendo a cadeia produtiva da soja.

Tabela 1.1 Evolução da Soja no Brasil

Evolução de Capacidades da Soja no Brasil			
Ano	Processamento (ton/dia)	Refino (ton/dia)	Envase (ton/dia)
1998	120.910	14.842	13.733
2000	127.140	15.252	13.651
2001	107.950	16.168	14.094
2002	110.560	16.370	13.425
2003	115.270	16.300	13.534
2004	131.768	18.000	13.770
2005	137.098	18.170	13.760
2006	143.504	20.010	15.952
2007	149.504	21.280	15.715
2008	153.849	21.550	15.635
2009	165.299	22.860	16.169
2010	176.834	22.990	16.381
2011	169.136	23.353	16.242

Fonte: ABIOVE, (2012).

No Brasil, até meados dos anos 60 a soja não tinha importância econômica dentre as culturas principais, como cana-de-açúcar, algodão, milho, arroz, café, laranja e feijão. No entanto, a partir do final dos anos 60, a produção de soja teve crescimento extraordinário, alterando-se sua importância relativa no cenário nacional e internacional.

A produção de soja no Brasil concentrou-se na região Centro-Sul até o início dos anos 80. A partir daí, a participação da região Centro-Oeste aumentou

significativamente. A expansão da área cultivada de soja no Brasil é resultado tanto da incorporação de novas áreas, nas regiões Centro-Oeste e Norte, quando da substituição de outras culturas, na região Centro-Sul.

Na Figura 1.1, observa-se que a área plantada e a produção de soja, no Brasil, tiveram um crescimento, nos ultimo 15 anos, com 90% de crescimento na área plantada e 120% na produção da soja. Por tanto, diante deste grande oferta de grão de soja, as indústria de oleaginosas brasileiras, deverão ter maior conhecimento e otimização dos processos industriais.

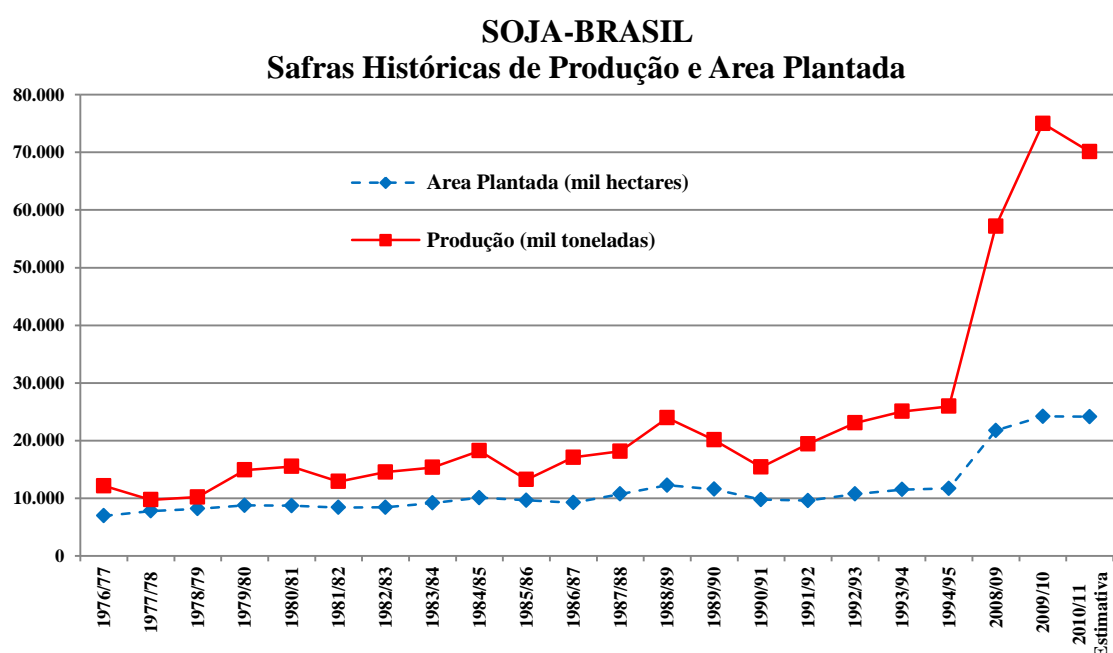


Figura 1.1 Evolução da produção e área plantada da soja no Brasil.
Fonte: CONAB, (2012).

Entre as agroindústrias brasileiras, a de extração de óleos vegetais tem tido certo destaque graças à oferta, em grande escala, de grãos tais como o de soja, o de algodão e o de milho, entre outros. Todavia, entende-se que esta agroindústria está ainda pouco eficiente tanto na produção de óleos comestíveis, que tem sido a sua finalidade preponderante, quanto no aproveitamento de uma grande variedade de óleos vegetais com finalidades outras, por exemplo, como fonte de hidrocarbonetos para a indústria química e como fonte energética, conforme (REZENDE, *et. al.*, 1998).

Pode-se dizer que a expansão da cultura da soja foi a principal responsável pela introdução do conceito de agronegócio no país, não só pelo volume físico e financeiro envolvido, mas também pela necessidade da visão empresarial de administração da

atividade por parte dos produtores, fornecedores de insumos, processadores da matéria-prima e negociantes, de forma a manter e ampliar as vantagens competitivas da produção.

O óleo de soja corresponde a mais de 90% da produção de óleos vegetais. A soja, portanto, constitui a mais importante matéria-prima da cadeia de produção de óleos vegetais no Brasil. No período 2004/2005 a produção de soja no Brasil correspondeu a 23,7% da produção mundial e a exportação do complexo de soja correspondeu a 31,5% no farelo e 26,2% no óleo, sendo o segundo país a mais exportar (ABIOVE, 2012).

A extração por solvente, desde seu surgimento, mostrou-se o modo mais interessante de se extrair óleos vegetais de suas matrizes. O sucesso do processo a solvente está em sua capacidade de reduzir a níveis bastante baixos, o resíduo de óleo presente em materiais oleaginosos. O solvente que se estabeleceu desde o início do processo a solvente foi à fração hexana do petróleo, que além de vir de uma fonte não renovável de matéria prima, traz consigo os infortúnios atrelados ao mercado do petróleo, sendo ainda tóxico e inflamável.

Ao longo dos anos, vários solventes têm sido testados para substituir o hexano. Nenhum, entretanto, conseguiu até o momento, reunir qualidades que superassem as suas, apesar dos mencionados inconvenientes.

O processo de produção de óleo de soja é complexo e envolve desde a recepção e tratamento da matéria-prima até a extração do óleo por solvente (hexano), formando uma solução denominada de miscela. A recuperação do óleo presente nessa solução é frequentemente acompanhada por evaporação seguida por *stripping* do hexano, com o uso de vapor d'água direto (SMITH E WECHTER, 1950). Após este processo de evaporação e *stripping*, a solução é separada nos dois constituintes principais (óleo vegetal e hexano) em processos que determinam um alto consumo energético (JONGENELEN, 1976) e (PARAISO *et al.*, 2003). Quando há a possibilidade de economizar, o consumo energético é sempre relevante na redução do custo industrial, na realização de um produto a ser comercializado (GONZALES *et al.*, 2010).

A evaporação consiste em uma das mais comuns e importantes operações na Indústria de alimentos, estando presente em plantas tão diversas quanto à de processamento de leite, de processamento de sucos de frutas, de dessalinização de água,

de purificação de óleos vegetais, além de vários outros processos extrativos que demandam purificação após extração por solvente.

De acordo com FERNANDES-JUNIOR (2009), na indústria de processamento de óleos vegetais, nos últimos cinco anos houve um aumento de capacidade instalada de processamento de 35% no Brasil, sendo que no estado do Paraná, este crescimento foi de 21,4%. No trabalho deste autor, é ressaltado que a continuidade deste crescimento somente será possível com a otimização dos custos industriais, principalmente com relação ao custo da energia necessária no processo. Destacando que o Brasil se tornará nos próximos 22 anos em um dos cinco maiores consumidores de energia do mundo. Para suportar esse crescimento será necessário um investimento de aproximadamente US\$ 310 bilhões em geração de energia até o ano de 2030. As projeções mostram um crescimento de 4,4% ao ano no consumo de eletricidade, e de 4,2% na produção.

No processo para obter óleos vegetais, o óleo de soja é o segundo mais comercializado no mercado mundial. Segundo Oilseeds (2012), de 2008 a 2011 a produção de óleo de soja aumentou em 8,99%, sendo que em 2011, a produção de óleo de soja correspondeu a 28,02% da produção mundial, ficando atrás somente da produção de óleo de palma que correspondeu por 32,57%. No setor de exportação, o óleo de soja representou 25,85% das exportações mundiais, sendo superado somente pela exportação de óleo de palma, que representou 61,00%.

De acordo com ABIOVE (2012), a capacidade de processamento do Brasil aumenta em 59,94% de 2002 a 2010, sendo que neste mesmo período o estado do Paraná teve um aumento de 24,41%, este mesmo estado, em 2010, ocupou o segundo lugar no Brasil em capacidade de processamento, representando 20,20% de toda a capacidade nacional.

Estudo tem sido direcionado à economia de energia na planta de recuperação de hexano, onde a preocupação com a economia de energia iniciou-se na década de 50 e ganhou impulso com as crises energéticas da década de 70 (PARAISO, 2001). Esta preocupação tem sido manifestada devido à necessidade premente de redução dos custos operacionais, almejando obter vantagens competitivas no mercado mundial.

Uma estratégia importante visando à redução de custos e a proteção do meio ambiente e do consumidor, nas indústrias já instaladas, é procurar estabelecer as

melhores condições de operação do processo. Tais condições podem propiciar um consumo menor de energia e um nível mais elevado de recuperação de solvente (hexano). As indústrias instaladas no Paraná/Brasil utilizam o processo contínuo de extração por solvente, sendo o hexano o solvente utilizado. As operações deste processo que deverão ser principais numa estratégia de redução de custos são: a extração do óleo do solvente, a destilação da miscela e a dessolventização-tostagem do farelo uma vez que elas consomem muita energia e possuem uma intensa manipulação com o hexano.

Inicialmente, na extração de óleo de soja por solvente, considerava-se como bom desempenho uma recuperação de 99,27% do solvente admitido no extrator de óleo de soja, valor que pode ser interpretado como quatro litros de solvente gasto para cada tonelada de soja processada. Nos anos 70, com o surgimento de indústrias maiores e as novas tecnologias implantadas, principalmente nos projetos de dessolventização por arraste de vapor d'água, a recuperação do solvente no processo passou para 99,86%, representando dois litros de solvente gasto, por tonelada de soja processada. Nos últimos anos, a recuperação do solvente utilizado na extração é de aproximadamente 99,92%, representando 0,8 litros de solvente gasto, por tonelada de soja processada (PARAISO, 2001). De acordo com KEMPER (1998), a indústria processadora de óleos tem que estar continuamente buscando melhorar a recuperação do solvente, preservando principalmente o meio ambiente.

De acordo com GAVIN (1983), um estudo mais aprofundado das condições de operações envolvidas na obtenção do óleo de soja, pode possibilitar a indústria, estabelecer melhores condições de operação, resultando em uma economia de energia e melhorias na recuperação do hexano. Neste contexto, é necessário o desenvolvimento de ferramentas adequadas, para que mostrem com precisão as condições reais das operações unitárias do processo, com isso é possível estabelecer condições de operação dos equipamentos envolvidos no processo, bem como situações que prevejam a recuperação máxima de hexano e o consumo mínimo de energia, envolvido no processo de extração e destilação. Para isso ocorrer com rapidez deve-se fazer uso de simulação computacional, utilizando um software adequado para a modelagem do processo a ser simulado.

A modelagem e simulação dos processos em *software* têm permitido avaliações de custos operacionais, determinações de condições ótimas de operação e análises de desempenho de estratégias de controle de modo rápido e pouco dispendioso. Tais análises são de fundamental importância para uma operação segura, para manter o produto efluente do sistema de evaporação dentro de condições pré-estipuladas e ainda para minimizar custos.

Para a realização do modelo e simulação das colunas evaporadoras, o *software* mais utilizado, principalmente para processos petroquímicos é o *HYSYS*, onde este *software* pode ser aplicado para simulação e projeto em estado estacionário de vários equipamentos industriais como trocadores de calor, vasos separadores, compressores, colunas de destilação, fornos, etc.

O *software HYSYS* tem a função de simular diversos processos químicos de acordo com a montagem do usuário. O programa permite montar e simular a planta nas condições desejadas, objetivando encontrar condições de operações com menor custo possível. O *software HYSYS* pode simular no estado estacionário ou dinâmico.

A primeira hipótese atribuída neste trabalho, é que o processo de concentração da miscela, depois de modelado no simulador *HYSYS*, irá proporcionar uma ferramenta de gestão valiosa, para analisar, simular e melhorar uma etapa de importância no processo de obtenção de óleo de soja.

1.2 Objetivos

A aplicação de conceitos de otimização e de controle de processos industriais, depende da disposição de modelos matemáticos para cada tipo de processo, de modo que os mesmos possam ser rápida e economicamente simulados em computador. Com o objetivo de aplicar esses conceitos a indústria de extração de óleo de soja e fazer a modelagem e simulação dessa tecnologia no simulador *HYSYS (Hyprotech Ltda.)*, pelo uso direto dos recursos disponibilizados pelo simulador ou emulados as operações necessárias que não há disponível neste *software*.

Este trabalho tem como objetivo específico, desenvolver os modelos, em regime estacionário no *HYSYS*, dos elementos envolvidos na operação da destilação da miscela, ou seja, óleo de soja e hexano e do evaporador. Realizar a validação do modelo

desenvolvido, utilizando os dados operacionais de uma planta de extração de óleo de soja, de uma Cooperativa Agroindustrial. Realizar a comparação, entre os resultados obtidos do modelo desenvolvido no *HYSYS*, com relação a resultados proposto na literatura e originados pelo processo industrial envolvido. Após esta validação do modelo, utilizar o mesmo para realizar simulações a fim de analisar o comportamento operacional da planta, em situações propostas, podendo contribuir na análise do processo proposto, visando à redução do custo industrial, com relação à energia térmica utilizada no processo de destilação da miscela, da cooperativa agroindustrial Cocamar.

1.3 Metodologia de trabalho

Para cumprir o objetivo proposto acima, a metodologia é composta pelas seguintes etapas, descritas abaixo.

Para a modelagem do óleo de soja no *HYSYS*, inicialmente foi realizado a análise quantitativa dos grupos formadores das moléculas do óleo de soja utilizado no processo real e na montagem do modelo foi utilizado o método UNIFAC, referenciando os principais grupos formadores das moléculas. Com o modelo do óleo de soja, construiu-se uma corrente de alimentação, composta por óleo de soja hipotético e hexano.

Desenvolvimento do processo de concentração da miscela nos evaporadores: a modelagem destes tipos de equipamentos, no *HYSYS*, por meio da associação dos blocos de simulação, disponível no *software*, trocadores de calor casco-tubo e vasos separadores *flash*.

Analisando o sistema de destilação global: buscou-se avaliar as principais características operacionais do sistema envolvidos na destilação da miscela.

Os dados operacionais, reais do processo de destilação da miscela, foram coletados a partir da fábrica de extração de óleo de soja, com capacidade de processar 2.600 toneladas/dia, da COCAMAR – Cooperativa dos Cafeicultores de Maringá, localizada na cidade de Maringá, no estado do Paraná.

1.4 Estrutura do trabalho

Este trabalho foi dividido em capítulos. O primeiro capítulo tem o objetivo de expor o problema a ser estudado, apresentando os objetivos do trabalho e uma simplificada apresentação sobre a metodologia aplicada para atingir este objetivo.

No segundo capítulo apresenta à revisão bibliográfica dos principais conceitos sobre as etapas do processamento do óleo de soja, descrevendo as principais etapas da extração de óleos de soja e enfatizando a etapa de destilação da miscela.

No terceiro capítulo demonstrou a modelagem, simulação e resultados das análises do óleo de soja, destacando que o composto constituinte do óleo de soja, não faz parte do banco de dados do simulador *HYSYS*. A composição do óleo de soja foi hipoteticamente montada no *software*, a partir da análise química das quantidades dos principais componentes do óleo de soja utilizado no processo. A validação desta substância hipotética foi realizada comparando os resultados simulados e os experimentais da literatura.

No quarto capítulo demonstrou a modelagem, simulação e resultados das análises do óleo de soja e hexano, formando a miscela. A validação desta substância hipotética foi realizada comparando os resultados simulados e os experimentais da literatura.

No quinto capítulo demonstrou a modelagem, simulação e resultados das análises do sistema de evaporação de miscela, analisando o comportamento do processo na variação de temperatura e concentração da miscela. A validação desta substância hipotética foi realizada comparando os resultados simulados e os experimentais da literatura.

No sexto capítulo demonstrou a modelagem, simulação e resultados das análises global do processo de concentração de miscela. A validação desta substância hipotética foi realizada comparando os resultados simulados e os experimentais da literatura.

No sétimo capítulo descreve as principais conclusões da pesquisa realizada, sobre a modelagem e simulação do sistema de evaporadores, utilizado na concentração de miscela da cooperativa agroindustrial.

2. REVISÃO DE LITERATURA

2.1 A Soja

O cultivo da soja atual é muito diferente do passado, que eram plantas rasteiras que se desenvolviam na costa leste da Ásia, principalmente ao longo do rio Yangtse, na China. Sua evolução começou com o aparecimento de plantas oriundas de cruzamentos naturais entre duas espécies de soja selvagem que foram domesticadas e melhoradas por cientistas da antiga China. As primeiras citações do grão aparecem no período entre 2.883 e 2.838 AC, quando a soja era considerada um grão sagrado, ao lado do arroz, do trigo, da cevada e do milheto. Um dos primeiros registros do grão está no livro "Pen Ts'ao Kong Mu", que descrevia as plantas da China ao Imperador Sheng-Nung. Para alguns autores, as referências à soja são ainda mais antigas, remetendo ao "Livro de Odes", publicado em chinês arcaico (EMBRAPA, 2012).

Até aproximadamente 1.894, término da guerra entre a China e o Japão, a produção de soja ficou restrita à China. Apesar de ser conhecida e consumida pela civilização oriental por milhares de anos, só foi introduzida na Europa no final do século XV, como curiosidade, nos jardins botânicos da Inglaterra, França e Alemanha (EMBRAPA, 2012).

Na segunda década do século XX, o teor de óleo e proteína do grão começa a despertar o interesse das indústrias mundiais. No entanto, as tentativas de introdução comercial do cultivo do grão na Rússia, Inglaterra e Alemanha fracassaram, provavelmente, devido às condições climáticas desfavoráveis (EMBRAPA, 2012).

No final da década de 60, dois fatores internos fizeram o Brasil começar a enxergar a soja como um produto comercial, fato que mais tarde influenciaria no cenário mundial de produção do grão. Na época, o trigo era a principal cultura do Sul do Brasil e a soja surgia como uma opção de verão, em sucessão ao trigo. O Brasil também iniciava um esforço para produção de suínos e aves, gerando demanda por farelo de soja. Em 1966, a produção comercial de soja já era uma necessidade estratégica, sendo produzidas cerca de 500 mil toneladas no País (EMBRAPA, 2012).

A explosão do preço da soja no mercado mundial, em meados de 1970, desperta ainda mais os agricultores e o próprio governo brasileiro. O País se beneficia de uma vantagem competitiva em relação aos outros países produtores: o escoamento da safra brasileira ocorre na entressafra americana, quando os preços atingem as maiores cotações. Desde então, o país passou a investir em tecnologia para adaptação da cultura às condições brasileiras, processo liderado pela Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária (EMBRAPA, 2012).

Os investimentos em pesquisa levaram à "tropicalização" da soja, permitindo, pela primeira vez na história, que o grão fosse plantado com sucesso, em regiões de baixas latitudes, entre o trópico de capricórnio e a linha do equador. Essa conquista dos cientistas brasileiros revolucionou a história mundial da soja e seu impacto começou a ser notado pelo mercado a partir do final da década de 80 e mais notoriamente na década de 90, quando os preços do grão começaram a cair. Atualmente, os líderes mundiais na produção mundial de soja são os Estados Unidos, Brasil, Argentina, China, Índia e Paraguai (EMBRAPA, 2012).

A grande atenção econômica da soja é determinada pelo seu elevado potencial produtiva, suas características agrônômicas favoráveis e por sua composição química. Considerando as variações entre as variedades e condições climáticas, em média, os grãos de soja contêm 40% de proteína, 20% de óleo, 35% de carboidratos e 5% de minerais, onde estes constituintes, em produtos ou matéria-prima com características específicas, permitem uma variada utilização (ERICKSON, 1995; PERKINS, 1995; LIU, 2000).

A soja é um grão muito versátil que dá origem a produtos e subprodutos muito usados pela agroindústria, indústria química e de alimentos. Na alimentação humana, a soja entra na composição de vários produtos embutidos, em chocolates, temperos para saladas, entre outros produtos (EMBRAPA, 2012).

A proteína de soja é à base de ingredientes de padaria, massas, produtos de carne, cereais, misturas preparadas, bebidas, alimentação para bebês e alimentos dietéticos. A soja também é muito usada pela indústria de adesivos e nutrientes, alimentação animal, adubos, formulador de espumas, fabricação de fibra, revestimento, papel emulsão de

água para tintas. Seu uso mais conhecido, no entanto, é como óleo refinado, obtido a partir do óleo bruto. Nesse processo, também é produzida a lecitina, um agente emulsificante (substância que faz a ligação entre a fase aquosa e oleosa dos produtos), muito usada na fabricação de salsichas, maioneses, achocolatados, entre outros produtos (EMBRAPA, 2012).

A ampla aceitação mundial do óleo de soja para fins comestíveis decorre da oferta abundante e confiável, do preço competitivo e da melhoria do produto com relação ao sabor e aplicações, inclusive na forma hidrogenada (BASTIN,1990).

Recentemente, a soja vem crescendo também como fonte alternativa de combustível. O biodiesel de soja já vem sendo testado por instituições de pesquisa, como a Embrapa, além de estar sendo testado em diferentes cidades brasileiras (EMBRAPA, 2012).

Nos anos de 1995/1996, a soja correspondeu a 94,20% da produção e por 90,80% do consumo de óleos vegetais no Brasil, sendo esta a mais importante matéria-prima da cadeia produtiva de óleos vegetais. O Brasil se destacou durante os anos de 1997/1998, no comércio internacional do complexo de soja, por estar na liderança nas exportações mundiais de farelo, chegando a 30% do volume comercializado no mundo e ocupando a segunda colocação nas exportações mundiais de óleo de soja, com 21% do volume total. O complexo de soja gerou para os países, em 1997, o valor em torno de US\$ 5,5 bilhões, incluindo grãos, óleo e farelo (BARBOSA, M. Z. de FREITAS, S. M. e FRANCA, T. J. F., 1998).

Na safra 2009/2010, a produção mundial de soja foi de 263,7 milhões de toneladas, em uma área plantada de 103,5 milhões de hectares. A América do Sul representou, nesta mesma safra, 51,46% do total da produção em 47,5 milhões de hectares de área plantada. O Brasil é o segundo maior produtor mundial de soja atrás apenas dos EUA. A soja ocupou uma área de 24,2 milhões de hectares, o que totalizou uma produção de 75,0 milhões de toneladas. A produtividade média da soja brasileira foi de 3.099 kg por hectares. O estado do Mato Grosso é o maior produtor brasileiro de soja, com uma produção de 20,4 milhões de toneladas, em uma área plantada de 6,4 milhões de hectares, com uma produtividade de 3.190 Kg/há. O estado do Paraná é o segundo

produtor brasileiro de soja, com uma produção de 15,4 milhões de toneladas, em uma área plantada de 4,6 milhões de hectares, com uma produtividade de 3.360 Kg/há. Com relação a exportação do complexo soja, em 2010, houve a exportação de 29,10 milhões de toneladas de grão de soja , 13,70 milhões de toneladas de farelo e 1,60 milhões de toneladas de óleo (EMBRAPA,2012).

Na Figura 2.1, observa-se que pela perspectiva de crescimento de produção de soja, a América Latina será a maior responsável pelo crescimento da oferta mundial até 2020, contribuindo com aproximadamente 45 milhões de toneladas. O Brasil será o país responsável pela maior parcela deste crescimento, contribuindo com aproximadamente 25 milhões de toneladas de soja.

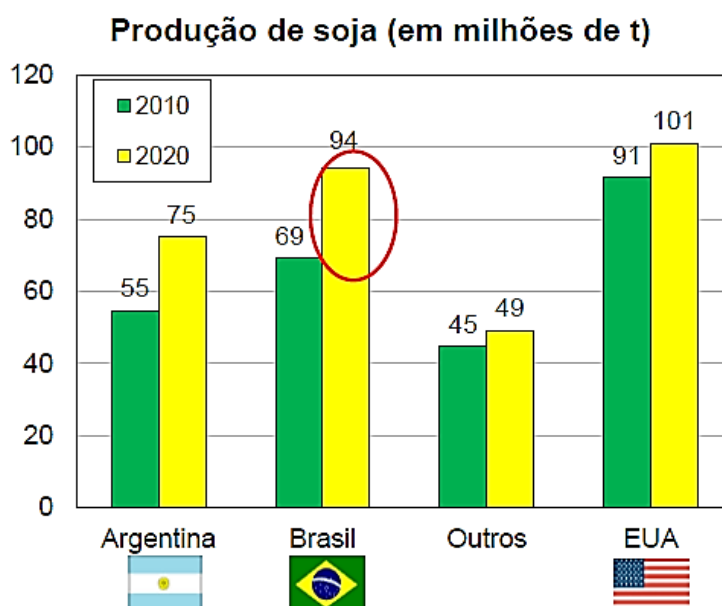


Figura 2.1 Perspectiva de crescimento da produção de soja.
 Fonte: ABIOVE, (2012).

De acordo com Oilseeds (2012), a China é a principal produtora de óleo de soja, correspondendo a 23,87% de toda a produção mundial. O Brasil ocupa a quarta posição na produção de óleo de soja, representando 16,78% da quantidade mundial. O Brasil é o terceiro país que mais consome domesticamente o óleo de soja, havendo um aumento de 33,00% do consumo doméstico, nos últimos quatro anos.

A soja é a matéria-prima mais importante da cadeia de produção de óleos vegetais no Brasil, a produção de óleos vegetais é composta, por mais de 90% de óleo de soja. No período 2004/2005 a produção de soja no Brasil correspondeu a 23,7% da produção

mundial e a exportação do complexo de soja correspondeu a 31,5% no farelo e 26,2% no óleo, sendo o segundo exportador mundial destes produtos (ABIOVE, 2012).

Na Figura 2.2, observa-se que o estado do Paraná é o maior em capacidade de processamento da soja, representando 20,6% da capacidade total de processamento nacional, até 2011 o Paraná estava na segunda posição, em capacidade, sendo superado pelo Mato Grosso, cujo mesmo, em 2012, corresponde a 20,5% da capacidade. Nos últimos oito anos, a capacidade de processamento do Paraná aumentou em aproximadamente 24,41%.

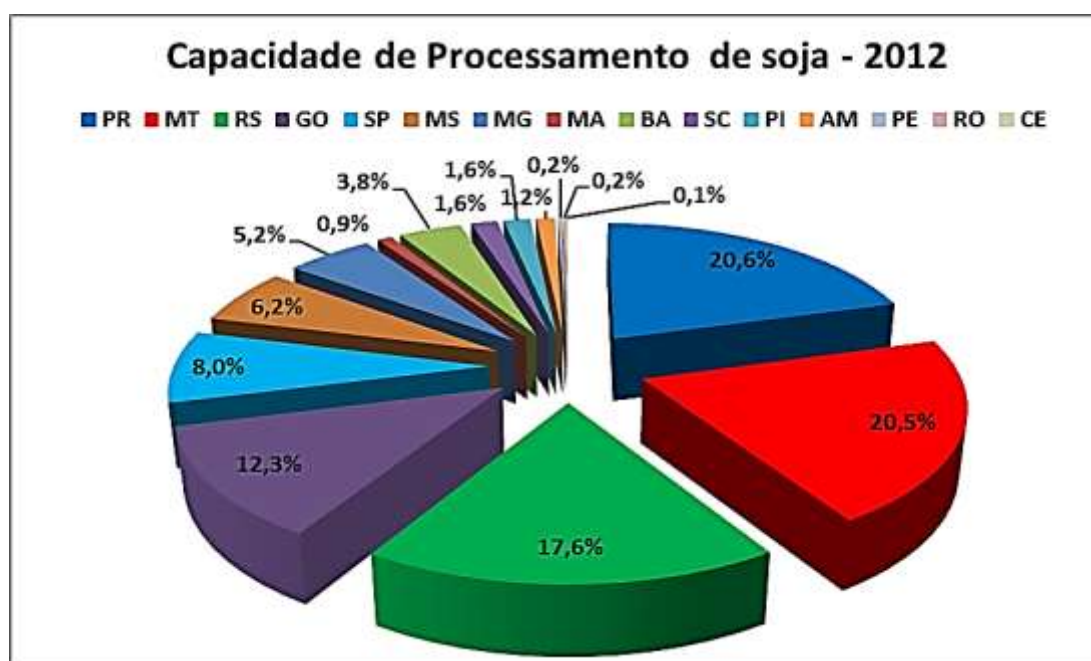


Figura 2.2 Capacidade de processamento da soja, por estado brasileiro.
Fonte: ABIOVE, (2013).

Ao longo das últimas décadas, ferramentas de gestão se tornaram comuns na vida das empresas. Elas ajudam os executivos a atingirem seus objetivos, seja eles aumentar a receita, reduzir custos de produção, inovar, melhorar a qualidade ou se planejar para o futuro. Mas como identificar as ferramentas mais apropriadas para os desafios de sua organização? O segredo não está em descobrir uma ferramenta mágica, mas sim entender as diferentes ferramentas e saber quando e como utilizá-las (RIGBY, 2012).

A produção de óleo de soja é um processo com alto grau de complexidade e envolve desde a recepção, tratamento, transporte e armazenamento da matéria prima, até a extração do óleo por solvente (hexano), formando com isso uma mistura entre óleo vegetal e solvente denominada de miscela, mediante o processo de evaporação e

destilação “*flash*”, e para ocorrer à concentração do óleo na miscela é necessário separar os dois componentes desta mistura, e para isso acontecer, há um alto consumo de energia (PARAISO, P. R., 2001).

Como conclusão, observamos das referências analisadas, um crescimento da produção da soja, sendo a principal oleaginosa cultivada no mundo, com perspectiva de continuar aumentando. A exportação desta oleaginosa está aumentando nos últimos anos, indicando que é mais rentável exportar a soja a industrializar a mesma internamente, indicando um maior custo industrial. Para um possível aumento do processo nacional, deve ocorrer uma economia na energia térmica gasta no processo de extração do óleo de soja, principalmente na destilação da miscela, sendo este a principal etapa do processo, no gasto de vapor, impactando diretamente no custo do processo, para obter óleo de soja.

2.2 Etapas do processo de fabricação de óleo de soja

O processamento da soja para a produção de óleo tem uma longa história principalmente no oriente (KENYON *et al.*, 1948). A obtenção do óleo está originalmente relacionada com a extração de lipídios das sementes vegetais. DURKEE (1936) enfatizou, no início do século XX, que os destinos para o óleo de soja eram para óleo de salada, margarina, gordura vegetais. Nos últimos 30 anos, segundo MARIANI (2007), grande atenção vem sendo dada a tecnologias que possam atender a falta de suprimentos energéticos. Entre elas pode-se citar a produção de biodiesel, que além de ter sido o tema de estudo desse autor, é um destino moderno e de volume considerável para o óleo de soja.

O processamento da soja consiste em operações básicas para converter soja em produtos acabados. Todas as fases do processamento consistem em operações independentes e cada qual com seu grau de importância para o desempenho geral (GERMANO, 2001)

O processo de obtenção de óleo de soja bruto é uma parte importante na indústria de óleo de soja comestível e constitui-se das seguintes etapas: ressecagem,

preparação dos grãos, extração do óleo de soja bruto e recuperação do solvente e peletização.

A Figura 2.3 representa o fluxograma do processo de extração de óleo de soja, iniciando no armazenamento do grão da soja, onde há a influencia na qualidade do grão da soja, de acordo com o tipo e condições de armazenamento do grão da soja, a umidade que o grão de soja, sai do armazenamento é de aproximadamente 14%. Quando a soja passa pelo processo de ressecagem, a umidade diminui para aproximadamente 10%. Na etapa da preparação, é realizada a quebra do grão da soja e retirado a casca, o grão de soja quebrado, sem a casca, é condicionado a uma temperatura de aproximadamente 60°C e posteriormente é laminada, ficando com uma espessura de aproximadamente 0,30 mm. Na etapa de extração, retira-se o óleo da massa, e este óleo é concentrado nas colunas evaporadoras e *stripper*, originando o óleo bruto. Após extrair o máximo de óleo, fica um residual de óleo no farelo de aproximadamente 1%, onde o mesmo é peletizado e armazenado posteriormente.

A umidade ideal de entrada dos flocos no extrator deve variar entre 9% e 12%. Abaixo destes valores, dificulta o movimento do solvente do leito e acima de 12% dificulta a atuação do hexano na solubilidade do óleo. Como o óleo não se solubiliza na água e o hexano se solubiliza levemente. Como o solvente possui grande afinidade com o óleo, a água que se encontra presente no extrator sai totalmente na torta e a miscela, sai totalmente livre de água (PARAISO, 2001).

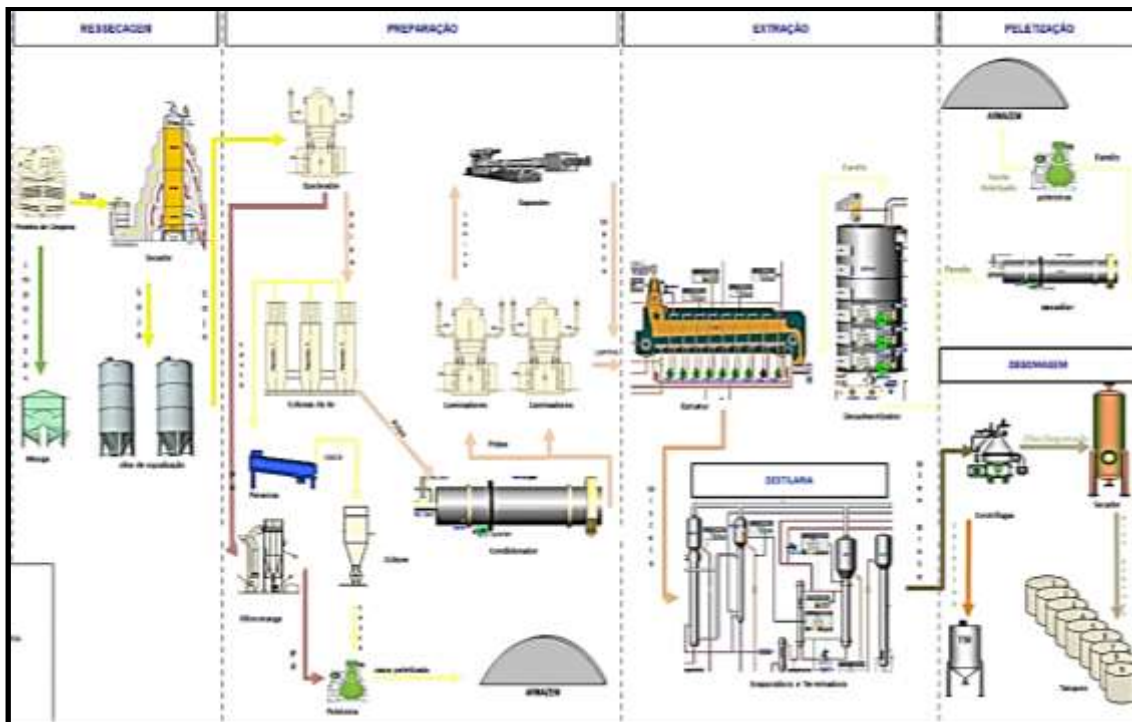


Figura 2.3 Fluxograma simplificado das principais etapas do processamento de soja

2.2.1 Recepção e armazenamento dos grãos

O processamento inicial dos grãos compreende as etapas de pesagem, limpeza, secagem e armazenamento. A pesagem, normalmente é realizada por mecanismos eletrônicos ou informatizados com os fluxos de entrada e eficiência da produção. Segundo, AMARAL *et al.* (2006), a soja recebida como matéria-prima nas unidades industriais é classificada conforme padrões de umidade, impurezas, percentual de grãos quebrados e outros.

A pré-limpeza tem por objetivo a retirada de pedaços de gravetos, cascas, vagens e sementes, assim os grãos em bom estado são conduzidos ao secador, quando a umidade for superior a 12,00%. Esta etapa de grande importância, pois os grãos ardidos contêm óleo escuro com alta acidez e alto teor de oxidantes, e os grãos imaturos darão óleos com alto teor de clorofila. O processo de secagem deve-se insuflar ar quente em contra fluxo da semente, sendo que a temperatura não deve ser superior a 90°C, em seguida a produção deve ser armazenada em condições ótimas de ventilação interna (GERMANO, 2001).

2.1.2. Ressecagem

Para (AMARAL, L.; *et al*, 2006) e (GUARIENT e LOVATO, 2009), a soja recebida como matéria-prima nas unidades industriais é classificada conforme padrão de umidade, impurezas, percentual de grãos quebrados e outros. Feita a secagem e limpeza, os grãos são encaminhados para o armazenamento que deve ser efetuado em baixa umidade, em torno de 12,50%, com esta umidade ocorre à diminuição das atividades enzimáticas e o crescimento de microfloras de fungos e bactérias.

Considerando que o processo inicial para a obtenção de óleo bruto seja a ressecagem, aonde a soja vinda de armazéns segue por transportadores para a peneira de limpeza, que remove cascas e materiais leves, vagens debulhadas e não debulhadas e finos, além de sujidades maiores não removidas na pré-limpeza. A soja segue então por elevador para a torre de secagem e as cascas e materiais leves são removidos pela peneira através de um exaustor e transferidas para uma moega.

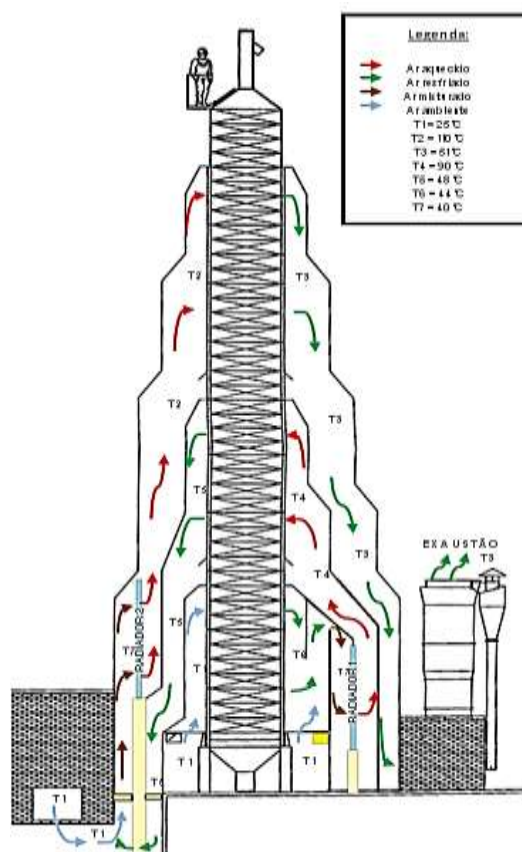


Figura 2.4 Torre de secagem de grão de soja.

Na torre de secagem, como demonstrada na Figura 2.4, o ar ambiente entra com uma temperatura T1, passa por um radiador, onde o mesmo é aquecido por vapor

oriundo da caldeira e após o ar passar por este radiador a temperatura é aumentado para T2, com esta temperatura o ar tem o primeiro contato com o grão de soja. Após a primeira troca térmica entre o ar e o grão de soja, o ar fica com uma temperatura T3, onde que com esta temperatura o ar sai do secador por exaustão. Outro ponto de entrada de ar ambiente, este mais próximo do centro do secador, o ar entra com uma temperatura T1 e com esta temperatura tem o contato com o grão da soja, com objetivo de resfriar a mesma, após este contato o ar aumenta de temperatura, chegando em uma temperatura T6, sendo que com esta temperatura o ar se mistura com o ar ambiente abaixando para uma temperatura T7, com esta temperatura o ar passa por outro radiador, cujo o sistema de aquecimento é o mesmo descrito anteriormente e após a passagem pelo radiador este ar atinge uma temperatura T4, onde com esta temperatura o ar tem o contato com o grão da soja, com objetivo de retirar a umidade da mesma. Após este contato o ar atinge uma temperatura T5, onde que esta é misturada com o ar de temperatura ambiente, começando todo o processo de troca térmica novamente.

Na torre de secagem a umidade do grão é reduzida de 12,50% para aproximadamente 10%, através da troca de calor com ar quente gerado pela queima de lenha na fornalha ou pelo ar quente gerado pela passagem nos radiadores. O ar quente de exaustão, antes de entrar na torre passa por um ciclone separador de finos e fagulhas arrastadas do cinzeiro da fornalha, onde há a entrada de ar frio do meio ambiente promovendo a mistura com ar quente atingindo a temperatura media de secagem de 90°C.

Após a realização da limpeza e secagem do grão da soja, a mesma é direcionada por fitas transportadoras, para silos responsáveis pelo armazenamento da soja, onde a mesma permanece no silo por pelo menos 24 horas, com o objetivo de equalizar a umidade no interior do grão de soja, após a equalização esta soja serve de alimentação do processo de preparação do grão da soja, antecedendo a etapa de extração do óleo.

2.1.3 Preparação do Grão da Soja

Na entrada do processo de preparação do grão de soja, a mesma é transportada por meio de redlers e elevadores até nos moinhos quebradores, onde recebem a soja, onde a mesma é uniformemente distribuída por um dosador de fluxo entre dois pares de

cilindros ranhurados onde ocorre a quebra do grão. Quanto à quebra do grão, esta é feita em duas etapas, sendo que a primeira a quebra é feita no par de cilindros superiores, que quebram a soja de 4 ou 8 partes. Os dois cilindros inferiores fazem a segunda quebra dividindo o grão quebrado de 8 a 16 partes, sempre procurando minimizar a formação de finos. As estrias são mais profundas e menos numerosas no primeiro par e em maior número no segundo par de rolos, promovendo a quebra dos grãos de forma ótima quando cada um deles é dividido de quatro a seis partes.

Para (AMARAL, *et al.*, 2006), a trituração facilita o rompimento dos tecidos das paredes das células e diminui a distância entre o centro do grão e sua superfície, possibilitando o aumento da superfície de saída do óleo, facilitando o contato do solvente com o óleo.

Após a passagem pelos quebradores, a polpa de soja, juntamente com a casca é transportada por meio de redler e elevador para separadoras de casca, onde parte da casca é separada da polpa do grão quebrado para que o alto teor de fibra não prejudique as etapas posteriores.

Alguns métodos têm sido desenvolvidos e aprimorados, para diferentes matérias primas, com o intuito de se diminuir custos. Para o descasque da soja, existem atualmente três métodos que são mais utilizados:

- ✓ O Método Convencional em que as cascas são separadas após a quebra e antes do condicionamento e da laminação;
- ✓ O Método *Escher-Wyss* no qual as cascas são separadas após realizar-se a quebra, sendo que os grãos recebem tratamento térmico inicial com ar quente;
- ✓ O Método “*Popping*” no qual as cascas são removidas após tratamento térmico com divisão das sementes em leito fluidizado, antes mesmo da quebra e da laminação;

A polpa sem casca segue para o condicionador rotativo, onde aquece a polpa quebrada dando plasticidade para facilitar a laminação e trazendo os bolsões de óleo para a superfície, sendo que este aquecimento é realizado por vapor indireto. A temperatura de trabalho do equipamento é em torno de 70°C.

Para condicionar os grãos injeta-se vapor direto de modo a se aumentar ao mesmo tempo a umidade e a temperatura dos grãos. O condicionamento apresenta vários benefícios.

- ✓ Controle da umidade e da coagulação parcial de proteínas;
- ✓ Incremento na permeabilidade das células;
- ✓ Aglomeração das gotículas de óleo;
- ✓ Redução na viscosidade do óleo;
- ✓ Melhora na plasticidade do material a ser floculado (laminado);
- ✓ Aquecimento para extração em temperatura ótima;

De acordo com THOMAS (2003) descreve que o cozimento tem por finalidade dar a matéria-prima certa plasticidade do material, ajustando a umidade para a formação de flocos de resistência mecânica apropriada. Serve também para provocar a liberação de óleo na matéria-prima e possibilitar a coagulação de certos componentes proteicos que são solúveis no óleo.

O cozimento é feito em cozinhadores ou condicionadores verticais de diversos estágios ou horizontais de diversos tipos. Nesse processo são utilizados vapor direto e indireto e as temperaturas devem estar entre 60° e 70°C, com tempo de residência da polpa entra 20 a 30 minutos, resultando na obtenção de massa com umidade recomendável da aproximadamente de 11,00%.

O material sai do condicionador e é transportado por redler e elevador para os laminadores, onde a soja quebrada é transformada em lamina pela prensagem entre dois rolos rotativos lisos que giram em sentido opostos. Flocos muito finos apresentam elevada permeabilidade, mas produzem leitos com baixa percolabilidade. Por outro lado, flocos mais espessos apresentam menor permeabilidade, mas formam leitos com alta percolabilidade. Há, portanto, uma condição ótima de operação na qual se tem boas permeabilidades no floco e percolabilidades no leite.

Nas Figuras 2.5 são mostrados, dois tipos de alimentadores dos laminadores de soja, sendo o da Figura 2.5 a, um alimentador de rolo e da Figura 2.5 b, um alimentador vibratório.

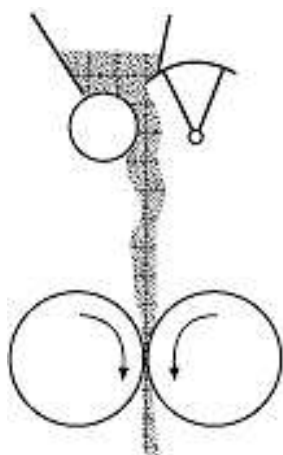


Figura 2.5 a: Alimentador de rolo.



Figura 2.5 b: alimentador vibratório.

Os dois tipos de alimentadores mais comuns usados em laminadores são alimentadores de rolos e os vibratórios. Alimentadores de rolo são compostos por um rolo de rotação lenta e um portão (comporta) de alimentação ajustável. Taxa de alimentação é efetivamente controlada pelo ajuste da posição da porta.

Alimentadores de rolo são simples, robusto e muito confiável. Não integrar-se bem com os controles de processo, uma vez que a relação entre o ajuste do amortecedor e velocidade de alimentação não é necessariamente linear. Nos alimentadores vibratórios há uma caixa vibrante ou calha para transportar material uma tremonha de alimentação para os rolos. A vazão de alimentação em um alimentador vibratório é controlada ajustando a amplitude da distância ou a frequência caixa movimento. Alimentadores vibratórios pode permitir o controle velocidades mais precisos e oferecer maior flexibilidade em termos de distribuição dentro do moinho. Alimentadores de vibração são bem adaptados para controles de processo automatizado. No entanto, todo o controle do processo para alterar a velocidade sem uma mudança de pressão pode corresponder produzir uma espessura da lamina variável.

Outros tipos de alimentadores tais como o parafuso, rotativo e simples guilhotinas, não são muito utilizados para laminação, devido à falta de um controle da vazão de alimentação precisa e uma boa distribuição.

A etapa de laminação e expansão é fase em que a soja passa através de rolos cilíndricos, providos de laminas de 0,30 mm de espessura, provocando uma ruptura das células e a formação de uma grande área superficial para o contato do solvente; laminas de grande espessura provocam alto teor residual no farelo (GERMANO, 2001).

As laminas provenientes dos laminadores, podem seguir em dois processos, sendo um deste processo, as laminas são transportadas diretamente para o extrator e outro processo a lamina passa pelo processo de extrusão da lamina e posteriormente é transportada para o extrator de óleo de soja.

Para CUSTODIO (2003), esta etapa desempenha a função de aumentar a superfície de contato entre o solido e o solvente, melhorando simultaneamente a permeabilidade no interior das partículas solidas e a percolação do solvente em um meio onde é formado por camadas de flocos.

Na expandir a massa laminada é submetida a um processo de extrusão e a um tratamento térmico com injeção de vapor direto, onde a massa depois de expandida apresenta um peso específico maior e uma porosidade que facilita a percolação do solvente, diminuindo também a retenção do solvente na massa. Após a extrusão a massa é transportada, por redler, para o extrator de óleo de soja.

Segundo LOPES (2008), as partículas após as etapas de condicionamento e laminação são comprimidas em uma extrusora as temperaturas bem superiores a do ponto de ebulição da água. Ao atingir a saída do expansor, que esta ao nível da pressão atmosférica, o vapor de água expande-se, modificando as propriedades do material de estrudado. Essa expansão resulta em um acréscimo de densidade em relação o material laminado, uma melhor drenagem do material solido ao final da extração e menor arraste de solvente pelos sólidos, na saída do extrator.

As principais vantagens da expansão (ou extrusão) são:

- ✓ Acréscimo da densidade em relação ao material laminado;
- ✓ Melhor percolabilidade por ser menos frágil, o material expandido, e por se ter menos finos;
- ✓ Melhor drenagem do material sólido ao final da extração, com menor arraste de solvente pelos sólidos;

De acordo com ERICKSON *et. al.* (1987), o grão de soja destinado ao processo de extração do óleo e da parte sólida (torta), tem a seguinte composição:

- ✓ Proteína 40%
- ✓ Lipídios 20%

- ✓ Celulose e Hemicelulose 17%
- ✓ Açúcares 7%
- ✓ Fibra bruta 5%
- ✓ Cinzas (base seca) 6%

2.1.4 Extração do Óleo da Soja

Os métodos mais comumente empregados na retirada do óleo do grão de soja são: a prensagem, a extração por solvente ou a combinação destes dois, chamado de misto (KENYON *et. al.*, 1948) e (PARAISO, 2001).

A semente de soja preparada em flocos entra no extrator com umidade na faixa de 9 a 12% em massa. Essa faixa de concentração é normalmente utilizada porque valores da umidade abaixo de 9% dificultam o movimento do solvente no seio do leito e valores acima de 12% dificultam a atuação do hexano na solubilização do óleo. O óleo não se solubiliza na água e o hexano solubiliza levemente. O solvente tem grande afinidade com o óleo, portanto a água presente no extrator sai totalmente na torta e a miscela, por sua vez, sai completamente livre de água.

A Figura 2.6, demonstra, de maneira simplificada, o fluxograma básico da extração do óleo de soja, onde nesta etapa do processo tem-se a floco/massa como matéria-prima de entrada, saindo à torta que é direcionada a um dessolventizador e tostador, para retirada do solvente e a miscela é direcionada para a destilaria, onde ocorre a concentração desta miscela, retirando o hexano e originando o óleo bruto.

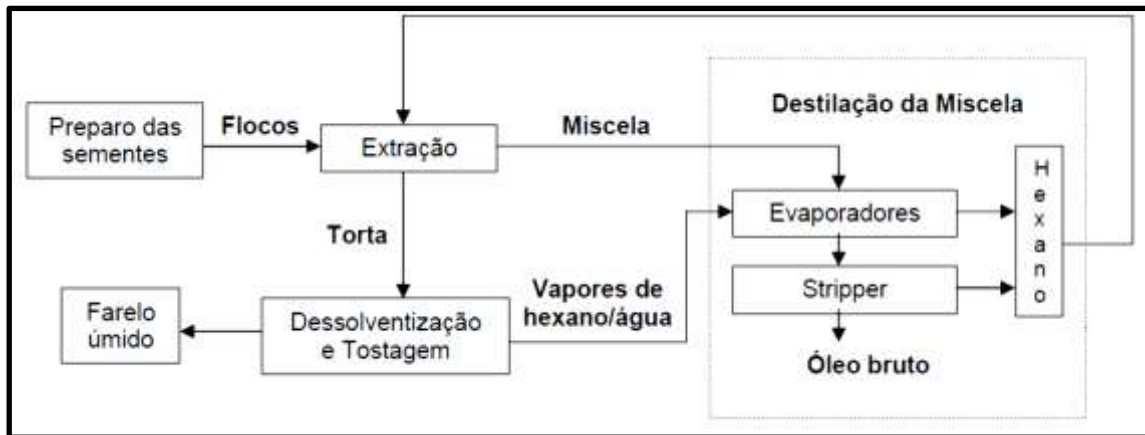


Figura 2.6 esquema geral da obtenção do óleo bruto de soja.

Até as duas primeiras décadas do século XX, a extração industrial de oleaginosas se fazia, exclusivamente pelo uso de prensas. As prensas, embora extraíam um óleo de boa qualidade, deixam resíduos no material sólido (torta) superiores, por exemplo, a 5% para grãos como o de soja. Tais resíduos além de implicarem em perda de óleo, afetam a qualidade da torta, que é também um dos produtos efluentes do extrator, o consumo de energia mecânica para este método de extração é elevado, em média 65,0 Kwh para cada tonelada de soja processada.

De acordo com THOMAS (2003), o processo denominado de misto ou misto descontínuo, corresponde à combinação do sistema de prensagem com o sistema de solvente e possui como característica um melhor rendimento, com relação ao processo descrito no paragrafo de cima, com menor gasto de energia e menor residual de óleo no farelo. Ainda pode ser encontrado em algumas empresas de pequeno e médio porte. Para PARAISO (2001), o consumo de energia mecânica, para este tipo de processo de extração, esta em torno de 46 Kwh por tonelada de soja, gerando um residual na torta de aproximadamente 1,3%.

A extração por solvente, por outro lado, é capaz de retirar o óleo, deixando resíduos inferiores a 1%. Em extratores do tipo rotocel, este resíduo de óleo deixado na torta atinge 0,60%. Segundo PARAISO (2001), o aspecto mais importante em relação a composição é o teor de óleo residual que deve ser menor que 1,0% e o teor de hexano que deve estar na faixa de 25 a 30%, o consumo de energia mecânica, para este tipo de extração, é de aproximadamente 25 Kwh por tonelada de soja. A miscela e outro produto do extrator, no processo de extração por solvente, formada pela mistura do óleo

com o solvente. Esta mistura, em estado líquido, é separada no processo de destilação da miscela, constituído com colunas evaporadoras e *stripper*.

A extração industrial do óleo de soja é normalmente realizada em extratores do tipo percolação. Estes têm como meta reduzir o teor de óleo dos flocos da semente de soja de um valor em torno de 19%, em massa, para um valor inferior a 1% utilizando o hexano como solvente.

Como podemos verificar na Figura 2.6, na etapa da extração, a massa laminada e expandida atravessa o extrator recebendo banho de solvente em fluxo contracorrente para que o hexano, por sua finalidade, arraste o óleo contido na massa, formando a miscela (mistura de óleo e solvente).

A extração por solvente, segundo KENYON *et. al.* (1948), requer um alto desenvolvimento e direcionamento técnico, embora o ganho para o processamento da soja, foi muito superior ao rendimento dos processos anteriores, desde seu surgimento, mostrou-se o modo mais interessante de se extrair óleos vegetais de suas matrizes. O sucesso do processo a solvente está em sua capacidade de reduzir a níveis bastante baixos, o resíduo de óleo presente em materiais oleaginosos. O solvente que se estabeleceu desde o início do processo a solvente foi à fração hexano do petróleo, que além de vir de uma fonte não renovável de matéria-prima, traz consigo os infortúnios atrelados ao mercado do petróleo, sendo ainda tóxico e inflamável. Ao longo dos anos, vários solventes têm sido testados para substituir o hexano. Nenhum, entretanto, conseguiu até o momento, reunir qualidades que superassem as suas, apesar dos mencionados inconvenientes.

A velocidade do extrator é determinada pela quantidade de material a extrair. Na partida de um processo, começa-se com até metade de sua capacidade nominal, regulando a velocidade de acordo com a evolução do processo. O solvente deverá ser isento totalmente de água. A quantidade de solvente é regulada por meio de medidor de fluxo. Um pré-aquecedor de solvente o aquece e mantém sua temperatura constante, sendo a do hexano em aproximadamente 60°C. O medidor de fluxo mede o solvente em litros, quando, em outros casos, a unidade de medição de solvente também é o quilograma (FERNADES-JUNIOR, 2009).

A extração com solvente é uma operação de transferência de massa amplamente utilizada na indústria de alimentos para retirar o óleo de sementes oleaginosas. Estas sementes, após serem preparadas em flocos, são colocadas em um ambiente adequado junto com o solvente de forma a ocorrer transferência do óleo da fase sólida para a fase líquida. O mecanismo do processo de extração com solvente pode ser visto através da Figura 2.7, conforme MILLIGAN (1984).

A Figura 2.7 ilustra quatro etapas distintas que devem ocorrer ao se extrair o óleo presente no floco. Estas etapas são as seguintes:

- ✓ Etapa 1 – refere-se ao contato do solvente com a superfície do floco;
- ✓ Etapa 2 – refere-se ao fenômeno de difusão do solvente da superfície do floco até o óleo a fim de dissolvê-lo
- ✓ Etapa 3 – refere-se ao fenômeno de difusão da mistura do solvente e óleo (miscela) através do floco até atingir a sua superfície; e,
- ✓ Etapa 4 – refere-se á drenagem da miscela para outra posição distante do floco extraído.

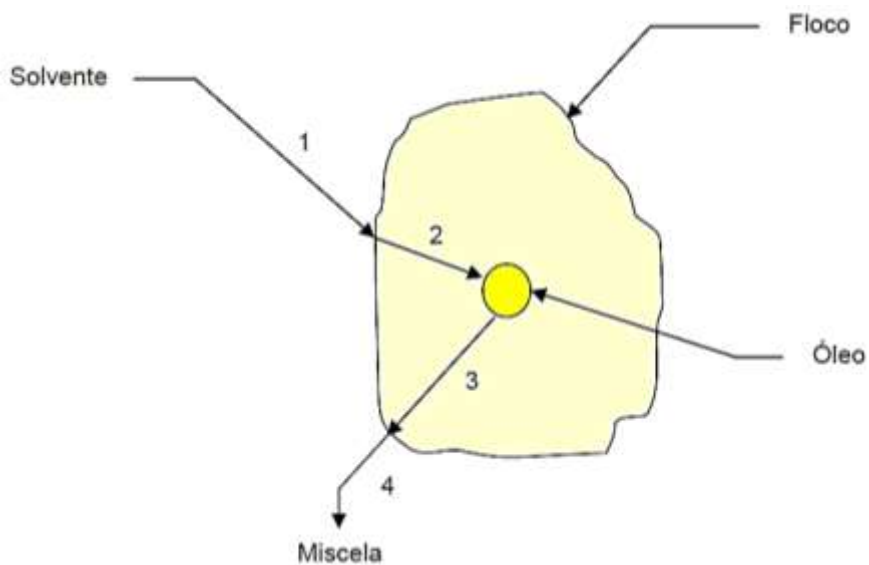


Figura 2.7: Mecanismo de extração do óleo por solvente.

O objetivo da extração é reduzir o teor de óleo no floco ao valor mais baixo possível com o uso mínimo de solvente. O alcance deste objetivo depende de dois fatores. O primeiro refere-se à quantidade de “óleo não extraído”, ou seja, aquele óleo que não foi extraído pelo solvente nas etapas 1 e 2 mostradas na Figura 2.7; e o segundo se refere ao “óleo de superfície”, ou seja, aquela quantidade de óleo que não completou

a etapa 4 da Figura acima devido a ineficiência no processo de drenagem da miscela. Para reduzir a quantidade de “óleo não extraído” ao mínimo, o floco deve ser preparado de maneira que haja a ruptura das células que contém o óleo, fornecendo assim, a máxima área de contato entre o óleo e o solvente; enquanto que para reduzir a quantidade do “óleo de superfície” ao mínimo, o floco deve ser preparado para formar um leito que não empacote durante o processo de drenagem (CUSTÓDIO, 2003).

A quantidade necessária de solvente é dependente da quantidade de material a ser extraído e de seu teor de óleo. A maior parte do solvente é levada pelo óleo, como a miscela, e a outra é levada pelo farelo. A quantidade de solvente no farelo depende da qualidade do material para a extração e do tempo para gotejamento. Em grande produção, o extrator gira a uma velocidade maior e o tempo de gotejamento é menor do que com menor produção. A parte de solvente no farelo que sai, embebido, varia entre 25 a 35%. O maior esforço é no sentido de não usar mais solvente do que o necessário na extração do óleo para alcançar o correto teor residual de óleo no farelo com matéria-prima (FERNANDES-JUNIOR, 2009).

2.1.4.1 Tipos de Extratores que utilizam hexano

O extrator pode ser entendido como o principal equipamento da planta de extração. Ele deve desempenhar as seguintes funções (REZENDE, 1998):

- ✓ Movimentar grandes volumes de sólidos, promovendo um tempo de retenção variando de 30 minutos a 120 minutos;
- ✓ Contatar os grandes volumes de sólidos com volumes igualmente grandes de solvente;
- ✓ Separar, após a extração, os sólidos do solvente de modo a minimizar o arraste de solvente.

Os extratores a solvente podem ser agrupados em extratores por percolação e extratores por imersão.

2.1.4.1.1 Extratores por Percolação

No extrator por percolação, o solvente líquido ou a miscela (mistura solvente-óleo) é bombeado sobre um leito de flocos (matéria prima em forma de lâminas), percola o leito e sai ao fundo através de placas perfuradas ou telas de sustentação. Outra forma de extração por percolação é com a entrada do solvente ou miscela pela base do extrator e sendo retirado pelo topo do mesmo.

O sucesso deste tipo de extrator está no menor volume que ocupa na planta de extração, pois o leito percolado é mais compacto que o de sólidos dispersos no extrator por imersão.

A drenagem do solvente em sistemas por percolação é também mais simples de ser realizada mecanicamente que em sistemas por imersão. Logo a seguir encontram-se os tipos mais comuns de extratores por percolação.

2.1.4.1.2 Extrator Rotatório

Os extratores rotatórios consistem numa carcaça cilíndrica no interior das quais existem células rotatórias em torno de um eixo central. À medida que giram, o solvente é aspergido sobre elas em contracorrente. Ou seja, o solvente percola os flocos e é coletado em tanques, sendo lançado sobre a próxima célula, consecutivamente, de modo que os flocos mais frescos (à entrada) filtrem miscela bem concentrada em óleo e, em sentido oposto, o solvente puro escoar por flocos pobres em óleo.

Na Figura 2.8, encontra-se o extrator rotatório, mais utilizado atualmente, sendo que o mesmo se chama de “*reflex*”. Nesta figura, podemos verificar a forma cilíndrica do extrator e realizando uma análise horizontal das caçambas do mesmo, podemos verificar que na caçamba de número 08, ocorre à entrada de solvente puro, onde o mesmo realiza a percolação com a massa, sendo que esta massa se movimenta para a direita da figura e o solvente + óleo é transportado para o lado esquerdo, pode-se verificar que da caçamba 01 até 07, ocorre o processo de drenagem desta miscela, com objetivo que ocorre o arraste do solvente para o dessolventizador-tostador.

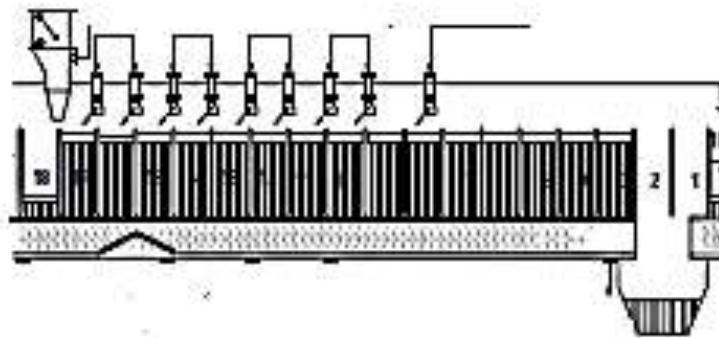
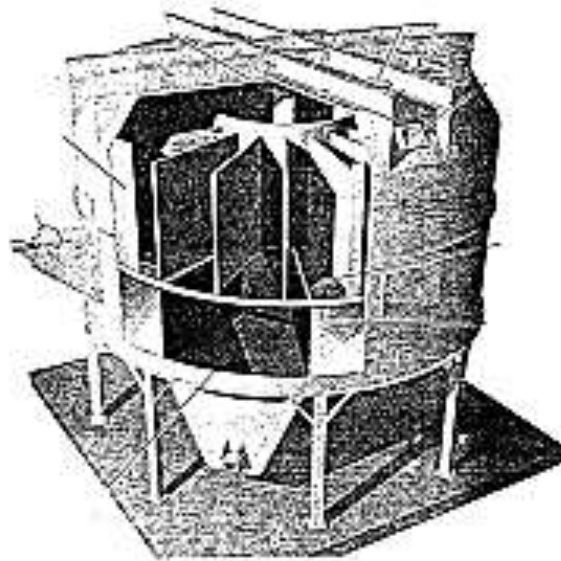


Figura 2.8 Extrator rotatório, tipo reflex. (adaptado de A&G Aceites y Grasas, 2000).

2.1.4.1.3 Extrator a Corrente e Cestos

O tipo mais antigo (vertical) combina percolações co-corrente e contracorrente. Na coluna descendente, meia miscela (miscela pouco concentrada) é bombeada ao topo da coluna e descende juntamente com os flocos frescos co-correntemente, até que o fundo seja atingido como miscela concentrada. Os cestos, então retornam em direção ao topo quando são percolados em contracorrente por solvente puro, antes que tenham seus conteúdos vertidos. O solvente que escoar deste lado da coluna atinge o fundo como meia miscela. O inconveniente desse arranjo é que o fluxo pelos cestos não pode ser ajustado de estágio para estágio. A Figura 2.9 demonstra os fluxos de entrada e saída da miscela e matéria-prima.

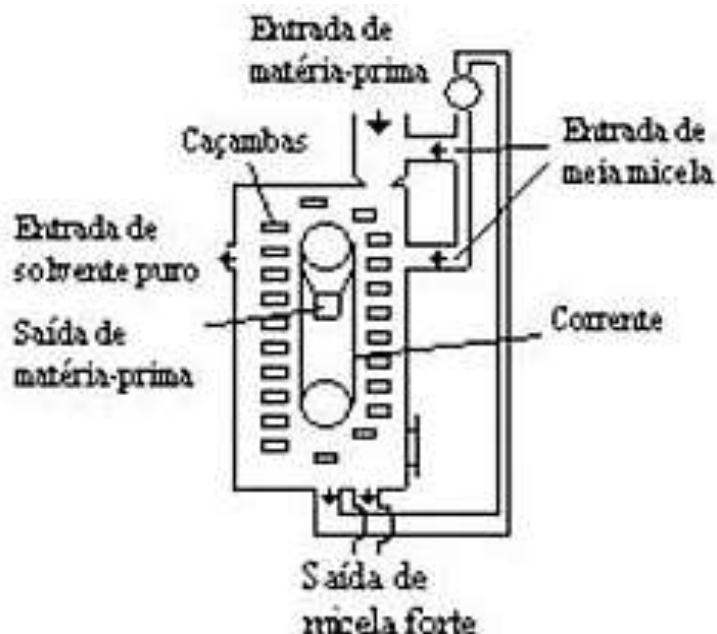


Figura 2.9 Extrator a corrente e cesto (Adaptado de A&G Aceites y Grasas, 2000)

O tipo mais recente opera horizontalmente de modo similar aos extratores rotativos. O líquido que flui pelos estágios combina recirculações com avanços da miscela, tornando esse arranjo mais flexível que o vertical.

2.1.4.1.4 Extrator de Correias Perfuradas

Neste tipo de extrator, a extração ocorre sobre uma correia circular perfurada. As células são formadas distribuindo-se leitos de flocos periodicamente, para se evitar mistura entre os estágios (Extrator De Smet). Na Figura 2.10, podemos verificar que neste tipo de extrator a remoção do óleo é feito de maneira contracorrente, onde no ponto 01, ocorre a entrada da massa com o máximo de teor de óleo e no ponto 02, ocorre a entrada do solvente puro, saindo no ponto 03, a miscela, com o maior teor de óleo e no ponto 04, sai a torta com o menor teor de óleo.

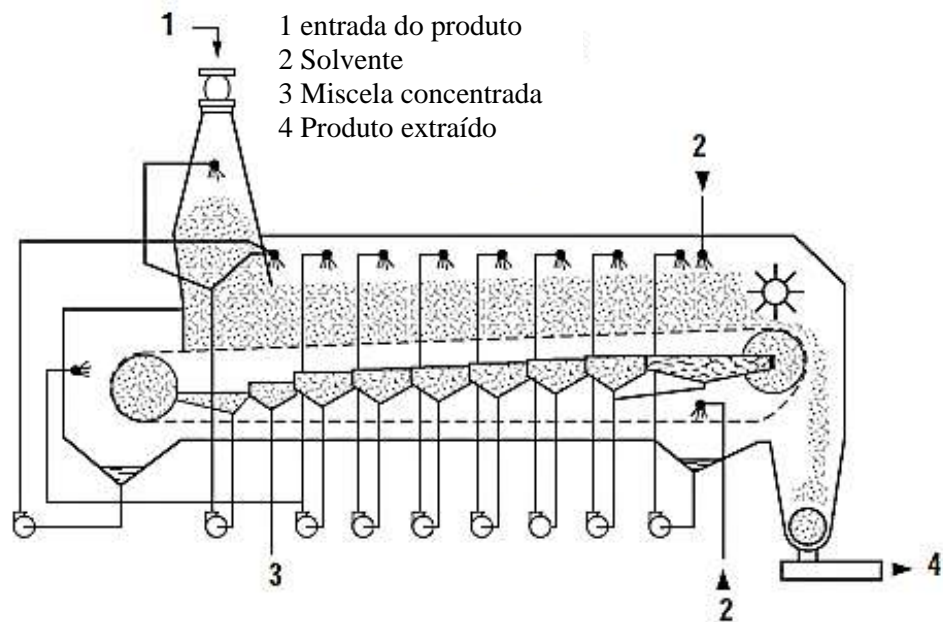


Figura 2.10 Extrator de correias perfuradas, conhecido por extrator De smet. (*Adaptado de A&G Aceites y Grasas, 2000*).

2.1.4.1.5 Extrator tipo Filtro

Este tipo de extrator consiste num sistema de filtração a vácuo. Nele, a drenagem natural por gravidade é intensificada pela imposição de vácuo na região coletora de líquido filtrado. A Figura 2.11 é um exemplo desse tipo de extrator, onde é conhecido por extrator Crown.

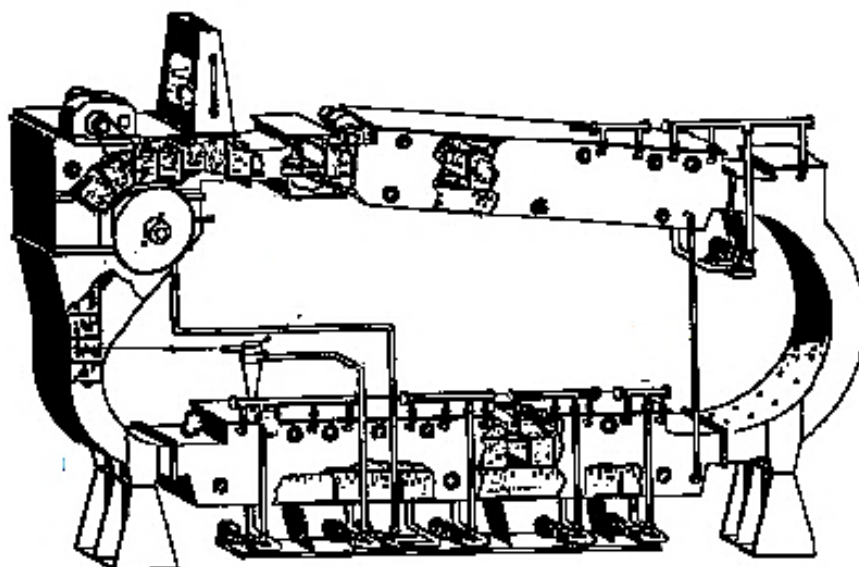


Figura 2.11 Extrator tipo filtro. (*Adaptado de A&G Aceites y Grasas, 2000*).

2.1.4.1.6 Extratores por Imersão

Os extratores por imersão, segundo REZENDE, 1998 são utilizados nos seguintes casos:

- ✓ Extração de pequenos volumes de sementes (fármacos e cosméticos);
- ✓ Extração direta de sementes de alto teor de óleo como coco, amendoim, caroço de algodão, além de outros que tendem a desintegrar formando finos;
- ✓ Extração combinada percolação-imersão em sistemas de dois estágios;

Os extratores por imersão têm como vantagens:

- ✓ Simplicidade de operação. Não é tão sensível ao preparo das sementes como o extrator por percolação; é capaz de extrair eficientemente finos que são muito impróprios para extração em sistemas por percolação.
- ✓ Facilidade de operação. A razão líquido/sólido não é muito crítica, sendo ajustada de modo a impedir fluxo inverso e arraste de finos.

No extrator, o material sólido é contatado com o solvente, liberando ao final do processo extrativo miscela (mistura óleo-solvente) e torta (sólidos extraídos), cujos teores de solvente precisam ser removidos tanto porque afeta as qualidades dos produtos, quanto porque diminuem custos ao serem reciclados para o extrator.

2.1.5 Separação do Óleo e Solvente

A miscela é descrita por THOMAS (2003) como sendo a mistura entre o hexano que entra quase puro no extrator com o óleo já presente nele. PARAISO (2001) vai além e define o termo miscela como sendo uma solução líquida formada pela dissolução completa do óleo no solvente. Tal processo provoca alterações moleculares na estrutura dos componentes que formam a solução e mudança energéticas no sistema envolvido. ZANETTI (1981) relata que a miscela de óleo de soja é uma mistura de óleo de soja e hexano que sai do extrator com cerca de 20 a 30% em massa de óleo e a destilação dessa mistura consiste em um conjunto de operações que visa à separação do solvente/óleo com o aquecimento da mistura.

A miscela na saída do extrator é bombeada ao tanque pulmão, onde é estocada para abastecer a destilaria, passando por quatro colunas evaporadoras, sendo as duas primeiras colunas economizadoras, onde se aproveita o ar quente da saída do dessolventizador e tostador, realizando a troca indireta entre os fluidos, onde na terceira coluna evaporadora ocorre a entrada de vapor originado na caldeira, mas realizando a troca de calor indiretamente e a última coluna de evaporação é do tipo *stripper*, onde há adição de vapor diretamente, com a função de arrastar a pequena porcentagem existente de hexano, esta última coluna opera com uma temperatura de aproximadamente 95°C. As três primeiras colunas de evaporação operam com um vácuo mínimo de 280 mmHg e na coluna terminadora (*stripper*), opera com um vácuo mínimo de 380 mmHg.

A dissolução, da miscela, envolve dois processos endotérmicos e um exotérmico. Em um primeiro momento as moléculas do óleo se separam em moléculas isoladas através de um processo endotérmico. As moléculas de óleo quando separadas podem dispersar-se no seio do solvente, tendo a necessidade de realizar a dissociação das moléculas do solvente para realizar a acomodação das moléculas do óleo. Este procedimento é feito empregando um processo endotérmico que pode ter uma magnitude de energia envolvida dependente do grau de polaridade do solvente e do tamanho das moléculas do óleo. A última etapa ocorre um processo exotérmico e se refere à interação das moléculas do óleo com as moléculas do solvente (PARAISO, 2001).

A evaporação consiste em uma das mais comuns e importantes operações na indústria de alimentos, estando presente em plantas tão diversas quanto à de processamento de leite, de processamento de sucos de frutas, de dessalinização de água, de purificação de óleos vegetais, além de vários outros processos extrativos que demandam purificação após extração por solvente.

A unidade de evaporação é uma das unidades que mais demandam energia em uma planta de processamento. Assim, a modelagem matemática dinâmica deste processo com vistas à otimização do consumo energético e à avaliação do desempenho de políticas de controle torna-se um requisito decisivo para operação economicamente viável.

Quando a unidade de evaporação segue-se à de extração por solvente de produtos com finalidades farmacêuticas ou comestíveis, a garantia de qualidade desse produto exige que se controle de modo preciso e rígido os níveis residuais desse solvente.

A modelagem matemática de processos e a simulação dos mesmos em computador têm permitido avaliações de custos operacionais, determinações de condições ótimas de operação e análises de desempenho de estratégias de controle de modo rápido e pouco dispendioso. Tais análises são de fundamental importância para uma operação segura, para manter o produto efluente do sistema de evaporação dentro de condições pré-estipuladas e ainda para minimizar custos.

As frações de hidrocarbonetos são produtos advindos da destilação do petróleo e, portanto, constitui-se em misturas de vários compostos, cada um dos quais com seus próprios pontos de ebulição e poderes de extrair o óleo.

A fração comumente chamada “hexano” tem conteúdo de n-hexano variando entre 45 e 90%. Outros constituintes em proporções significativas são o 2- e 3-metil pentano, o metil ciclopentano e o ciclohexano (Tabela 2.3).

Estudos com diferentes tipos de “hexanos” mostraram que o n-hexano puro extrai óleo de soja mais lentamente e óleo de algodão a mesmas taxas que as frações do petróleo comumente utilizadas. Apesar da toxidez e inflamabilidade, o “hexano” acabou sendo o solvente mais largamente utilizado em razão de sua alta estabilidade, das baixas perdas na evaporação, da baixa corrosão de equipamentos, dos baixos resíduos graxos e melhores sabor e aroma nos produtos.

Tradicionalmente, o hexano é adicionado à gasolina apesar de apresentar menor octanagem. Para justificar sua comercialização, a produção de hexano deve ser mais vantajosa que sua venda como combustível. Está, portanto, o seu custo, determinado pela oferta e procura desse combustível.

Na Tabela 2.1 esta demonstrada a composição do solvente hexano, utilizado no processo de extração de óleos vegetais, tendo maior concentração de n-hexano, seguido pelo 2-metil pentano; 2,3 dimetil butano e 3- metilpentano.

Tabela 2.1 Composição da fração de hexano, utilizada para extração de oleaginosas. (Adaptado de JOHNSON e LUSAS, 1983).

<i>SUBSTÂNCIA</i>	<i>VALOR</i>	<i>TESTE</i>
Máximo de Resíduo não-volátil (g/100ml)	0,001	-
Máximo de Enxofre	10	ASTM D 1266-
Composição (CGL: cromatografia , % área) n-Hexano	45 - 70	-
Metil ciclopentano	10 - 25	-
Total: 2-metil pentano; 2,3 dimetil butano e 3-	18 - 36	-
Máximo de ciclohexano	2,5	-
Máximo de benzeno	0,1	-

A recuperação de óleos vegetais das soluções obtidas em operações de extração do solvente é comumente acompanhada por evaporação seguida por dessorção com vapor d'água do extrato de óleo concentrado. Sabe-se que as relações entre pressão, temperatura e composição das soluções óleo – solvente é de importância para projetos mais econômicos e uma eficiente operação do equipamento para produzir um óleo de qualidade aceitável.

Além da relação citada acima, é de grande importância o estudo sobre os pontos de ebulição e as densidades das misturas dos óleos com o hexano comercial. Eles são úteis nos projetos de evaporadores a vácuos e dessolvedores, e para o controle de operações envolvendo temperatura, tempo de aquecimento, e a concentração das misturas de óleo – solvente de várias composições, para prevenir ou minimizar a fixação de coloração indesejável nas substâncias ou outros efeitos deteriorantes do calor.

Na Tabela 2.2 são fornecidas as pressões de vapor das soluções óleo de soja – hexano em várias temperaturas e concentrações de hexano.

Tabela 2.2 Pressões de vapor das soluções de óleo de soja - hexano. (*Adaptado de SMITH e WECHTER, 1950*).

<i>Temp. °C</i>	75	85	95	105	115	120
Conc. Hexano (F. molar)	Pressão Absoluta (mmHg)					
0,02	12	15	19	22	28	29
0,04	24	30	37	45	54	59
0,06	36	45	55	68	81	88
0,08	47	60	73	90	108	117
0,10	58	75	92	113	135	146
0,12	70	90	111	136	162	175
0,14	81	105	129	158	189	205
0,16	93	120	148	181	218	238
0,18	104	135	166	205	249	272
0,20	116	150	185	229	281	308
0,22	127	165	203	254	310	345
0,24	138	180	221	278	341	382
0,26	150	195	241	303	373	421
0,28	162	210	261	330	409	460
0,30	173	225	281	359	444	499
0,32	185	240	303	388	481	539
0,34	197	255	321	420	521	582
0,36	208	270	348	451	561	623

A mistura dos hidrocarbonetos hexano podem apresentar temperaturas normais de ebulição que variam de 65°C a 70°C (JOHSON, 1997). De acordo com RIBEIRO, (2005), o hexano ainda satisfaz uma serie de exigências referentes a um solvente apropriado como dissolver com facilidade o óleo sem agir sobre os outros componentes da matéria oleaginosa, possuir alta capacidade de solvência, ser imiscível em agua com a qual não forma azeotropos, apresentar baixo calor latente de vaporização e alta estabilidade. Como desvantagem, tem-se a alta capacidade inflamável e toxidez.

Segundo PARAISO *et. al.* (2003), as concentrações de hexano residual podem ser medidas através do seu “ponto de fulgor”, que é definido como o ponto mais baixo da temperatura em que os vapores saído do liquido, misturado com o ar, e em contato com uma chama, queimam na superfície desses liquido.

A curva de pressão de vapor do hexano, nos mostra que com vácuo de 380 mmHg a temperatura necessária para a volatilização do hexano é próximo de 47°C,

sendo assim a temperatura de operação de 95°C, elimina a presença de solvente no óleo, como demonstrado na Figura 2.12, demonstrada abaixo.



Figura 2.12 Curva de pressão de vapor do hexano. (Adaptado de PERRY e CHILTON, 1980).

A recuperação do hexano é efetuada em duas etapas paralelas no processo de extração industrial do óleo de soja, sendo que uma é a separação do hexano da torta (farelo), chamada de dessolventização-tostagem e a outra é a separação do hexano do óleo de soja, denominada destilação da miscela (RIBEIRO, 2005).

2.1.6 Dessolventização e Tostagem da Torta

No meio industrial, “dessolventizar” significa retirar o solvente e “tostar” significa que, além da retirada do solvente residual, o farelo de soja recebe um tratamento de calor e de umidade visando à qualidade nutricional, pois a tostagem inativa as enzimas da tripsina e desnaturam proteínas da soja, tornando-a suscetível ao ataque das enzimas proteolíticas, ou seja, torna o farelo de soja, que é praticamente todo usado para ração animal, digerível pelos mesmos.

A Figura 2.13 mostra o esquema da operação de dessolventização/tostagem e suas interfaces. Por onde, a torta proveniente da operação de extração é encaminhada para a operação de dessolventização/tostagem. Nesta operação são geradas duas correntes: uma é o farelo úmido, e a outra os vapores formados por hexano e água que

irão posteriormente ser utilizados como fluido de aquecimento na destilação da miscela, em especial, no primeiro evaporador.

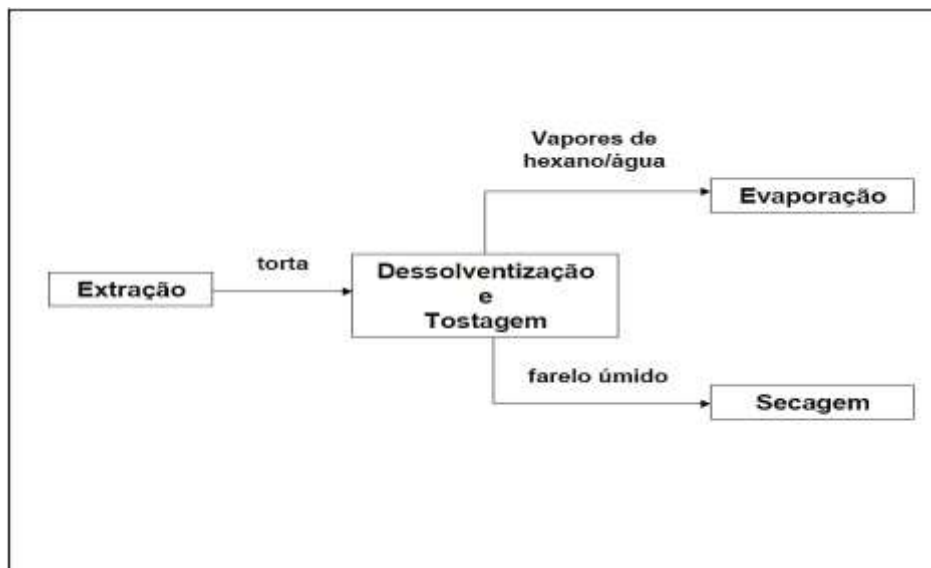


Figura 2.13 Fluxo geral da operação de dessolventização e tostagem.

A dessolventização/tostagem é uma operação onde a torta entra em contato direto com vapor d'água propiciando um *stripping* do hexano, o aumento da umidade e tostagem do farelo. O equipamento para fazer esta operação é denominado no meio industrial de dessolventizador/tostador (DT). A Figura 2.13 mostra o esquema geral de um DT.

A etapa de dessolventização visa separar a maior parte do hexano que ficou retido na torta durante a operação de extração. O material, normalmente, sai do extrator com um teor de hexano na faixa de 25 a 35%, em massa, a uma temperatura em torno de 50 °C e, em seguida, entra na parte superior do dessolventizador e tostador fluindo de cima para baixo através de compartimentos denominados de estágios ou pratos.

O dessolventizador e tostador são um equipamento que opera continuamente e realiza a sua tarefa em duas etapas. A primeira etapa é a dessolventização e logo em seguida a tostagem. Para tanto, este recebe a torta proveniente do extrator composta de uma mistura de farelo, hexano, de água e uma pequena quantidade de óleo residual e, através de aquecimento com vapor direto e indireto, obtém-se o farelo dessolventizado e tostado, bem como uma corrente de vapores que será utilizada na evaporação da miscela no primeiro evaporador.

A dessolventização e tostagem ocorrem simultaneamente dentro do mesmo equipamento, a torta é submetida a um tratamento térmico, onde os cinco primeiros estágios do equipamento possuem fundo duplo para aquecimento indireto da torta com vapor e, através da injeção automática de vapor direto no ultimo estagio do equipamento, este controle automático é comandado por uma válvula termostática que mantém a temperatura da saída dos gases do equipamento, em torno de 72°C e pelo tempo de resistência da massa dentro do equipamento mantém a temperatura da massa na saída do DT (dessolventizador/tostador) próximo a 97°C.

O dessolventizador opera sob uma ligeira depressão (próximos de -2,0 a -5,0 mmca). Pela curva de pressão de vapor, demonstrado pela figura 2.14, onde a temperatura de volatilização do hexano é abaixo de 68°C. A temperatura de operação da massa na saída do equipamento é de 97°C, o que garante a ausência de hexano no farelo. O tempo de resistência da massa no equipamento é obtido através da regulagem do nível de massa em cada estagio.

Os quatro pratos superiores constituem a seção de alimentação e o ultimo inferior à seção de tostagem, como pode ser verificado na Figura 2.14. Cada prato é varrido por braços presos a um eixo central rotativo para misturar os flocos e promover a passagem destes por aberturas que levam a um fluxo descendente em taxa controlada.

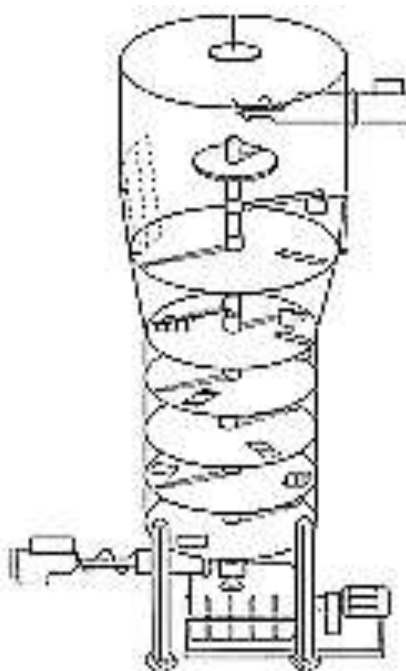


Figura 2.14 Desenho dos pratos internos do dessolventizador e tostador. (Adaptado de *A&G Aceites y Grasas*, 2000).

A etapa da tostagem tem por objetivo evaporar mais alguma quantidade de hexano que não foi evaporada na etapa de dessolventização, bem como fazer um tratamento térmico no farelo a fim de destruir enzimas presentes, prejudiciais à sua digestibilidade.

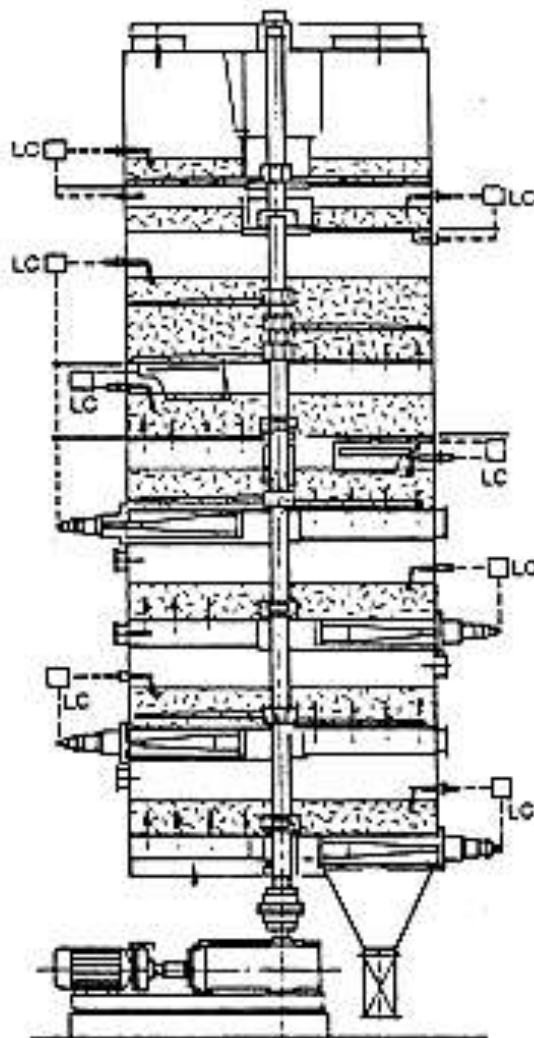


Figura 2.15 Detalhes do dessolventizador e tostador: pratos superiores para remover solvente e pratos inferiores para tostagem. (Adaptado de A&G Aceites y Grasas, 2000).

A tostagem correta está relacionada a três fatores que devem estar perfeitamente sincronizados: tempo de residência, temperatura e umidade. O tempo de residência situa-se em torno de 30 minutos, a umidade em torno de 20% em massa, a temperatura em torno de 110 °C na descarga do tostador. A Figura 2.15 demonstra os estágios do dessolventizador-tostador, onde os primeiros estágios são para retirar o solvente da torta e o último estágio é para tostar o mesmo.

2.1.7 Separação solvente-agua

O solvente obtido contém quantidade significativa de água proveniente do vapor utilizado no processo. Sua menor densidade em relação à água permite que este seja separado através de simples decantação (KEMPLER, 1998).

O formato dos separadores é distinto entre os fornecedores deste tipo de equipamento, mas todos possuem o mesmo princípio de separação dos dois líquidos, com base na diferença de peso específico, como o solvente tem menor densidade flutua sobre a água. Através de saídas adequadas, os dois líquidos são levados depois de separados. A diferença de nível das duas saídas determina a altura da camada de solvente no separador.

A separação entre o solvente e a água, quase sempre é visível em um visor, propiciando a verificação de eventuais impurezas no separador, como o arraste de fragmentos de farelo que gradativamente formam uma camada cada vez mais densa de limo entre o solvente e a água, com isso, pode influenciar na função do separador (FERNANDES-JUNIOR, 2009).

Sabendo que a água e o solvente não se misturam, uma pequena parte deste é absorvida pela água, calculando-se em 0,20% a uma temperatura de aproximadamente 20°C, da água, isso representa 2,0 Kg de solvente/ m³ água eliminada. Essa quantidade pode ser recuperada, bombeando-se a água, que sai da parte inferior do separador, para um evaporador vertical, onde esta água passa por um trocador de calor, é aquecido a 100°C, por meio de calor indireto, através de uma serpentina de vapor. Os gases liberados neste processo são direcionados as primeiras colunas evaporadoras ou ao condensador e o condensado retorna novamente aos tanques de separação solvente-agua (FERNANDES-JUNIOR, 2009).

2.1.8 Secagem do farelo

Após a torta sair do dessolventizador e tostador, segue para um moinho quebrador, que mói aglomerados de torta formados dentro do equipamento, para facilitar a secagem, e posteriormente passa para uma rosca e pelo secador. No secador, a

umidade do farelo é reduzida através de injeção de vapor indireto, monitorado por uma válvula redutora de pressão de vapor.

2.1.9 Peletização do Farelo de Soja

Posteriormente a passagem no secador, o farelo é transportado para a peletização, onde o farelo floculado quente alimenta as peletizadoras, sendo que o processo de peletização tem o objetivo de compactar o farelo, aumentando o seu peso específico formando os pallets. Com o farelo peletizado aumenta-se a capacidade de armazenamento nos armazéns e do transporte.

Após o farelo ser peletizado passa pela caixa de alimentação dos secadores-resfriadores, e é distribuído entre três secadores-resfriadores, sendo que neste processo ocorre a secagem e resfriamento dos pellets através da aspiração do ar ambiente pelos exaustores. O ar frio insuflado atravessa a massa de pellets resfriando-a a temperatura próxima da ambiente e retirando a umidade do produto por evaporação. A secagem possibilita a redução da umidade em torno de 12,5%. Estes valores de umidade no farelo são garantidos através do controle do processo desde a etapa de ressecagem do grão, que deve reduzir a umidade do grão a 10,5%, assim como a pressão e a qualidade do vapor seco saturado produzido pela caldeira.

O farelo peletizado chega ao armazém de farelo, por fitas transportadoras e são então armazenados. O volume do material embarcado geralmente excede a capacidade de produção garantindo uma rotatividade frequente do farelo dentro do armazém, não permitindo estoque por mais de oito dias dentro do mesmo. O armazém estoca farelo peletizado que será carregado a granel em caminhões ou vagões no setor de expedição, e uma área restrita, estoca farelo moído, embarcando em sacarias de 50 Kg.

2.1.10 Degomagem do Óleo Bruto

Após o processo de destilação da miscela, o óleo bruto é transportado para o processo de degomagem, onde o mesmo inicia em um tanque pulmão, cujo óleo bruto é armazenado a uma temperatura aproximada de 77°C, deste tanque o óleo é bombeado ao tanque de mistura, onde ele será misturado com água. A vazão de óleo é controlada por duas válvulas eletropneumáticas. A água proveniente da desmineralização é mantida a temperatura em torno de 80°C, mantido através de um controle automático por injeção

de vapor direto com o auxílio de um transmissor de temperatura. Esta temperatura deve ser suficiente alta para destruir bactérias patogênicas, as enterobacterias, principalmente a *Escherichia coli*, que através de matéria fecal, pode vir a contaminar a água, devido à água não sofrer cloração. Esta água é bombeada para o tanque de mistura, a vazão de água é proporcional ao percentual de fosfatídeos presentes no óleo bruto e a quantidade de óleo processado, varia de 2% a 4%. A mistura água e óleo são bombeados para as centrifugas, para que se possam separar as gomas também conhecidas por lecitina (fosfatídeos hidratáveis) do óleo. Este processo de degomagem pode ser observado na Figura 2.16.

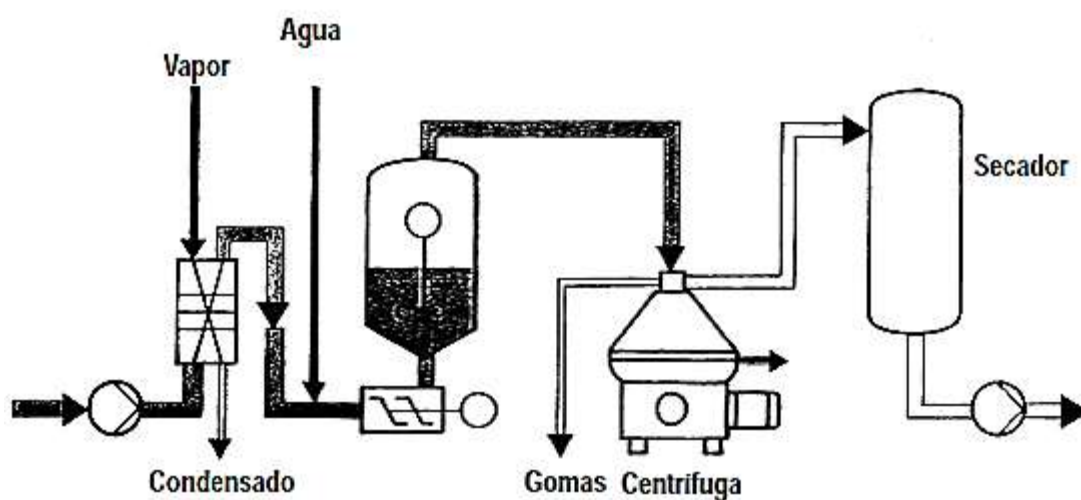


Figura 2.16 Degomagem com água, para óleos comestíveis. (adaptado de A&G Aceites y Grasas, 2000).

A lecitina cai por gravidade em um tanque de armazenamento, onde é bombeado para o setor de extração, onde a mesma é misturada ao farelo. O óleo ao sair das centrifugas segue então para o secador a vácuo, onde é submetido a um vácuo em torno de 560 mmHg, para que se possa ser retirada a sua umidade. Saindo do secador o óleo é bombeado para um trocador de calor, para assim ser armazenado em oito tanques, com temperatura de aproximadamente 57°C.

O processo de refino deve incluir a degomagem, a neutralização, o branqueamento e a desodorização, sendo necessária a remoção dos ácidos graxos livres e fosfatídios, pois estes afetam a estabilidade do produto. Este processo não afeta a composição dos ácidos graxos e glicéridos, mas remove pigmentos e abaixa o conteúdo de nutrientes que estão em menor quantidade no óleo, tais como os tocoferóis (31- 47%), esteróis (25 – 32%) e o esqualene (15 – 37%).

Além destes constituintes, existem no óleo bruto, pequenas quantidades de outras substâncias, incluindo ceras, pigmentos (por exemplo, o β - caroteno que dá a cor amarela ao óleo de soja) e minerais. As ceras são provenientes da capa das sementes e são constituídas por ésteres de cadeia longa, alcoóis e ácidos graxos.

2.2 Obtenção do Óleo bruto: destilação da miscela

Na separação do solvente do óleo, ocorre com o aquecimento da mistura até ou acima do ponto de ebulição, o limite de ebulição do solvente. O processo contínuo ocorre em colunas de destilação, utilizam-se colunas que trabalham com vapor contra corrente e com vapor direto na coluna final, chamada de *stripper*, esta ultima coluna não era utilizada em larga escala, alguns anos atrás. Para evitar a condensação do vapor direto e a formação de emulsões, os primitivos solventes para extração tinham ponto de ebulição muito elevado, exigindo uma temperatura ao redor de 110°C. Essa temperatura influi obviamente na qualidade do óleo, bem como na lecitina obtido do óleo de soja e, mais tarde, dificulta o processo de refino do óleo. Por isso, passou-se a utilizar a destilação a baixas pressões. Com vácuo de 100 a 300 mmHg, e emprego de hexano como solvente, são suficientes temperaturas finais de aproximadamente 85°C (FERNANDES-JUNIOR, 2009).

As composições típicas dos óleos de soja bruto e refinado são dadas na Tabela 2.3 e as composições dos ácidos graxos do óleo de soja são dadas na Tabela 2.4.

Tabela 2.3 Composição média do óleo bruto e refinado. (ERICKSON, 1987).

	<i>Óleo Bruto</i>	<i>Óleo Refinado</i>
Triglicerídeos	95 – 97	> 99
Fosfatídeos	1,5 – 2,5	0,003 – 0,045
Matéria Insaponificável	1,6	0,3
Esteróis da Planta	0,33	0,13
Tocoferóis	0,15 – 0,21	0,11 – 0,18
Hidrocarbonetos	0,014	0,01
Ácidos Graxos Livres	0,3 – 0,7	< 0,05
Resíduos Metálicos	-	-
Ferro (ppm)	1 – 3	0,1 – 0,3
Cobre (ppm)	0,03 – 0,05	0,02 – 0,06

De acordo com PARAISO (2001), a destilação da miscela foi desenvolvida e aprimorada ao longo dos anos, sempre com o objetivo de economizar energia no processo de concentração da miscela, recuperando o máximo do solvente hexano e buscando o aumento da capacidade de processamento de miscela. O aperfeiçoamento, desta tecnologia, foi descrito por este autor e enfatizado por CUSTODIO (2003), em três fases mais evidentes.

Tabela 2.4 Composição dos ácidos graxos do óleo de soja. (ERICKSON, 1987).

<i>Componentes do Ácido</i>	<i>Composição do Ácido Graxo (%)</i>	
	Limite (range)	Média
Saturado		
Láurico	-	0,1
Mirístico	< 0,5	0,2
Palmítico	07 - 12	10,7
Esteárico	2 – 5,5	3,9
Araquídico	< 1,0	0,2
Bênico	<0,5	-
Total	10 – 19	15,0
Insaturado		
Palmitoleico	< 0,5	0,3
Oleico	20 - 50	22,8
Linoleico	35 - 60	50,8
Linolênico	2 – 13	6,8
Eicosenóico	< 1,0	-
Total	-	80,7

O processo de obtenção do óleo está originalmente relacionado com a extração de lipídios das sementes vegetais. Os métodos comumente empregados nesta obtenção são a prensagem, a extração por solvente ou a combinação destes, também chamado de misto (SAVASINI, 1981).

Uma estratégia importante visando à redução de custos e a proteção do meio ambiente e do consumidor, nas indústrias já instaladas, é procurar estabelecer as melhores condições de operação do processo. Tais condições podem propiciar um consumo menor de energia e um nível mais elevado de recuperação de hexano. As indústrias instaladas no Paraná/Brasil utilizam o processo contínuo de extração por solvente, sendo hexano o solvente utilizado. As operações deste processo que deverão

ser principais numa estratégia de redução de custos são: a extração do óleo por solvente, a destilação da micela e a dessolventização-tostagem do farelo uma vez que elas consomem muita energia e possuem uma intensa manipulação com o hexano (PARAISO, 2001).

Segundo o próprio autor citado acima, um estudo mais aprofundado das condições das operações envolvidas na obtenção do óleo e farelo de soja pode possibilitar à indústria estabelecer as melhores condições de operação resultando na economia de energia e melhorias na recuperação de hexano. Assim, uma metodologia deve ser desenvolvida no sentido de fornecer às indústrias interessadas ferramentas adequadas para que as mesmas possam facilmente estabelecer a qualquer momento as melhores condições de operação dos equipamentos envolvidos, bem como outras situações que prevejam a recuperação máxima de hexano e o consumo mínimo de energia. Para que esta análise possa ser rápida e eficiente deve-se utilizar a simulação computacional, a qual se baseará em modelos provenientes de balanços de massa, de energia e de equações de equilíbrio relacionados aos sistemas envolvidos. Aliada a esta parte anteriormente descrita, seria fundamental a introdução no estudo de um método simples e eficiente.

Para uma modelagem e simulação de processos industriais, incluindo um processo de evaporadores em serie, a predição de propriedades de difícil aquisição por sistemas convencionais de análise de um processo pode ser realizada de forma indireta, por analisadores virtuais, através da medida de variáveis correlacionadas à propriedade que se deseja estimar (GONZALEZ, 1999).

Hoje, o desenvolvimento de analisadores virtuais é feito através da seleção de variáveis secundárias, técnicas de modelagem lineares ou não lineares e técnicas computacionais (CONZ, 2005). As variáveis secundárias são aquelas de fácil aquisição. Por exemplo, em uma coluna de destilação, as composições de produtos são normalmente variáveis a serem inferidas, enquanto que as variáveis secundárias são temperaturas, pressões e vazões. Entre os métodos de seleção das variáveis secundárias, destacam-se os baseados em análises combinatórias, análises de sensibilidade, buscas aleatórias e os métodos evolutivos, que consistem em adicionar ou remover variáveis buscando o aprimoramento do modelo em questão (FORTUNA, *et. al.*, 2007). Existem

também métodos de seleção de variáveis baseados na heurística de engenheiros e técnicos do processo em questão (CONZ, 2005).

PARAISO, *et. al.* (2003), apresentaram um modelo matemático e simulação da etapa de evaporação do hexano. A validação do modelo desenvolvido foi feita através da comparação dos dados operacionais de um processo de extração e destilação da miscela, para a obtenção de óleo de soja, realizando um conjunto de simulações onde foi analisado, por comparações, a influência do fluido de aquecimento e da vazão de alimentação na concentração de saída do evaporador, os efeitos da temperatura da alimentação, da concentração e da pressão nos resultados operacionais do processo real de evaporação e a comparação entre os resultados considerando a miscela como solução real e ideal.

Atualmente, os simuladores de processos industriais são uma realidade nos diferentes ramos das industriais, bem como nas diferentes instituições de pesquisas. A simulação assistida por computadores é uma das mais importantes ferramentas tecnológicas de processos, principalmente na análise inicial, antes de qualquer mudança de variáveis operacionais em um processo industrial. Na indústria química, esta pode ser aplicada tanto na fase de projeto, como na fase operacional do processo. A demanda crescente pela simulação computacional nas indústrias química levou, nas últimas décadas ao desenvolvimento e aplicação de inúmeros softwares comerciais, entre eles se encontra o *HYSYS*.

A simulação de um processo pode ser entendida como a utilização de um programa computacional contendo modelos matemáticos que representam o seu comportamento, assim como o de seus equipamentos, a partir de equações características. Esses modelos são baseados nos balanços de massa e energia, nas relações de equilíbrio de fases e químico, em dados termodinâmicos e experimentais e em correlações para as taxas de reação e transferência de massa e calor.

No início dos anos 90, com a introdução do conceito de programação orientada ao objeto de determinado processo industrial, iniciou-se o projeto de utilização do software *HYSYS*, utilizando desde então, a linguagem C⁺⁺. Com a disponibilidade de ferramentas deste tipo pode-se, modelar processos industriais e projetar uma mudança de paradigma de um ambiente de soluções não integradas, característico da atividade da

Engenharia de Processos Químicos, para um ambiente dinâmico com constantes trocas de informações do processo.

2.2.1. Separação do Óleo de Soja do Solvente Hexano

O processo de separação do óleo de soja do solvente hexano passou por alterações importantes desde a sua concepção original, por isso esta seção procura mostrar estas principais alterações. Primeiro será mostrado o fluxograma do projeto original e, posteriormente, mais dois fluxogramas contendo as mudanças importantes que ocorreram neste processo, de acordo com (PARAÍSO, 2001).

O projeto original de destilação da miscela, com o objetivo de obter óleo bruto de soja, foi concebido sem grande preocupação com a economia de energia. Ele foi instalado nas primeiras indústrias de processamento do óleo de soja cuja preocupação principal era com a qualidade do óleo produzido sem grande preocupação com os custos de produção.

A Figura 2.17 mostra o fluxograma básico deste processo, sequencias e interligações do projeto original de obtenção do óleo bruto e farelo de soja. Ele mostra a soja preparada em flocos e o solvente hexano entrando no extrator de onde saem a miscela e a torta. A torta é encaminhada ao dessolventizador-tostador (DT) com o objetivo de separar o hexano do farelo através de um *stripping* com vapor direto; o farelo úmido sai no fundo e os vapores que saem no topo seguem para a condensação e depois para a decantação onde a água se separa do hexano que retorna ao processo. Por sua vez, a miscela passa por um conjunto de operações denominado de destilação da miscela, como pode ser visto na parte pontilhada, em destaque na Figura abaixo. Nesta etapa a miscela passa primeiro por um evaporador onde sofre aquecimento de vapor condensado a fim de evaporar o máximo possível hexano e se concentrar. A miscela concentrada vai para uma coluna onde sofre um *stripping* de vapor direto e daí se obtém o óleo bruto no fundo e os vapores de hexano/água no topo, os quais se juntam ao vapor de hexano que sai do evaporador e seguem para um condensador e depois para um decantador onde a água separa do hexano que retorna ao processo. No projeto original da destilaria, não se observa ainda uma grande preocupação com os níveis de energia

consumidos. Preocupava-se com a qualidade do óleo produzido, mas não se levava em conta os custos de produção.

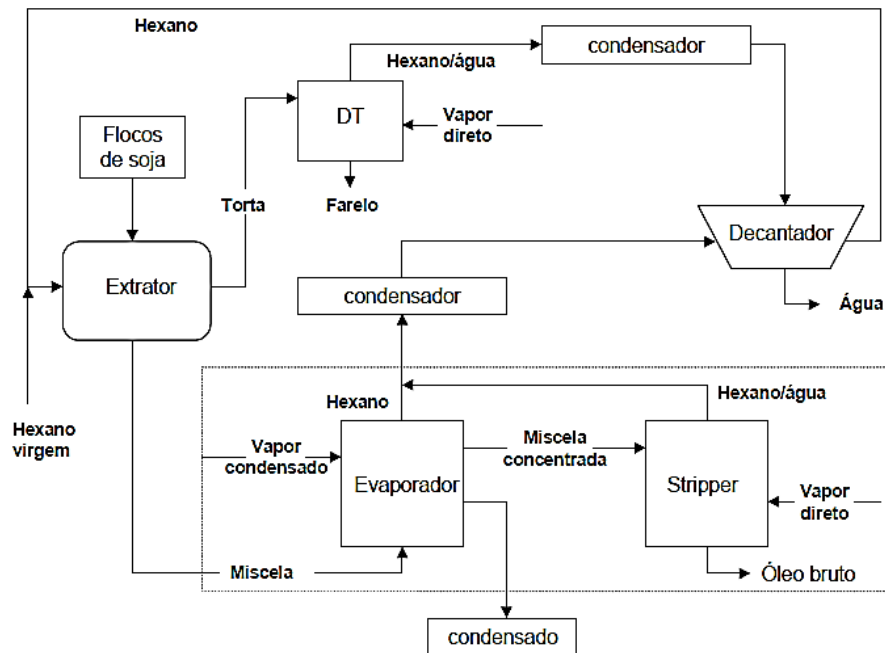


Figura 2.17 Fluxograma do projeto original de destilação da miscela. (adaptado de PARAISSO, 2001).

Este sistema de destilação da miscela, como mostrado na Figura 2.17, foi usado em pequenas indústrias, cuja capacidade era na faixa de 100 a 200 toneladas de processamento de soja por dia.

O segundo sistema de destilação é uma evolução do primeiro, cujas modificações foram concebidas na perspectiva de economizar energia. Essa economia se manifesta na utilização dos vapores quentes provenientes do DT como fonte de calor no evaporador ao se promover a concentração da miscela em 90% ou mais. Desta forma eliminou-se a necessidade de se utilizar quantidades expressivas de vapor indireto no evaporador. A Figura 2.18 mostra o esquema de destilação da miscela.

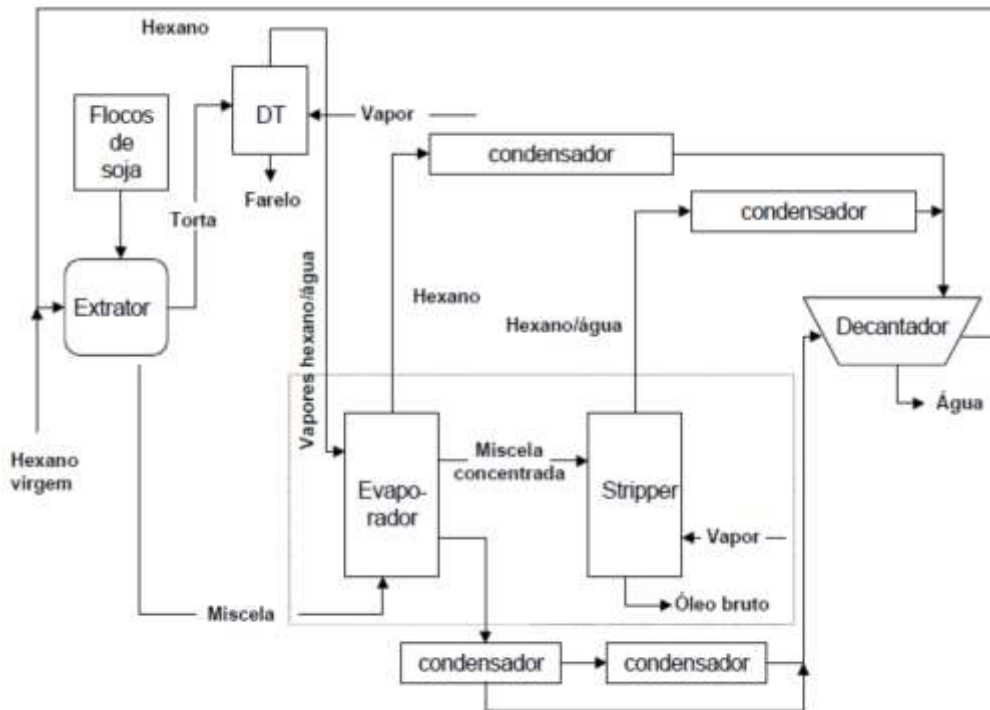


Figura 2.18 Fluxograma do segundo sistema de destilação da miscela (*adaptado de PARAISO, 2001*).

O fluxograma da Figura 2.18 apresenta algumas alterações em relação ao fluxograma da Figura 2.17. A primeira, e mais importante, é a passagem dos gases de topo do DT através do evaporador, a fim de aquecer a miscela e evaporar o hexano. Com isso, o evaporador funciona também como um condensador; porém, muitas vezes os vapores não se condensam totalmente e necessitam de passar por uma condensação antes de chegar ao decantador. A outra alteração é que os vapores que saem do evaporador e da coluna *stripper* passam cada uma por um condensador específico até chegar ao decantador.

O terceiro sistema de destilação é uma evolução do segundo sistema e difere deste pela introdução na linha de mais um evaporador. A Figura 2.19 mostra esta alteração e as etapas nas quais ocorre a separação do óleo do solvente. São três etapas, e para cada uma delas existe um aparelho especial: o pré-evaporador ou evaporador principal, o evaporador posterior e a coluna de *stripping*.

A Figura 2.19 mostra o sistema básico de destilação da miscela utilizado atualmente no meio industrial. Ele permite maior produção, economia de energia com o aproveitamento dos vapores quentes da dessolventização do farelo e melhor qualidade do óleo bruto com a operação a vácuo dos equipamentos. Este vácuo propicia uma

temperatura de operação mais baixa, condição esta que favorece a qualidade do óleo bruto produzido.

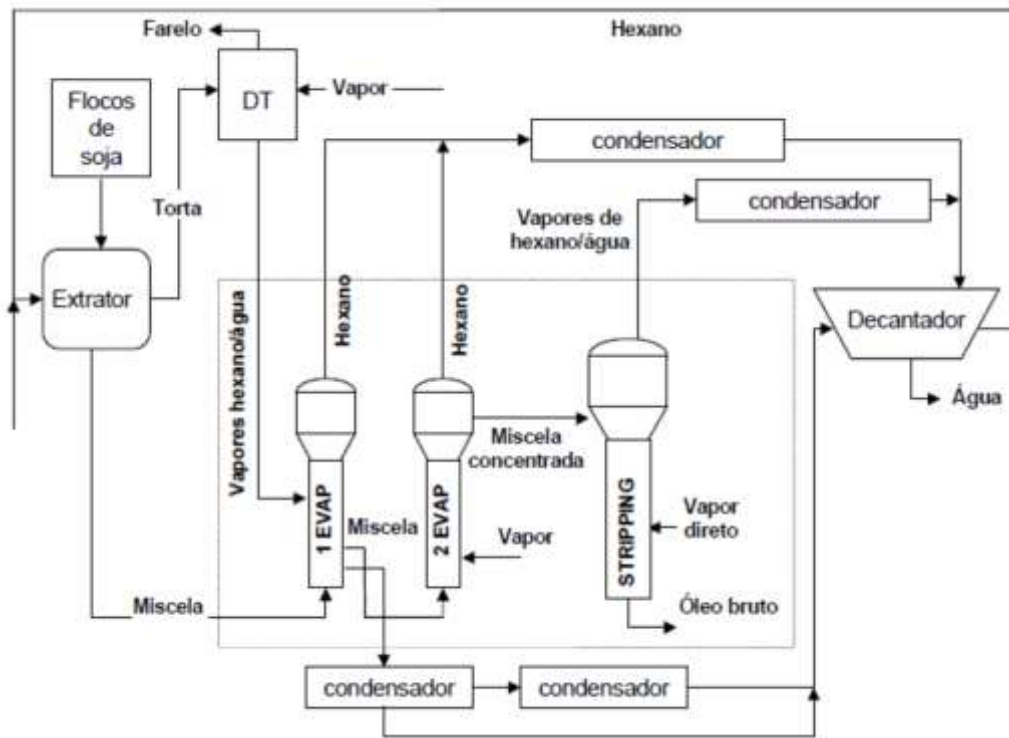


Figura 2.19 Esquema do terceiro sistema de destilação da miscela. (adaptado de PARAISO, 2001).

De acordo com FERNANDES-JUNIOR (2009), o método demonstrado na Figura 2.19, permite maior produção e uma economia de calor, com o aproveitamento dos vapores saturados da dessolventização, uma mistura de solvente e vapor de água, para aquecimento do primeiro evaporador. Os dois primeiros evaporadores são construídos dentro do princípio de evaporador de película ascendente. A parte estreita inferior forma uma câmara de vapor, pela qual a miscela, que entra por baixo, sobe através de um feixe vertical de tubos, e com isso se aquece de tal maneira que uma grande parte do hexano se evapora. As gotículas de vapor e solvente se desviam para dentro da parte superior larga, saindo da miscela remanescente, que foi da parte superior para o evaporador seguinte.

A destilação da miscela tem como objetivo separar o óleo bruto do solvente hexano. Utiliza-se como operações unitárias básicas nesta separação a evaporação e o stripping. O fluxograma abaixo demonstrado pela Figura 2.20 apresenta outro tipo de arranjo do processo de destilação da miscela, sendo que a principal diferença com

relação ao arranjo da Figura 2.19 são duas colunas evaporadoras economizadoras, utilizando o gás quente que sai do dessolventizador e tostador, sendo que estas nos arranjos anteriores eram constituídas de apenas uma coluna economizadora. Neste arranjo da Figura 2.20, também é composto por uma coluna evaporadora, utilizando o vapor oriundo da caldeira e uma coluna evaporadora do tipo “stripper”.

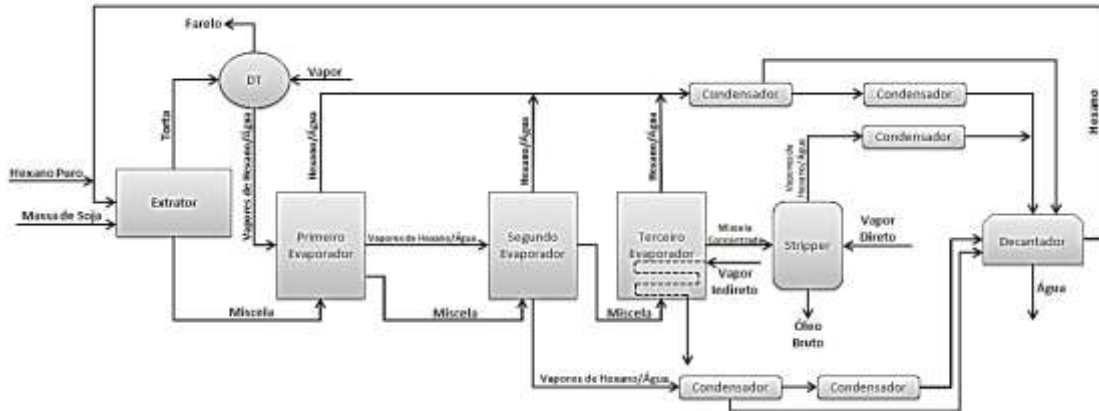


Figura 2.20 Fluxograma do processo de destilação da miscela.

A separação destes componentes é denominada de destilação da miscela, que se compõe da evaporação e *stripper*. Nestas operações, quantidades expressivas de energia são utilizadas, na forma de vapor. O valor estimado é de 40 Kg de vapor por tonelada de soja processada (JONGENELEN, 1976).

A miscela entra nos primeiro evaporador com uma concentração aproximada de 20 a 30% e recebe o aquecimento dos vapores condensado do dessolventizador/tostador (DT), com isso o hexano, na forma pura, é recuperado na forma de vapor, após passar inicialmente pelos dois evaporadores, a miscela sai com uma concentração aproximada de 65 a 67% de óleo. Com essa concentração, a miscela entra no terceiro evaporador e sofre um aquecimento de vapor d’água condensado. Este aquecimento provoca a separação de mais uma parte do hexano na forma de vapor e a miscela sai com uma concentração de aproximadamente 95 a 98% em óleo. Nesta faixa de concentração, a taxa de evaporação do hexano é muito baixa, mesmo com o aumento da temperatura, logo outro tipo de processo deve ser efetuada para a separação, sendo que este equipamento é uma coluna *stripper*, onde que no final deste processo, o óleo sairá com ausência de hexano, sendo nomeado como óleo bruto.

Os equipamentos utilizados no processo de destilação da miscela serão descrito abaixo.

2.2.2. Evaporadores

2.2.2.1. Classificação dos Equipamentos para vaporização

Na indústria existem dois tipos principais de equipamentos para vaporização: o trocador de vaporização e o vaporizador com caldeira.

O vaporizador com caldeira é um equipamento que é aquecido diretamente. Um trocador de vaporização não é aquecido diretamente pela queima do combustível, e converte o calor sensível ou calor latente de um fluido para o calor latente de vaporização de outro fluido.

Quando um trocador de vaporização for usado para a água ou para uma solução Aquosa, é uma boa convenção denominá-lo de evaporador. Se ele for usado para suprir as necessidades de calor no fundo de uma coluna de destilação, quer o vapor formado seja da água ou de qualquer outro líquido, ele será chamado de refeedor. Quando ele não é usado para a vaporização é conhecido simplesmente como vaporizador.

Quando um evaporador é usado juntamente com um sistema gerador de potência para a produção de água pura ou para a formação de processos de evaporação associados à geração de potência, ele se chama de evaporador de planta de potência. Quando um evaporador é usado para concentrar uma solução química pela evaporação da água solvente, ele se chama evaporador químico.

Essas duas classes possuem projetos diferentes. Contrariamente ao caso de um evaporador, o objetivo do refeedor é oferecer parte do calor necessário para a destilação e não uma mudança de concentração, embora, em geral, esta variação de concentração possa ocorrer.

Infelizmente, até o momento, certos tipos de evaporadores são ainda projetados mais como uma arte do que como uma soma racional de resistências térmicas individuais para o fluxo de calor. Isto se deve aos elevados coeficientes de transmissão de calor com os quais certos tipos de evaporadores operam e à dificuldade de identificar cada uma das resistências individuais, as quais constituem a resistência térmica global.

2.2.2.2. Comparação entre a evaporação numa planta de potência e a evaporação química

- ✓ *Planta de potência*: separação da água pura da água comum ou tratada eliminação por rejeitos inferiores; porção não evaporada constitui o resíduo.
- ✓ *Evaporador químico*: porção não evaporada constitui o produto; ausência de rejeitos inferiores.

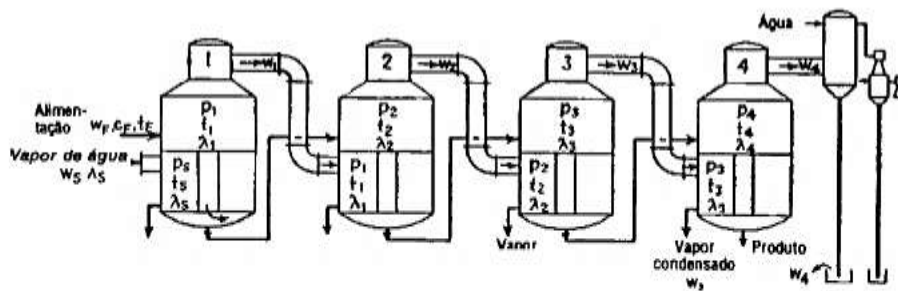
A partir das definições acima, determina a primeira de uma série de diferenças entre a planta de potência e a evaporação química. Estas são as seguintes:

- ✓ *Ausência de rejeitos inferiores*. Os evaporadores químicos não operam com rejeitos inferiores, e, em vez do líquido ser usado numa alimentação em paralelo a cada corpo, ele alimenta sistemas com estágios de múltipla operação em série. Os métodos comuns de alimentação são indicados conforme ilustrados na Figura 19 a e b. A alimentação do primeiro estágio de operação é parcialmente evaporada nela e parcialmente em cada uma das operações sucessivas. Quando o líquido de alimentação tem o mesmo sentido de escoamento, ele fornece uma alimentação frontal ou dianteira, e quando o sentido é contrário, ele fornece uma alimentação de retorno ou realimentação. De um ponto de vista do uso efetivo de um potencial, prefere-se usar a alimentação dianteira. Se o líquido for muito viscoso, existirá uma vantagem para usar a alimentação de retorno, uma vez que a temperatura do primeiro estágio de operação é sempre a maior de todas, e a viscosidade correspondente será menor. A ausência de rejeitos inferiores possibilita uma maior recuperação de calor num evaporador químico.
- ✓ *Aumento do ponto de Ebulição (BPR)*. Embora os evaporadores químicos possam produzir elevadas transferências de calor, sob certas condições eles são incapazes de uma elevada utilização de potenciais de temperatura e consequentemente exigem superfícies maiores. Isto resulta no fato de que uma solução aquosa concentrada sofre uma *elevação do ponto de ebulição* em relação à temperatura de saturação da água pura à mesma pressão. A diferença entre a temperatura do vapor que aquece e a temperatura de saturação que corresponde à pressão do vapor de operação é a *queda de temperatura aparente* $(\Delta t)_a$. Os coeficientes de transmissão de calor, os quais são relacionados de acordo com a equação 2.1

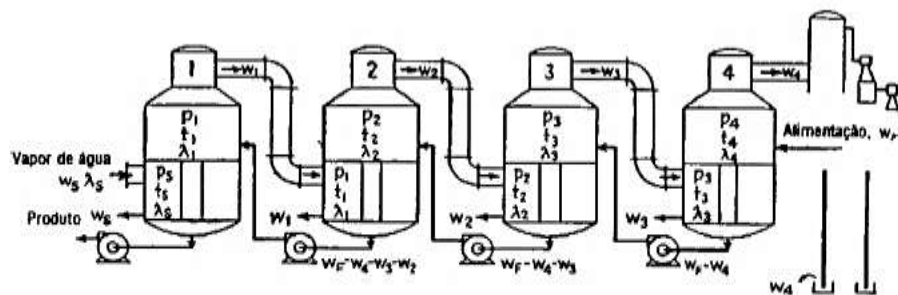
$$U_D = \frac{Q}{A \times (\Delta t)_a}, \quad (2.1)$$

Na equação acima, U_D são os coeficientes térmicos globais aparentes. Se os coeficientes se baseiam sobre a diferença de temperatura através da superfície entre o vapor usado no aquecimento e o líquido que evapora, como em muitos casos, $U_D = \frac{Q}{(Ax\Delta t)}$.

Na Figura 2.21 temos dois tipos de alimentação de evaporadores, sendo uma alimentação frontal e outra uma realimentação, cuja principal diferença entre os dois tipos de alimentação é que na realimentação a solução, retorna pela parte inferior dos evaporadores, de maneira parcial ao estágio anterior.



(a) ALIMENTAÇÃO FRONTAL.



(B) REALIMENTAÇÃO

Figura 2.21 Evaporador químico com quatro estágios de operação dispostos para alimentação frontal e realimentação. (KERN, 1980).

O calor latente de vaporização para o vapor de água de uma solução pode ser calculado seja pela relação de Duhring seja pela equação de Othmer. De acordo com a regra de Duhring, chega a equação 2.2:

$$\frac{\lambda_w}{\lambda_s} = \frac{\Delta t_{rw}}{\Delta t_{rs}} \left(\frac{t_{rw}}{t_{rs}} \right)_{abs}^2 \quad (2.2)$$

Onde,

λ_s = calor latente de água pura da solução à temperatura t e à pressão p_s ;

λ_w = calor latente de água pura à temperatura t'_w , porém à pressão p_s , que é a mesma pressão que a existente para t ;

t'_s, t'_w = pontos de ebulição da solução e da água para a mesma pressão p_s ;

$\Delta t'_s / \Delta t'_w$ = razão entre as variações das duas curvas de ebulição sobre o mesmo intervalo de pressão.

De acordo com o método de Othmer e com base na equação de Clausius-Clapeyron, obtém-se a equação 2.3:

$$\frac{\lambda_s}{\lambda_w} = \frac{d \log p_s}{d \log p_w} \quad (2.3)$$

Onde p_s e p_w são as respectivas pressões de vapor absolutas da solução, e da água pura sobre um idêntico intervalo de temperatura.

A BPR pode ser calculada, porém somente para soluções diluídas que são quase ideais. Para soluções reais, os dados sobre elevação do ponto de ebulição devem ser obtidos experimentalmente medindo-se a curva de pressão de vapor para uma dada concentração em duas temperaturas diferentes.

Propriedades do fluido. No evaporador químico, o resíduo, que é uma solução concentrada, é o produto desejado, e normalmente nenhum ajuste pode ser feito com a solução a fim de impedir a formação de espuma ou eliminar a deposição da incrustação. Isto deve ser levado em consideração quando se projeta um equipamento. Além disso, as soluções concentradas produzem soluções com viscosidades elevadas. Particularmente, uma vez que a ebulição é uma combinação da vaporização e da

convecção livre, o coeficiente global de transmissão de calor é uma função tanto da concentração quanto da temperatura para a qual ocorre a evaporação. A influência da viscosidade pode ser tão elevada que o grupo de Grashof, $D^3\rho^2g\beta\Delta t/\mu^2$, torna-se desprezível para evaporadores que operam com circulação natural. Nessas circunstâncias, a solução não pode circular espontaneamente de modo muito rápido em torno de um elemento aquecedor, e é necessário usar uma circulação forçada em vez de uma circulação natural.

2.2.2.3. Evaporadores Químicos

Os evaporadores químicos pertencem a duas classes: os de circulação natural e os de circulação forçada. Os evaporadores com circulação natural são usados individualmente ou em operações múltiplas para as necessidades mais simples da evaporação. Os evaporadores com circulação forçada são usados para soluções viscosas, salinas e soluções com formação de incrustação. Os evaporadores com circulação natural se dividem em quatro tipos principais:

- ✓ Tubo horizontal
- ✓ Tubo vertical fechado (*calandra*)
- ✓ Tubo vertical com cesta
- ✓ Tubo vertical longo

2.2.2.3.1. Evaporadores com tubo horizontal

Este tipo de evaporador, conforme indicado na Figura 2.22, é o tipo mais antigo de evaporador químico. Embora eles já tenham sido usados mais intensamente, eles foram substituídos por outros tipos. Consistem de uma carcaça redonda ou quadrada e de um feixe de tubos horizontais que normalmente é quadrado. O evaporador horizontal é o único tipo distinto de evaporador químico que usa vapor nos tubos. A principal vantagem desse tipo de evaporador reside no fato dele ocupar um espaço relativamente pequeno e na habilidade de dispor o feixe de modo que o ar que entra com o vapor não se agrupe para recobrir uma área útil. O evaporador horizontal é menos satisfatório para fluidos que formam incrustação ou depósito de sal, sendo o depósito formado na parte

externa do tubo, e é usado somente para problemas relativamente simples de concentração em vez de na preparação de um líquido para cristalização.

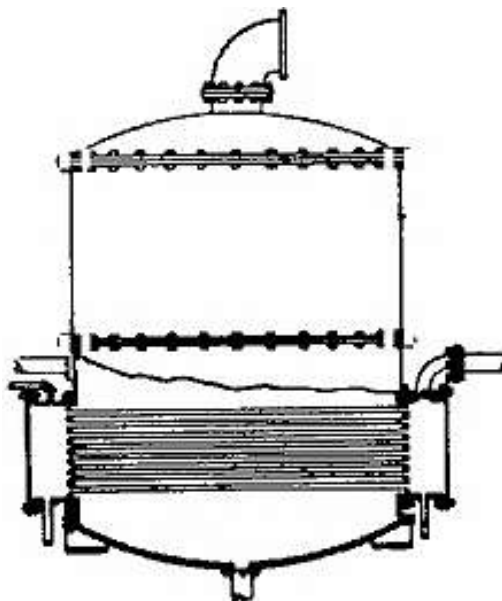


Figura 2.22 Evaporador com tubo horizontal. (Adaptado de KERN, 1980).

2.2.2.3.2. Evaporador com tubos vertical fechado (*Calandra*)

Este tipo de evaporador é indicado na Figura 2.23. Ele consiste de um feixe de tubos verticais curtos, colocados entre dois espelhos fixos que são parafusados com os flanges da carcaça. O vapor flui pelo exterior dos tubos na caldeira de vapor, e existe um grande espaço circular para a retirada pela parte de baixo no centro do feixe onde o líquido resfriador circula de volta para o fundo dos tubos. A disposição de um evaporador com recipiente fechado *calandra* é indicada na Figura 22. Um dos problemas consiste em colocar chicanas para o vapor da parte central da carcaça de modo que exista uma cobertura de tubos relativamente uniforme. Outro problema é fazer pontos de sangria convenientes de modo que não se formem bolsões de gás não condensável. O condensado pode ser removido em qualquer ponto conveniente. O espaço acima do nível do líquido no espelho serve principalmente para liberar o líquido, o qual é arrastado pelo vapor.

Os evaporadores tipo *calandra* são tão comuns que eles são frequentemente chamados de evaporadores *padronizados*. Como ocorre incrustação no interior dos tubos é possível usar o evaporador padrão para serviços mais rigorosos do que os desempenhados para um evaporador com tubo horizontal, e, além disso, podemos

instalar uma hélice no prato grande ou na parte cônica inferior a fim de aumentar a velocidade de circulação.

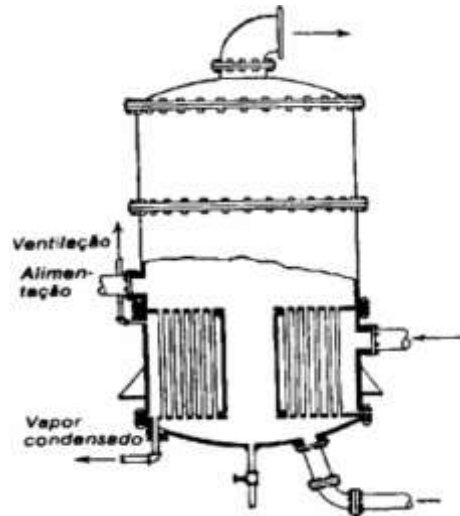


Figura 2.23 Evaporador com recipiente fechado tipo calandra. (*adaptado de KERN, 1980*).

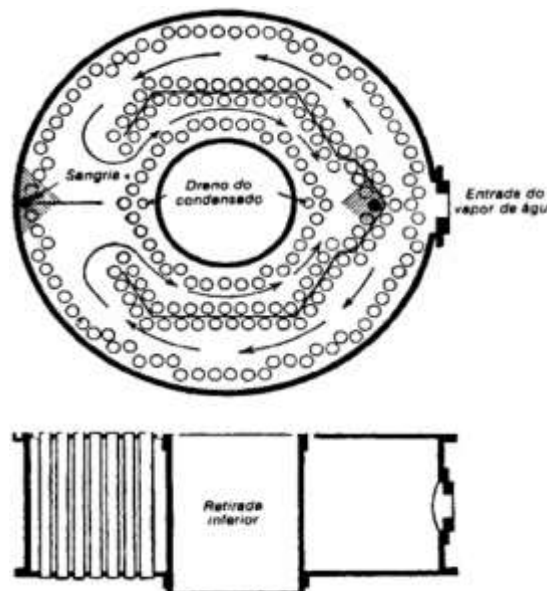


Figura 2.24 Disposição das chicanas num evaporador tipo calandra, com as direções de escoamento. (*adaptado de KERN, 1980*).

2.2.2.3.3. Evaporador vertical tipo cesta

Um evaporador de tipo cesta é indicado na Figura 2.25. Ele é semelhante ao tipo *calandra*, exceto que ele possui um feixe removível que pode ser limpo muito facilmente. O feixe é suportado em apoios internos, e a retirada inferior ocorre entre o feixe e a carcaça em vez de uma retirada central. Como os espelhos oscilam livremente, o problema da expansão diferencial entre os tubos e o vapor da arca da carcaça não é

importante. Este tipo é frequentemente projetado com um fundo cônico e pode também possuir uma hélice instalada para aumentar a circulação. Em virtude destas vantagens mecânicas, o evaporador com cesta pode ser usado para líquidos que possuem tendência a criar incrustação, embora eles não sejam recomendados para líquidos com altas viscosidades ou elevadas taxas de incrustação.

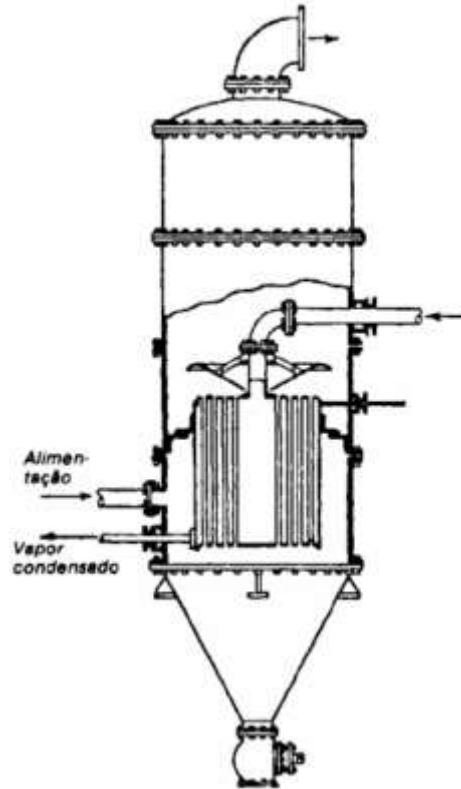


Figura 2.25: Evaporador tipo cesta. (*adaptado de KERN, 1980*).

2.2.2.3.4. Evaporadores verticais com tubos longos

Evaporador vertical com tubo longo é indicado na Figura 2.26. Ele consiste de um elemento aquecedor tubular projetado para passagem da solução através dos tubos, mas somente uma vez por circulação natural. O vapor entra através do cinturão de vapor, e o feixe possui chicanas de modo a que exista um movimento livre do vapor, do condensado e do não condensado para baixo. O espelho superior está livre, e logo acima dele existe um defletor de vapor para reduzir o arraste. Este tipo não é especialmente adaptado para líquidos salinos nem para a vedação, mas ele é excelente para soluções com sabão, soluções espumosas. Quando eles são dispostos para recirculação, o aparelho é como indicado na Figura 2.27.

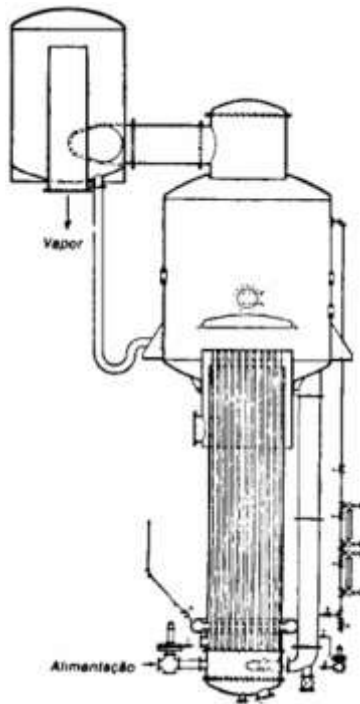


Figura 2.26: Evaporador vertical com tubo longo. (adaptado de KERN, 1980).

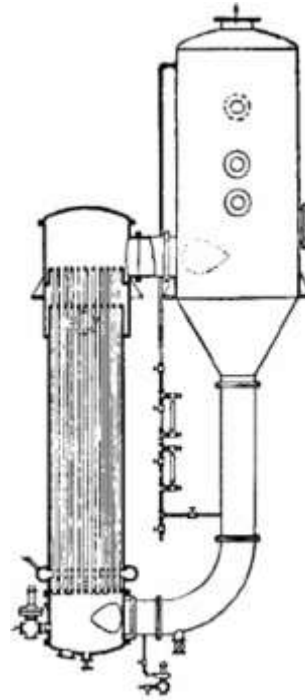


Figura 2.27: Evaporador Vertical com tubo longo com reciclagem. (adaptado de KERN, 1980).

2.2.2.4. Evaporadores com circulação forçada

Existem diversos modelos para os evaporadores com circulação forçada, conforme indicado desde a Figura 2.28 até a Figura 2.30. Um evaporador com circulação forçada pode não ser tão econômico como um evaporador com circulação natural, porém eles são necessários quando o problema envolve uma solução com escoamento pobre, incrustação e características térmicas. Como o grupo de *Grashof* varia inversamente com o quadrado da viscosidade, existe um limite para as viscosidades das soluções que circulam naturalmente.

Com materiais muito viscosos não existe alternativa, a não ser o uso deste tipo de evaporador. Além disso, quando existe uma tendência para a formação de incrustação ou de depósitos salinos, as elevadas velocidades obtidas através do uso de bombas de circulação constituem o único método para impedir a formação de depósitos excessivos. O evaporador com circulação forçada é bem adaptável para um controle íntimo do escoamento, particularmente quando um longo tempo de contato pode

perturbar os produtos químicos da solução. Os tubos de um evaporador com circulação forçada são menores do que os tubos num evaporador com circulação natural.

Na Figura 2.28, o vapor de água penetra através do feixe externo do corpo do evaporador e entra em contato com os tubos no topo do feixe por meio de um espaço anular existente. Instala-se uma placa defletora acima do espelho superior e coloca-se a bomba de circulação no nível do chão. Na Figura 2.29, nota-se que o mesmo efeito é produzido através de um feixe vertical, o qual simplifica em um grau a construção, mas não é tão compacto. A Figura 2.29 representa uma variação com um feixe horizontal que é particularmente adaptável quando o espaço disponível é pequeno.

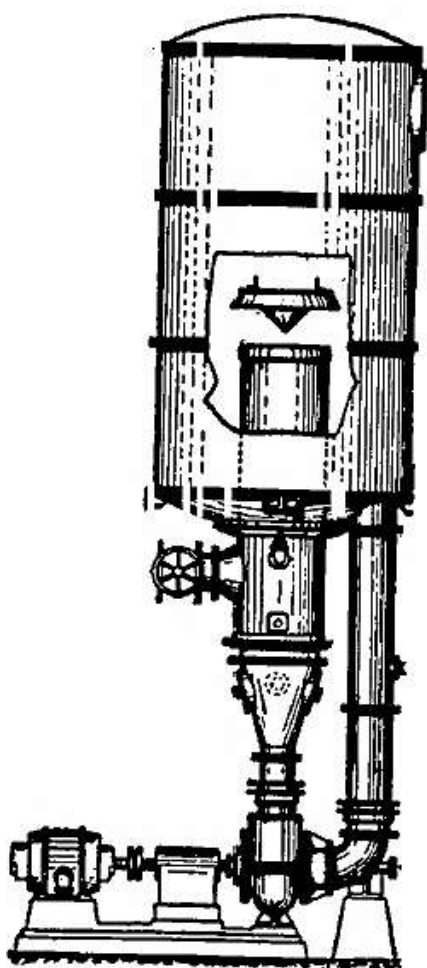


Figura 2.28: Evaporador com circulação forçada com elemento aquecedor interno vertical. (adaptado de KERN, 1980).

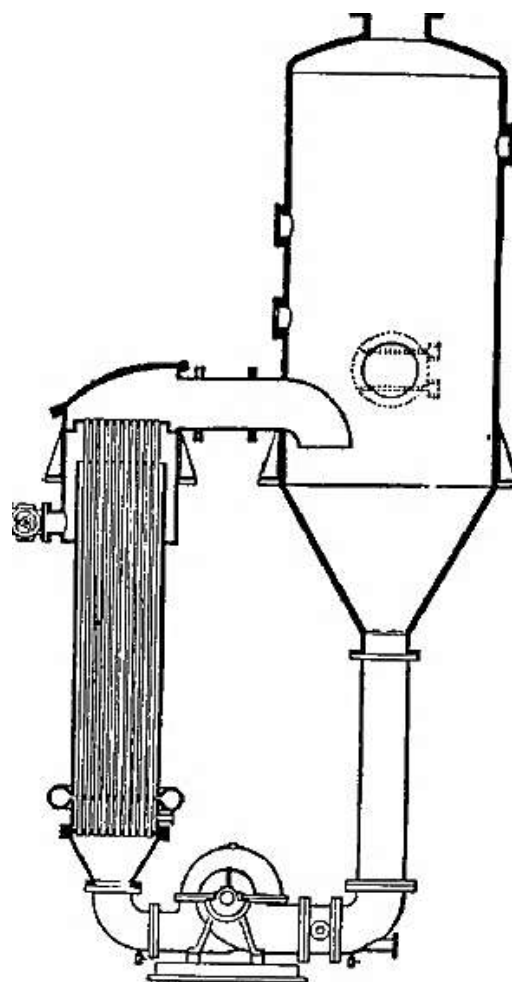


Figura 2.29: Evaporador com circulação forçada com elemento externo vertical. (adaptado de KERN, 1980).

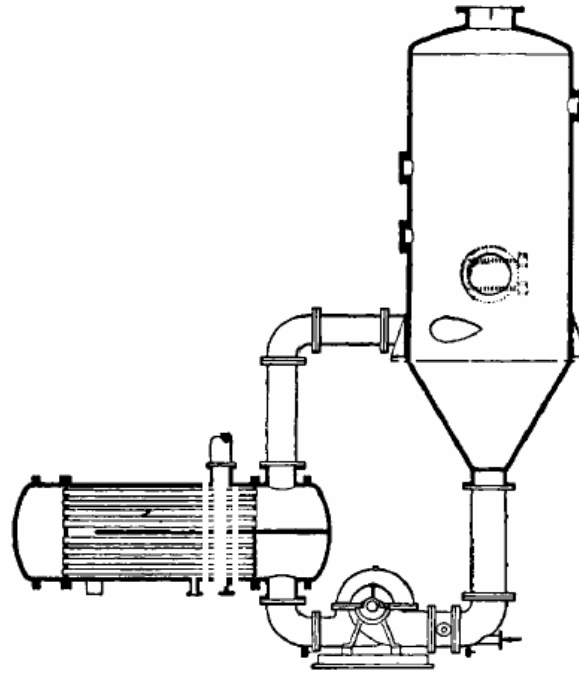


Figura 21.30: Evaporador com circulação forçada com elemento externo horizontal. (adaptado de KERN, 1980).

2.2.2.5. Evaporadores do tipo casco-tubo na obtenção de óleo de soja

A evaporação na indústria de obtenção de óleo de soja é normalmente utilizada na evaporação do hexano puro, com isso ocorre à concentração da miscela. Os equipamentos normalmente utilizados são evaporadores verticais, com tubos longos no sentido ascendente, instalados em series, que utilizam vapores saturados como fontes de calor para o aquecimento da miscela até seu ponto de ebulição. Frequentemente, na indústria de fabricação de óleo de soja, parte do aquecimento é feita pelo aproveitamento dos vapores saturados que saem da operação de dessolventização e tostagem e a outra parte é feita utilizando-se o vapor d'água saturado proveniente do sistema de utilidades. Atualmente um dos processos mais comuns utilizado na destilação da miscela é o demonstrado pelo fluxograma demonstrado na figura 2.18, observamos que o processo de destilação é constituído por dois evaporadores que aproveitam os vapores saturados, oriundos da etapa de dessolventização e tostagem e um evaporador que recebe o vapor saturado oriundo do sistema de utilidades.

Os evaporadores utilizados na indústria para a evaporação da miscela é demonstrado na Figura 2.31, cuja parte inferior é formada por tubos longos, na qual ocorre o aquecimento da miscela que entra por baixo, sobe através dos tubos de tal

forma que grande parte do hexano é evaporada; a parte superior, mais larga, possui dispositivos para impedir o arraste do óleo junto com o hexano e para permitir a saída da miscela para a etapa seguinte do processo. O vapor de aquecimento ao entrar no evaporador depara-se com chicanas instaladas no feixe de tubos cuja função é provocar um movimento livre do vapor, do condensado e do não condensado para baixo.

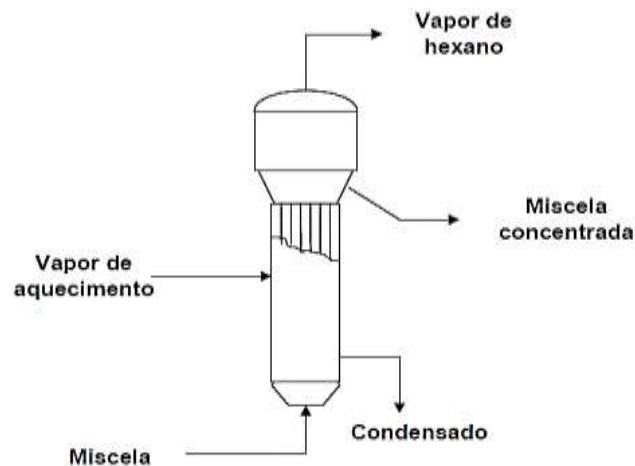


Figura 2.31 Esquema do evaporador vertical de tubos verticais longos.

Os evaporadores exercem a função de um trocador de calor, no qual o vapor de aquecimento flui na parte externa dos tubos, no sentido de cima para baixo, e a miscela escoia na parte interna dos tubos, no sentido de baixo para cima. Alguns aspectos operacionais inerentes ao processo podem influenciar no rendimento do processo de evaporação, sendo que alguns destes aspectos são descritos abaixo:

- A Concentração da miscela: a miscela na entrada do evaporador é diluída, tendo uma baixa viscosidade, com isso o coeficiente de transferência de calor é elevado. No momento que a miscela vai percorrendo os tubos do evaporador, o solvente evapora e a concentração aumenta, originando um aumento na viscosidade, com esse aumento poderá ocorrer uma redução no coeficiente de transferência de calor. Para não diminuir o coeficiente de transferência de calor, pode aumentar a turbulência da miscela.
- Sensibilidade do óleo a altas temperaturas: óleo de soja degrada a alta temperatura ou um longo período com temperatura alta, diminuindo a

qualidade do óleo para consumo humano. Uma maneira utilizada no processo, para diminuir este efeito da temperatura é trabalhando com uma pressão abaixo da pressão atmosférica. Uma temperatura de operação muito elevada pode alterar as características físicas do óleo de soja, tornando-o impróprio para o consumo (ZANETTI, 1981).

- A formação de Espumas: como temos a presença de ácidos graxos no óleo de soja, podem-se formar espumas durante o processo de evaporação, sendo que esta espuma pode ser transportada com o vapor e direcionada aos condensadores e decantadores, gerando uma perda de óleo nesta etapa do processo.
- Pressão e temperatura de operação: para pressão muito elevada, maior será a temperatura de ebulição. Quando a concentração da solução da mistura aumenta pela evaporação, a temperatura de ebulição também aumenta.
- Incrustações: quando ocorre o depósito de materiais sobre a superfície de troca térmica, o coeficiente global de transferência de calor diminui e o evaporador deverá ser limpo eventualmente.
- Pressão Hidrostática: com a carga hidrostática, ocorrida na coluna de mistura líquida, é o efeito que pode gerar uma elevação da pressão na interface líquido-vapor. Com o aumento de pressão no líquido, gera um aumento da temperatura de ebulição, com isso pode gerar uma redução no gradiente de temperatura e, conseqüentemente, causando uma ineficiência no processo de troca de calor.

A quantidade de calor transferida para evaporar uma determinada quantidade de solvente da solução depende da diferença de temperatura entre o meio aquecedor e a temperatura de ebulição da solução. Esta temperatura, por sua vez, depende da quantidade de moléculas do soluto na solução, a qual tem sua pressão de vapor alterada afetando, assim, o seu ponto de ebulição no equilíbrio. O efeito dessa alteração é a elevação do ponto de ebulição da solução que pode afetar significativamente a operação do evaporador. Assim, é pertinente na análise de um processo de evaporação correlacionar a temperatura de ebulição e a concentração do soluto na solução.

De acordo com PARAÍSO (2001), convém destacar que estes evaporadores típicos permitem operar com vazões em torno de 40 m³/h de solução, graças ao fenômeno da convecção natural gerado no interior dos tubos. Com isso, esses evaporadores são aptos a operar em instalações de grande capacidade. Os tubos que conduzem a solução medem, em geral, de 4,0 a 6,0 metros de comprimento e as velocidades em torno de 0,20 m/s, são suficientes para que a chicana atue como um eficiente eliminador de espuma, para que o processo de transferência de calor seja eficiente, bem como gerar o óleo com a qualidade adequada para o consumo.

A partir de balanços de massa e energia, este mesmo autor, modelou e simulou a transferência de calor em um evaporador vertical de tubos longos no processo de concentração de miscela. Os valores utilizados pelo autor do coeficiente global de troca térmica foram obtidos em literatura, a partir de um evaporador com características similares. As simulações representaram adequadamente os valores reais medidos no processo industrial, sugerindo que os utilizados foram adequados.

Um dos parâmetros de grande importância na análise dos evaporadores é o coeficiente global de transferência de calor, U. De acordo com PERRY e CHILTON (1980), o coeficiente global de transferência de calor, para evaporadores verticais de tubos longos, aumenta com o aumento da temperatura para fluidos considerados viscosos, além disso, a viscosidade da miscela diminui com o aumento da temperatura e esta tendência de queda da viscosidade é mais acentuada nas concentrações mais elevadas em termos de óleo.

Estes mesmos autores, mostram valores de U em gráficos e tabelas considerando o tipo de evaporador, as faixas de temperatura de operação e, em alguns casos, os tipos de materiais que atuam no processo, como fluido quente e frio.

2.2.2.6. Evaporadores do tipo “Stripper”

No processo de destilação a última operação unitária é a operação de *stripping*, onde esta operação é utilizada para remover gases relativamente leves da corrente de óleos pesados pelo contato dela com uma corrente de gás relativamente leve como o vapor d'água. Com a corrente de óleo e a corrente gasosa são realizados contato em estágios de forma de contracorrentes, onde a miscela com alta concentração de óleo de

soja, entra na parte superior da coluna, tendo dois bicos para aspergir a miscela para dentro da coluna, sendo que o vapor direto entra na parte inferior da coluna stripper, ocorrendo de forma direta o contato do vapor d'água com a miscela, resultando na remoção da pequena quantidade de hexano que estava contido na miscela, na entrada do equipamento, sendo que o equipamento usado para realizar esta operação no processo de destilação da miscela é chamado de stripper ou de coluna terminadora.

O *stripper* típico utilizado na indústria de obtenção de óleo bruto de soja é uma coluna dividida em compartimentos denominados de estágios e com estruturas específicas para projetar o fluxo e o contato de materiais no seu interior, com esta estrutura, propicia o fluxo e contato dos materiais, este tipo de coluna é demonstrado através da Figura 2.32.

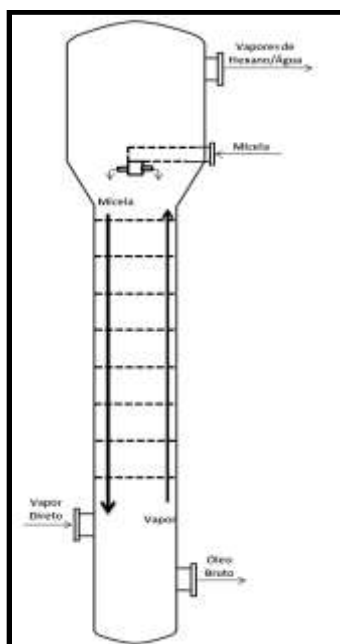


Figura 2.32 Esquema do evaporador do tipo "*stripper*".

Na indústria de obtenção de óleo de soja, o *stripper* é uma coluna alta, que tem como principal objetivo separar o óleo de soja do hexano. Para tanto, miscela concentrada em óleo vinda do terceiro evaporador, entra no topo da coluna, numa temperatura de 100 °C, ao atingir o estágio, forma um pequeno reservatório de líquido, o qual possibilita um contato eficiente entre o vapor direto e a miscela, ocorrendo o contato em contra corrente com o vapor d'água que entra saturado na parte inferior da coluna.

O contato da miscela com o vapor no estagio provoca a transferência do hexano da corrente líquida para a corrente de vapor. Essa transferência depende das condições de operação da coluna em termos de temperatura e pressão e das condições de equilíbrio líquido-vapor entre os componentes dentro equipamento.

O *stripper* é um equipamento bem específico e para maximizar a recuperação do hexano é recomendado que a miscela na entrada tivesse uma concentração em massa de óleo de 97% ou mais e uma temperatura superior a 107°C. O vapor deve ser saturado com temperatura de 190°C e uma pressão em torno de 4,0 Kgf/cm² (KEMPER, 1998).

O óleo destilado no *stripper* deve ser testado a fim de verificar se ainda contém traços de hexano. O teste é feito pelo ponto de fulgor, sendo que este ponto se refere ao ponto mais baixo de temperatura com o ar, e em contato com uma chama, queimam na superfície desses líquido. A Tabela 2.5 nos mostra o ponto de fulgor (°C) do hexano no óleo de soja e a sua concentração (PPM).

Tabela 2.5: Relação do ponto de fulgor com o hexano residual.

PONTO DE FULGOR (°c)	HEXANO RESIDUAL (PPM)
82	3500
99	1600
121	1000
160	550

A operação de destilação da miscela se encerra com a recuperação de parte do hexano usado na operação de extração e na produção do óleo bruto. Em todas estas etapas de sua realização quantidades expressivas de energia são utilizadas. Assim, a análise destas operações no sentido de recuperar hexano com o consumo mínimo de energia e óleo de boa qualidade é um aspecto fundamental na estratégia competitiva deste ramo industrial.

2.3. Equilíbrio Líquido-Vapor do sistema óleo de soja/hexano

2.3.1. Introdução

Diversos processos que têm importância industrial, como a destilação, a absorção e extração, colocam em contato duas fases que não estão em equilíbrio. A velocidade com que uma espécie química é transferida de uma para outra fase depende

do grau de afastamento do sistema em relação ao equilíbrio e, por isso, o tratamento quantitativo destes processos de transferência exige o conhecimento dos estados de equilíbrio do sistema.

Os critérios termodinâmicos do equilíbrio entre as fases exprimem-se em termos de propriedades especiais; a termodinâmica também fornece equações que relacionam estas propriedades às composições das fases, à temperatura e à pressão. Por este motivo, a relação entre os critérios de equilíbrio e a realidade física é feita principalmente mediante o coeficiente de fugacidade $\widehat{\phi}_i$, o caso de fases vapor e o coeficiente de atividade γ_i no caso das fases líquidas.

Os problemas industriais envolvem, em grande maioria, apenas as fases líquidas e vapor, embora se encontrem, às vezes, sistemas vapor-sólido. Na resolução de muitos problemas em engenharia são necessárias relações do equilíbrio líquido-vapor (ELV).

Muitas vezes, os dados precisos podem ser diretamente medidos, e frequentemente o são, mediante experiências programadas. Estas medidas, porém, mesmo com sistemas binários, são difíceis e se tornam crescentemente tediosas à medida que o número de componentes aumenta. É esse um estímulo à aplicação da termodinâmica ao cálculo das relações de equilíbrio de fases. A termodinâmica, no entanto, não gera dados e sim, fornece somente a estrutura matemática que possibilita a otimização de quaisquer dados que sejam conhecidos. Ela constitui a base da correlação sistemática, da extensão, da generalização, da estimativa e da interpretação de dados. Além disto, ela fornece os meios mediante os quais as previsões das diversas teorias da física molecular e da mecânica estatística podem ser aplicadas para fins práticos.

2.3.2. Equilíbrio Líquido-Vapor

A base termodinâmica para a solução do problema do equilíbrio líquido-vapor é dada por um critério de equilíbrio, baseado na igualdade dos potenciais químicos através das fases em equilíbrio, demonstrada na equação 2.4:

$$\mu_i^L = \mu_i^V \quad (i = 1, 2, \dots N) \quad (2.4)$$

O mesmo critério pode ser expresso em termos das fugacidades:

$$f_i^L = f_i^V \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (2.5)$$

A fugacidade da fase líquida é função da temperatura T, da pressão P e das N-1 frações molares independentes na fase líquida x_i ; da mesma maneira, a fugacidade da fase vapor é função da temperatura T, da pressão P, e das N-1 frações molares independentes na fase vapor y_i . Então, de acordo com a regra das fases, as 2N variáveis estão relacionadas pelas N equações representadas por (2.5). Portanto, N variáveis devem ser especificadas na formulação de um problema de equilíbrio líquido-vapor, para poder calcular as outras N variáveis usando as N relações disponíveis. Normalmente, as N variáveis são especificadas fixando T ou P e as composições da fase líquida ou vapor. Por isso, a maior parte dos cálculos de equilíbrio líquido-vapor cai em uma das seguintes categorias:

- ✓ Dados P e x_i , calcular T e y_i .
- ✓ Dados T e x_i , calcular P e y_i .
- ✓ Dados P e y_i , calcular T e x_i .
- ✓ Dados T e y_i , calcular P e x_i .

Os primeiros dois casos são chamados de cálculos de ponto de bolha, enquanto os dois últimos são chamados de cálculos de ponto de orvalho. Embora os detalhes dos procedimentos de cálculo sejam diferentes, todos eles partem da mesma formulação matemática.

2.3.3. A abordagem "gamma-phi"

O procedimento normal é representar as fugacidades da fase líquida usando o coeficiente de atividade e uma fugacidade de referência, como demonstrado nas equações 2.6 e 2.7:

$$f_i^L = \gamma_i X_i f_i^0 \quad (2.6)$$

e as fugacidades da fase vapor usando o coeficiente de fugacidade:

$$f_i^V = \phi_i^V Y_i P \quad (2.7)$$

Considerando a fase vapor ideal, onde só terá vapores de hexano, o critério de equilíbrio (5) pode ser novamente escrito como na equação 2.8:

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^{Sat} \quad (2.8)$$

Onde o γ_i pode ser calculado pelo método de contribuição de grupo – UNIFAC, utilizando o código Fortran TML-VLE STRAGEVITCH (1997). O P_i^{Sat} pela equação de Wagner.

Equação de pressão de vapor de Wagner, demonstrada na equação 2.9:

$$\ln \frac{P}{P_c} = \frac{1}{T_r} [A(1 - T_r) + B(1 - T_r)^{1,5} + C(1 - T_r)^3 + D(1 - T_r)^6] \quad (2.9)$$

Onde, $T_r = \frac{T}{T_c}$ e P usa-se nas unidades de Pc.

A velocidade com que uma espécie química é transferida de uma fase para outra depende do grau de afastamento do sistema em relação ao equilíbrio. Por isto, o tratamento quantitativo desses processos de transferência exige o conhecimento dos estados de equilíbrio do sistema. As condições termodinâmicas de equilíbrio líquido-vapor podem ser representadas por uma abordagem tipo γ - ϕ , empregando o coeficiente de fugacidade ϕ_i no caso da fase vapor e o coeficiente de atividade γ_i para a fase líquida, ou então com uma abordagem tipo ϕ - ϕ , na qual se emprega equações de estado para ambas as fases. A termodinâmica do equilíbrio de fases fornece equações que relacionam aquelas propriedades físico-química às composições das fases, à temperatura e à pressão, como os modelos NRTL, UNIQUAC e VAN LAAR para o cálculo de coeficientes de atividade, conforme REID *et al.* (1987).

2.3.4. Método UNIFAC

Nas últimas décadas, o grande objetivo dos estudiosos da teoria das soluções tem sido desenvolver métodos para prever numericamente valores do coeficiente de atividade em termos de propriedades que tenham significância molecular e que possam ser calculados a partir das propriedades dos componentes puros. A fim de cumprir esse objetivo, vários modelos foram desenvolvidos. Conforme consta no trabalho de

GMEHLING (1993), para a descrição de sistemas não eletrolíticos, modelos de equações de estado podem ser aplicados usando somente dados binários. Dados experimentais são normalmente escassos.

Neste sentido, o método de contribuição de grupos como o UNIFAC pode ser aplicado com muito sucesso. Estes métodos foram desenvolvidos para prever o equilíbrio líquido-vapor de maneira que os parâmetros de interação de grupos foram ajustados, principalmente, a partir de dados experimentais do equilíbrio líquido-vapor armazenados no Dortmund Data Bank. Com ajuda destes métodos é possível obter resultados confiáveis para o equilíbrio líquido-vapor, inclusive para os pontos azeotrópicos. Entretanto, resultados ruins são geralmente obtidos quando estes métodos são usados na predição do coeficiente de atividade em diluição infinita, γ^∞ , calores de mistura, ou sistemas com componentes muito diferentes em tamanho. Isto não é surpresa uma vez que os dados de equilíbrio líquido-vapor normalmente cobrem somente a faixa de concentração de 5 – 95% em moles, conforme PARAÍSO (2001).

A modelagem matemática usada na estimativa do coeficiente γ é apresentada a seguir.

O método UNIFAC admite que o logaritmo do coeficiente de atividade do componente da solução é igual à soma dos logaritmos de duas contribuições. A primeira, denominada de combinatorial (C), é devido às diferenças no tamanho e forma das moléculas na mistura, e também é conhecida como entrópico. E a segunda, denominada residual (R), é devido às energias de interação entre as moléculas, sendo que é acompanhada por liberação ou absorção de calor, também é conhecida como parte entálpica. Neste sentido, a relação matemática entre o coeficiente de atividade e as contribuições são demonstrada nas equações abaixo:

$$\ln\gamma_i = \ln\gamma_i^C + \ln\gamma_i^R \quad (2.10)$$

Parte combinatorial:

$$\ln\gamma_i^C = \ln\frac{\phi_i}{x_i} + \frac{Z}{2}q_i \ln\frac{\theta_i}{\phi_i} + l_i - \frac{\phi_i}{x_i} \sum_j x_j l_j \quad (2.11)$$

fração de volume,

$$\phi_i = \frac{v_i x_i}{\sum_j x_j y_j} \quad (2.12)$$

fração de massa,

$$\theta_i = \frac{q_i x_i}{\sum_j q_j y_j} \quad (2.13)$$

$$l_i = \frac{Z}{2} (r_i - q_i) - r_i + 1 \quad (2.14)$$

volume do mol i, v

$$v_i = \sum_k v_k^i R_k \quad (2.15)$$

Onde:

v_k^i - número de átomos (exceto H) presentes no grupo k na molécula i área do mol i,

$$q_i = \sum_k v_k^i Q_k \quad (2.16)$$

Volume e área do grupo K,

$$R_k = \frac{V_w k}{15,17} \quad (2.17)$$

$$Q_k = \frac{A_w k}{2,5 * 10^9} \quad (2.18)$$

A parte residual pode ser obtida usando-se as seguintes equações abaixo:

$$\ln \gamma_i^R = \sum_k v_k^i [\ln \Gamma_k - \ln \Gamma_k^r] \quad (2.19)$$

Onde:

Γ_k - coeficiente de atividade residual do grupo K na solução.

Γ_k^i – coeficiente de atividade do grupo k na substância pura. São determinados pela seguinte expressão, demonstrado na equação 2.20:

$$\ln \Gamma_k = Q_k \left[1 - \ln \left(\sum_m \theta_m \psi_{mk} \right) - \sum_m \frac{\theta_m \psi_{km}}{\sum_n \theta_n \psi_{nm}} \right] \quad (2.20)$$

sendo a fração de área do grupo m na fase líquida, θ_m e a fração molar do grupo m na fase líquida, X_m são dados pelas seguintes equações 2.21 e 2.22:

$$\theta_m = \frac{Q_n X_m}{\sum_m \theta_n X_n} \quad (2.21)$$

$$X_m = \frac{\sum_i^{comp.} v_n^i X_i}{\sum_i^{comp.} \sum_j v_j^i X_i} \quad (2.22)$$

A fim de permitir uma melhor descrição do comportamento real do coeficiente de atividade o parâmetro ψ_{mn} é colocado como função da temperatura através da seguinte equação 2.23:

$$\psi_{mn} = \exp\left(\frac{-a_{mn}}{T}\right) \quad (2.23)$$

Sendo:

- ✓ a_{mn} o parâmetro de interação UNIFAC entre os grupos n e m, em K;
- ✓ T a temperatura do sistema em K.

A introdução do método UNIFAC no modelo requer que se leve em consideração os compostos que compõem o óleo de soja bruto. O óleo de soja é composto por diversos componentes, sendo que em torno de 96% do total é formado de ácidos orgânicos saturados e insaturados, denominados de ácidos graxos. A parte restante é formada por traços de metais e componentes de estrutura complexa como os esteróis, tocoferóis, esqualenos e ácidos graxos livres. Todas estas estruturas obviamente interferem, individualmente, nas propriedades físico-químicas da solução (miscela).

Mas, devido à quantidade relativamente pequena e também às estruturas complexas dos outros componentes presentes no óleo, neste trabalho considerar-se-á, para efeito de cálculo dos coeficientes de atividade, apenas um triglicerídeo formado pelos radicais (ácidos graxos) oleico e linoleico.

2.3.5. Caracterização dos componentes

2.3.5.1. Óleo de Soja

Além de triacilgliceróis e ácidos graxos livres (AGL), presentes em maior quantidade, todos os óleos contêm uma pequena quantidade de mono e diacilgliceróis, pigmentos, esteróis, tocoferóis, fosfatídeos e proteínas. Nos óleos vegetais brutos, esses componentes representam menos que 5% da sua composição, e nos óleos vegetais refinados, menos que 2%.

Contudo, os triglicerídeos representam em média 96% da composição do óleo de soja. Cada triglicerídeo contém três radicais representados pelos ácidos graxos. No Apêndice A, será mais bem detalhados os ácidos graxos que fazem parte da estrutura dos triglicerídeos presentes no óleo de soja.

Para a representação do óleo de soja, no método de contribuição de grupos, optou-se por caracterizar apenas um triglicerídeo, tendo como radicais dois ácidos graxos Oleico e um Linoléico. A partir da composição em ácidos graxos, foi possível determinar a massa molecular média do triglicerídeo adotado. A estrutura do triglicerídeo que representa o óleo de soja aparece na Figura 2.33.

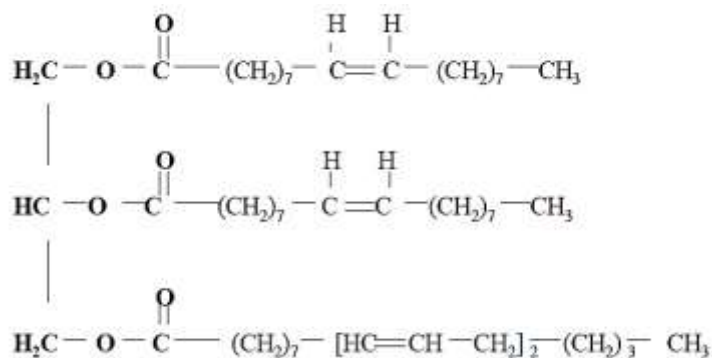


Figura 2.33 Triglicerídeo que representa o óleo de soja hexano.

Hexano é o nome do solvente usado comercialmente para extrair o óleo da soja floculada que entra no extrator.

Esse solvente não é composto pelo n-hexano puro, mas por uma fração de petróleo que consiste principalmente de uma mistura de hidrocarbonetos saturados de seis átomos de carbono. A estrutura que representa o hexano é mostrada na Figura 2.34.

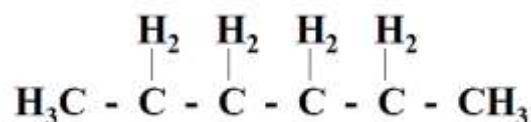


Figura 2.34 Molécula de hexano.

2.3.5.2. Mistura Binária

Tendo a mistura de óleo de soja e hexano, formam-se cinco grupos distintos: CH₃, CH₂, H₂CCOO, HCOO e HC=CH. A Tabela 06 mostra os parâmetros do método UNIFAC, com base em GMEHLING (1982).

Do triglicerídeo considerado, percebe-se pelas fórmulas moleculares apresentadas, que existem cinco grupos estruturais bem definidos em cada um deles.

Estes grupos são considerados a base para a utilização no método UNIFAC. A determinação dos coeficientes de atividade do hexano e dos ácidos graxos, envolvidos na mistura, requer um conjunto de parâmetros que serão usados pelo método UNIFAC conforme visto anteriormente. A seguir, esses parâmetros são apresentados, na Tabela 2.6.

Tabela 2.6: Parâmetros de método UNIFAC. (Adaptado de GMEHLING, 1982).

<i>Molécula</i>		<i>Grupo</i>	<i>Sub Grupo</i>	v_k^l	R_k	Q_k
Óleo de Soja	CH ₃	01	01	03	0,9011	0,848
	CH ₂	01	02	40	0,6744	0,54
	H ₂ CCOO	11	23	02	1,6764	1,42
	HCOO	12	24	01	1,242	1,188
	HC=CH	02	06	04	1,1167	0,867
Hexano	CH ₃	01	01	02	0,9011	0,848
	CH ₂	01	02	04	0,6744	0,54

As composições da soja, constituída por proteínas, carboidratos, ácidos graxos, fosfatídeos, esteróis, tocoferóis, hidrocarbonetos, metais e cinzas, são apresentadas no Apêndice A.

2.4. Modelo matemático para obter óleo bruto

2.4.1. Introdução

A evaporação na indústria de obtenção de óleo de soja é normalmente usada para evaporar o hexano puro e concentrar a miscela. Os equipamentos normalmente utilizados são evaporadores verticais, instalados em série, que utilizam vapores saturados como fontes de calor para o aquecimento da miscela até seu ponto de ebulição. Numa indústria típica, parte desse aquecimento é feita aproveitando os vapores saturados que saem da operação de dessolventização/tostagem e outra parte é utilizando-se o vapor de água saturado proveniente do sistema de utilidades. A Figura 2.35, demonstra um dos processos mais utilizados para a obtenção de óleo bruto, sendo constituído por duas colunas economizadoras, onde se utiliza o vapor quente oriundos do dessolventizador e tostador, e um evaporador e por ultimo uma coluna “stripper”.

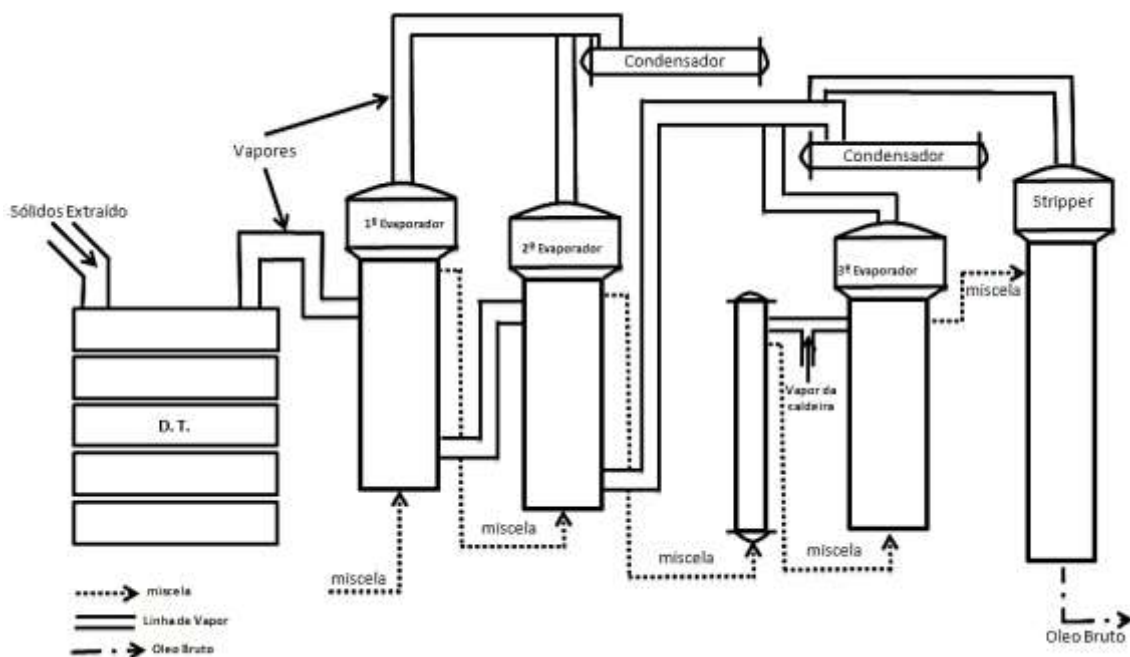


Figura 2.35 Sistema de remoção do solvente da miscela. DT: dessolventizador-tostador da torta e três estágios de evaporação.

2.5. Software para simulação: modelagem, simulação e análise do processo de destilação da miscela no *HYSYS*

A metodologia convencional de simulação do processo de concentração da miscela partindo do desenvolvimento dos balanços de massa e de energia nos equipamentos evaporadores e *stripping* foi descrita detalhadamente por PARAISO (2001) e tornou-se referência para o desenvolvimento de outros trabalhos tais como CUSTODIO (2003), LOPES (2008) e FERNANDES-JUNIOR (2009).

O objetivo de utilização do simulador *HYSYS* é servir como base para a integração de software de engenharia. As principais características técnicas do *HYSYS* são: interface Windows e utilização de estrutura de 32 Bits (sistema operacional)

Esse *software* pode ser aplicado para simulação e projeto em estado estacionário de vários equipamentos industriais como trocadores de calor, vasos separadores, compressores, colunas de destilação, fornos, etc.

O *HYSYS* oferece um alto grau de flexibilidade, porque há várias maneiras de realizar tarefas específicas, essa flexibilidade combinada com uma abordagem consistente e lógica de como estas capacidades é entregue ao *HYSYS*, fazendo uma ferramenta extremamente versátil de simulação de processos. A usabilidade do *HYSYS* é atribuída a quatro áreas-chave, sendo elas: operação dirigida, operações modular, arquitetura multi-fluxograma e design orientado a objetos.

Este conceito combina o poder de simulação interativa, com acesso instantâneo à informação. A simulação interativa significa que a informação é processada, uma vez que é fornecido e realizado cálculos automaticamente. Além disso, não está restrita ao local do programa onde a informação é fornecida.

Operações modulares são combinadas com o não-seqüencial algoritmo de solução. Não só a informação é processada como ela é fornecida, mas os resultados de qualquer cálculo são automaticamente produzidos em todo o fluxograma, tanto para frente e para trás.

As propriedades termodinâmicas das correntes de entrada e saída, bem como as condições de equilíbrio são calculadas através de equações de estado. O *HYSYS* possui diversas equações de estado, algumas delas para aplicações específicas. Utilizando

como exemplo a equação de estado Peng-Robinson, por ser a mais recomendada em aplicações de petróleo, gás e petroquímica, bem como no processo de desidratação do gás natural utilizando-se TEG como solvente (ASPENTECH, HYSYS, 2003).

Além disso, o *software* possui uma ferramenta de otimização “teoricamente” gerando um processo de custo mínimo ou de lucro máximo dependendo de algumas variáveis de processo e restrições.

O *software* permite o estudo dinâmico de variáveis de processo, fazendo o uso de controladores de pressão, temperatura e nível. Essa funcionalidade é muito útil para verificar a estabilidade dinâmica do sistema frente a perturbações nas correntes de entrada e para o treinamento de operadores.

É possível ainda integrar o *HYSYS* com outros *softwares* dedicados, ou seja, aplicados a funcionalidades específicas. É o caso do TASC, para trocadores de calor, o PIPESYS para simulações em dutos, dentre outros.

O *software HYSYS* tem a função de simular diversos processos químicos de acordo com a montagem do usuário. O programa permite montar e simular a planta nas condições desejadas, objetivando encontrar condições de operações com menor custo possível. O *software HYSYS* pode simular no estado estacionário ou dinâmico. Como no presente trabalho, estuda-se destilação do petróleo seria difícil inserir todas as substâncias presentes nesse.

Através da entrada de dados de volume de evaporado por temperatura, o *HYSYS* cria um conjunto de componentes hipotéticos e suas respectivas propriedades.

Para HAMID (2007), o *HYSYS* é uma poderosa ferramenta de simulação em engenharia, criada voltada a interface do projeto, capacidades da engenharia, operações com interatividade. A possibilidade de integração de estado estacionária e dinâmica em um mesmo modelo representa um avanço significativo em *softwares* industriais de engenharia. Talvez a mais importante função do *HYSYS* seja a maximização da velocidade de retorno das informações no modelo implementado, facilitando o entendimento do processo. E ainda, a vasta possibilidade e flexibilidade em pacotes termodinâmicos exigem do programador um grande conhecimento do tema abordado.

Além de simular o processo através da montagem da planta e especificação das propriedades das correntes e operações unitárias da mesma, o *HYSYS* contém ferramentas capazes de propiciarem o usuário uma análise mais aprofundada do processo e como ele reagiria a certas mudanças ou especificações.

A Análise de Sensibilidade é uma ferramenta usada para determinar como um processo reage mediante variações em suas condições de operação ou variáveis de projeto. Alterando-se uma ou mais variáveis do fluxograma, pode-se estudar os efeitos dessas variações em outras variáveis do mesmo fluxograma.

A Análise de Sensibilidade pode ser usada com os seguintes objetivos:

- ✓ Verificação da ocorrência ou não da solução de uma especificação dentro de uma faixa compatível da variável manipulada;
- ✓ Realização de uma otimização no processo;
- ✓ Geração de tabelas e/ou gráficos dos resultados da simulação como função da corrente de alimentação, blocos de entrada, ou qualquer outra variável de entrada;

É importante ressaltar que a Análise de Sensibilidade fornece informações adicionais aos resultados, mas não interfere em nenhum aspecto na simulação. A simulação é executada independentemente do estudo de sua sensibilidade.

Uma especificação de projeto fixa o valor de uma variável que o *HYSYS* deveria calcular. Por exemplo, pode-se querer especificar a pureza em uma corrente de produto ou a quantidade de impurezas permissíveis em uma corrente de reciclo. Para cada especificação de projeto, identifica-se uma variável de entrada de um bloco ou outra variável de entrada da simulação a ser manipulada (ajustada) para se atingir a especificação.

A especificação de projeto atinge seus objetivos manipulando uma variável de entrada especificada pelo usuário. Quantidades que são calculadas durante a simulação não devem ser variadas diretamente (manipuladas).

Outra ferramenta do software *HYSYS* é a otimização, que pode ser usada para maximizar ou minimizar uma função objetivo especificada pelo usuário, manipulando-

se variáveis de decisão (correntes de alimentação, variáveis de entrada de blocos ou outras variáveis de entrada).

A função objetivo pode ser qualquer expressão envolvendo uma ou mais quantidades do fluxograma, que se deseja maximizar ou minimizar. A tolerância da função objetivo é a tolerância do bloco de convergência que está associado ao problema de otimização. Existe ainda a possibilidade de se impor restrições (igualdades ou desigualdades) ao problema de otimização.

De acordo com JORGE, et. al. (2010), seguindo a mesma tendência de outros principais simuladores comerciais, o *HYSYS* também possui os seus blocos de simulação e banco de dados voltados a indústria petroquímica e de produção de gás, sendo um dos simuladores industriais com maior aceitação neste setor com algumas adaptações é possível expandir sua utilização para demais áreas da engenharia química, evidenciando que para a utilização deste software há a necessidade de comprovar e adequar a aplicabilidade destes simuladores a outros seguimentos industriais, como o setor de óleos vegetais.

O reflexo dessas adaptações são os inúmeros trabalhos científicos que fizeram uso destes simuladores. Entre eles pode-se citar a grande vertente de trabalhos na área de biodiesel, produção de etanol e óleo vegetais.

Neste contexto, a modelagem e simulação de processos utilizando simuladores como o *HYSYS*, que se destaca pela qualidade do seu banco de dados e relativa facilidade na sua utilização e adaptação de acordo com o processo, pode contribuir como uma ferramenta de gestão de processos de forma decisiva, auxiliando por meio de simulações, na determinação das melhores condições de processamento de projetos, visando à redução dos custos industriais. Tais condições podem propiciar em um processo de obtenção de óleo de soja a viabilidade de um estudo rápido e seguro de redução de consumo de energia, em um nível mais elevado de recuperação do solvente utilizado, o hexano.

Nos processos de destilação, absorção e extração ocorrem o contato de duas fases que não estão em equilíbrio, onde a velocidade com que uma espécie química é transferida de uma para a outra fase, depende do grau de afastamento do sistema em

relação ao equilíbrio, por tanto, exige o conhecimento dos estados de equilíbrio do sistema (CUSTÓDIO, 2003).

Na definição do modelo de propriedades das substâncias envolvidas em um sistema a ser estudado, deve ser especificado a natureza química dos componentes químicos da simulação. Para o caso de análise da miscela, os hidrocarbonetos são apolares e o modelo termodinâmico pode ser representado por equações de estado. O modelo desenvolvido por Peng e Robinson, em 1976, baseado na equação de van der Waals, prevê com boa precisão as propriedades para estes hidrocarbonetos, em particular para o equilíbrio líquido-vapor entre a miscela e hexano.

SANTANDER, *et. al.* (2010), em seu estudo emulou o comportamento dos óleos vegetais em um simulador, por meio de compostos representativos das misturas que o compõem. Para isto, foram realizadas medições experimentais de algumas das propriedades dos compostos em estudos. As simulações foram efetuadas utilizando o modelo termodinâmico NRTL com os parâmetros de interação ausentes na base de dados do simulador estimados pelos métodos UNIFAC.

O modelo termodinâmico molecular NRTL (nonrandom twoliquids), proposto por RENON e PRAUSNITZ (1968) e SANDLER (2003), é uma extensão da equação de Wilson e utiliza a mecânica estatística e o conceito de composição local para representar a estrutura líquida, mas a diferença com o modelo de Wilson é que o modelo NRTL é aplicável com miscibilidade parcial, o que permite representar os equilíbrios líquido-vapor, líquido-líquido e líquido-líquido-vapor. De acordo com SANDLER (2003), este modelo é empiricamente usado em misturas líquidas não eletrolíticas, representando as propriedades de misturas não ideais melhores que outras equações, como por exemplo, Margules e Van Lar.

No desenvolvimento do modelo, foram utilizados módulos disponíveis no HYSYS, realizando a emulação de um evaporador, uma vez que este tipo de separador não está disponível no *software*. O evaporador foi a partir da associação de um trocador de calor tipo multi tubular e um vaso separador *flash*. Esta ideia, foi descrita, inicialmente, por FOUST, *et. al.* (1982) e refere-se a um evaporador, como sendo constituído por um trocador de calor, sendo capaz de elevar a temperatura da solução até o seu ponto de ebulição, e um dispositivo para separar a fase vapor do líquido em

ebulição. Este mesmo conceito foi utilizado posteriormente por BOSS, E. A. (2000), onde foram realizados a análise da concentração da miscela e por JORGE, *et al.* (2010), onde foi realizado a análise da concentração do caldo de cana de açúcar, utilizando simulador *HYSYS*.

Após as adaptações do software, para vários modelos, nas simulações de variados processos, resultou em uma grande vertente de trabalhos científicos que fizeram uso desse simulador na modelagem, simulação de processos industriais diversos tais como FUGÈRE *et al.* (2007) na avaliação de um processo para transformar dejetos de suínos em um produto com valor agregado; HOCH e ESPINOSA (2008) no processamento de bioetanol; KUMORO *et al.* (2009) na avaliação de extração da piperina e solubilidade em fluido supercrítico a partir do fruto da pimenta preta; JORGE *et al.* (2010) na concentração de caldo de cana-de-açúcar em evaporadores falling-film; CHANG e LUI (2010) no processo de produção de biodiesel; QUESADA-MEDINA *et al.* (2010) no estudo da extração de lignina da casca de amêndoa.

3. MODELAGEM SIMULAÇÃO E ANÁLISE DO OLEO DE SOJA

3.2. Introdução

Embora seja essencial na obtenção de dados preliminares para o projeto, o alcance das propriedades físicas de matéria-prima de origem vegetal, por meio laboratorial, precisa de grande quantidade de tempo e sempre os resultados estão intimamente ligados com a composição da matéria-prima utilizada, que reflete a característica de uma determinada região da cultura.

NOUREDDINI *et al.*, (1992) apresenta uma metodologia, partindo de dados experimentais, em que foi possível calcular a densidade e viscosidade de óleos vegetais a partir da composição dos ácidos graxos constituintes. O mesmo princípio foi seguido por MORAD *et al.*, (2000) estimaram a capacidade calorífica de vários óleos vegetais e triacilglicerídeos. HAMMOND *et al.*(2004), apresentam uma vasta revisão da literatura de propriedades físicas em função da temperatura para o óleo de soja puro.

Informações sobre as propriedades físicas de substâncias oleaginosas, como óleo de soja, modeladas e simuladas a partir de simuladores industriais, em função da

temperatura e validadas a partir de dados experimentais aparentes não são encontradas na literatura.

Este capítulo tem o objetivo de apresentar a modelagem e simulação do óleo de soja no simulador industrial *HYSYS* a fim de obter parâmetros físicos expressos em função da temperatura. Os resultados obtidos no simulador industrial foram avaliados através da comparação com resultados da literatura.

3.3. Óleo de soja

Os óleos vegetais são substâncias líquidas de origem vegetal, insolúveis em água, e que consistem predominantemente de ésteres glicerídicos de ácidos graxos, ou triacilgliceróis. Estruturalmente, um triacilglicerol é o produto da condensação de uma molécula de glicerol com três moléculas de ácidos graxos, gerando três moléculas de água e uma molécula de triacilglicerol. Qualquer ácido graxo não esterificado é dito ácido graxo livre.

O óleo de soja esta em segundo plano, com relação ao óleo de soja. Também de muita importância econômica e se destaca no consumo global de óleos vegetais, face ao seu preço e por se tratar de um óleo inodoro, de coloração clara e com alto teor de ácidos graxos essenciais. O óleo de soja esta presente em aproximadamente 90% dos lares dos brasileiros (SOARES, 2004).

O óleo extraído por solvente é designado como óleo bruto e contem muitos compostos químicos que devem ser removidos pelo processamento antes que esteja pronto para consumo. A Tabela 3.1 mostra a composição do óleo de soja bruto e refinado (PERKINS, 1995).

Tabela 3.1 Composição do óleo de soja bruto e refinado.

<i>Componentes</i>	<i>Óleo de soja bruto</i>	<i>Óleo de soja refinado</i>
Triacilgliceróis (%)	95,99 – 97,00	>99,00
Fosfolipídios (%)	1,50 – 2,50	0,003 – 0,045
Insaponificáveis (%)	1,6	0,3
Fitosteróis (%)	0,33	0,11 – 0,18
Tocoferóis (%)	0,15 – 0,21	0,01
Hidrocarbonetos (Esqualeno) (%)	0,014	0,01
Ácidos Graxos Livres (%)	0,3 – 0,7	< 0,05
Traços de Metais		
Ferra (mg/Kg)	1,0 – 3,0	0,1 – 0,3

Fonte: PERKINS, (1995).

O óleo de soja é uma substância de classificação lipídica, por sua vez, os lipídios são substâncias caracterizadas pela baixa solubilidade em água e outros solventes polares e pela alta solubilidade em solventes apolares. Os lipídios podem ser divididos em classes de compostos mais simples como ácidos graxos, triacilgliceróis (TAG) e lipídeos complexos, tais como ceras, fosfoglicerídeos (fosfolipídeos), esfingolipídeos, lipoproteínas, esteróis e vitaminas lipossolúveis (FREGOLENTE, 2010).

Os triglicerídeos (TAG) são lipídeos formados pela ligação de três moléculas de ácidos graxos como o glicerol, um triálcool de três carbonos, através de ligações do tipo éster, como ilustrado na Figura 3.1.

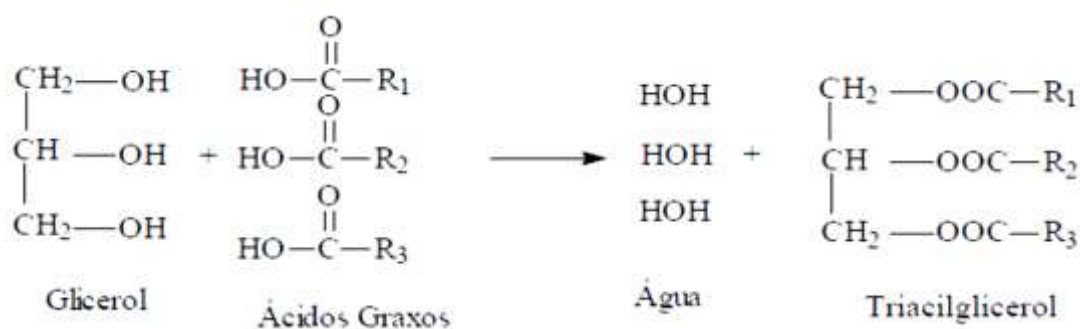


Figura 3.1 Formação de uma molécula de triacilglicerol, R1, R2 e R3 são cadeias carbônicas de ácidos graxos, saturadas ou insaturadas.

Fonte: FREGOLENTE, (2010).

A composição do óleo de soja, exposta nos principais ácidos graxos, presentes nos TAG's e a estruturas das cadeias destas moléculas estão apresentadas respectivamente na Tabela 3.2 e na Figura 3.2. Com referência na Tabela 3.2 observa-se que a porcentagem média total de matéria graxa no óleo bruto de soja é de

aproximadamente 95,80%, sendo que os demais 4,20% restante formado pelos componentes não glicéridos. De acordo com MOURA (2002), esses 4,20% de compostos são constituídos por compostos minoritários como fosfolipídios, esteróis, pigmentos, carboidratos, proteínas, matéria insaponificável, tocoferóis e seus produtos de degradação. Estas substâncias podem conferir *flavur* e cor, que são características indesejáveis para o armazenamento em longo prazo e consumo, podendo ocasionar uma redução na estabilidade do óleo.

As diferentes propriedades físicas encontradas nos óleos vegetais, em sua maioria, determinadas pela composição em ácidos graxos e pela extensão de saturados ou insaturação presente. Estes aspectos são identificados pelo comprimento da cadeia carbônica e pelo número e posição das duplas ligações (O'BRIEN, 1998).

Tabela 3.2 Composição dos ácidos graxos no óleo de soja, utilizado na modelagem e simulação do processo.

<i>Componentes</i>	<i>Fração</i>	<i>Peso molecular</i>	<i>Formula</i>	<i>Ponto de</i>
	<i>mássicas(%)</i>	<i>(g/mol)</i>	<i>molecular</i>	<i>ebulicão (°C)</i>
Ácidos				
Láurico	0,10	200,32	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	91,20
Mirístico	0,20	228,38	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	250,00
Palmítico	10,70	256,44	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	351,5
Estearico	3,90	284,48	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	232,20
Araquídico	0,20	312,54	C ₂₀ H ₄₀ O ₂	204,00
		Ácidos Insaturados		
Palmitoleico	0,30	254,41	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	131,00
Oleico	22,80	282,44	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	288,00
Linoleico	50,80	280,44	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	229,00
Linolênico	6,80	278,44	C ₁₈ H ₃₀ O ₂	231,00
Total	95,80			

Fonte: PERKINS (1995).

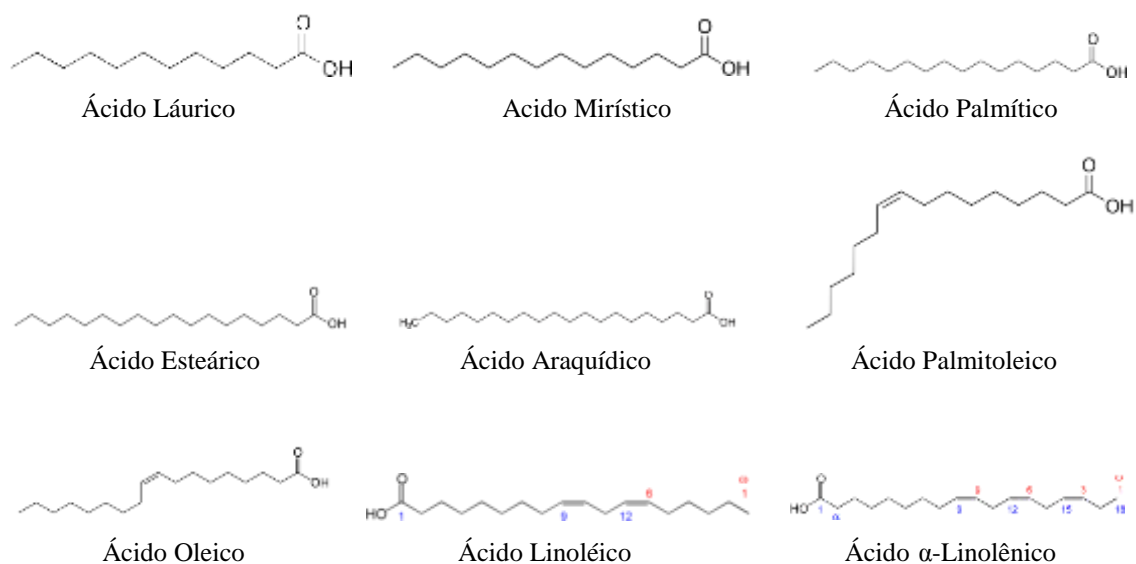


Figura 3.2 Estruturas dos Ácidos graxos presentes no óleo de soja.

3.4. Modelagem do óleo de soja como um composto-hipotético no HYSYS

O software utilizado para realizar a modelagem e simulação do processo de concentração da miscela do óleo de soja é voltado para as indústrias petroquímicas, não apresentando no banco de dados uma molécula que represente o óleo de soja. Porém, neste mesmo simulador, é possível realizar a modelagem de substâncias hipotéticas, a partir das estruturas químicas de cada molécula, constituída no óleo de soja, realizando a predição das propriedades físicas e químicas por meio da tecnologia de compostos hipotéticos presentes no simulador, conhecendo a estrutura química de cada molécula composta no óleo de soja, a ser analisado.

A modelagem e simulação de processos utilizando simulador como o *HYSYS*, pode contribuir de forma decisiva, auxiliando na determinação das melhores condições de processamento e de projeto, visando à redução de custos e a proteção do meio ambiente e do consumidor nas indústrias já instaladas. Tais condições podem propiciar um consumo menor de energia e um nível mais elevado de recuperação de hexano.

As estruturas descritas, nas Tabelas 3.1 e 3.2, presentes no óleo de soja tem ação individual nas propriedades físico-químicas na substância. No entanto, devido a uma pequena quantidade das outras substâncias em relação aos ácido graxos (menor que 4,0%), neste trabalho foi considerado o óleo de soja como sendo uma mistura de ácidos graxos, realizando a montagem e criação de um óleo de soja hipotético. As moléculas

dos ácidos graxos também não estão disponíveis diretamente para uso no *HYSYS*, com isso foi utilizado a avaliação de distribuição e contribuição de grupo por moléculas através do método UNIFAC, descrita por HANSEN *et al.* (1991), também sendo utilizada por SANTANA *et al.* (2010). Foram construídas moléculas hipotéticas dos ácidos graxos, de acordo com a Figura 3.3, Laurico, Mirístico, Palmítico, Esteárico, Araquídico, Palmitoleico, Oleico, Linoleico e Linolênico. Estes ácidos graxos foram observados como os principais constituintes dos triacilglicerídeos composto no óleo de soja nos trabalhos do NETO (2012), NOUREDDINI *et al.* (1992), MORAD *et al.* (2000), PARAISO (2001). Neste trabalho, todas as propriedades dos pseudo-ácidos graxos foram estimadas pelo *HYSYS*. Na simulação do equilíbrio de fase e previsão do coeficiente de atividade utilizou-se o modelo termodinâmico NRTL para a fase líquida e o modelo Peng-Robinson para fase gasosa.

NETO (2012) utilizou esta metodologia na modelagem e simulação do óleo de soja, a partir das propriedades do óleo de soja hipotético modelado no *HYSYS*, a partir das frações mássicas dos ácidos graxos constituintes, utilizando o método UNIFAC. Nas simulações das propriedades físicas para o óleo de soja hipotético foram comparadas com os resultados pesquisados na literatura, com o óleo de soja real. Os resultados tiveram um desvio relativo de menor 7% para densidade mássica, menor que 5% para capacidade calorífica, menor que 10% para tensão superficial e condutividade térmica.

Na Figura 3.3 pode-se observar um exemplo da modelagem do ácido graxo oleico. Por meio do conhecimento da estrutura química das moléculas de ácidos graxos (Figura 3.2), foi quantificado os grupos formadores da estrutura seguindo o método UNIFAC e inseriu-se os dados no *HYSYS*. Depois de feito esse procedimento para cada ácido graxo, foi criada uma corrente denominada de óleo hipotético de soja (Figura 3.4). A composição dessa corrente, formada por ácidos graxos, foi dimensionada de acordo com a composição do óleo de soja apresentada por PERKINS (1995) (Tabela 3.2) totalizando 96,00% em massa. Os demais 4,00% da corrente de óleo de soja hipotético foi modelada com a substância esqualeno, que é uma substância não glicerídea presente no óleo de soja com elevado peso molecular (410,7 g/mol) e ponto de ebulição (285 °C a 25 mmHg), adicionalmente a sua baixa volatilidade.

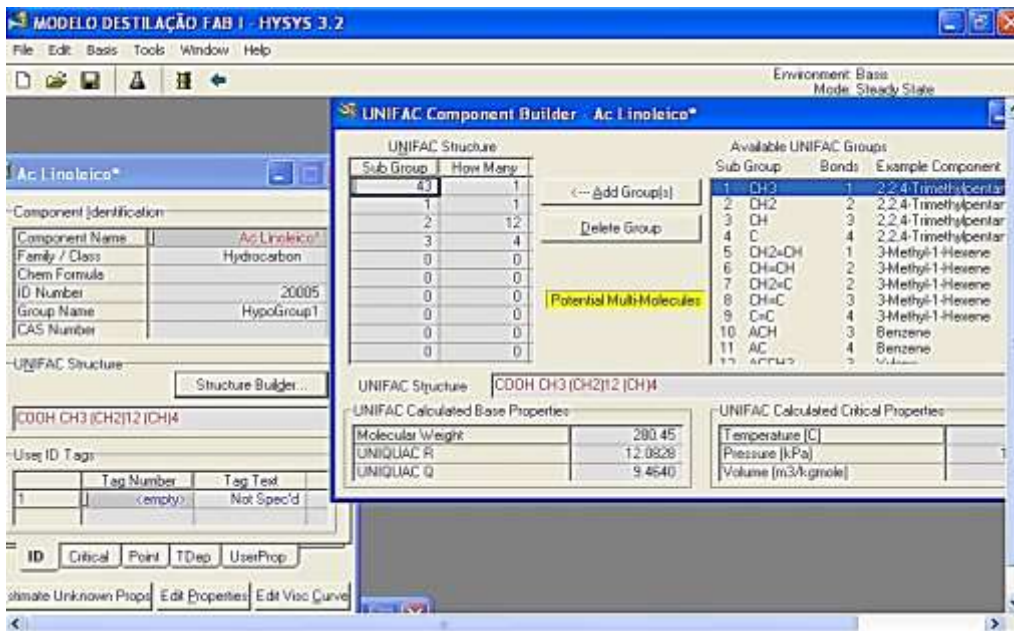


Figura 3.3 Tela de serviço do HYSYS para modelar compostos hipotéticos, utilizando a teoria de contribuição de grupos do método UNIFAC.

Após a utilização do método UNIFAC, na realização da modelagem do composto hipotético de óleo de soja, utilizado na pesquisa, foi quantificado cada ácido que compõem o óleo de soja, formando a corrente hipotética de óleo de soja, demonstrada na Figura 3.4.

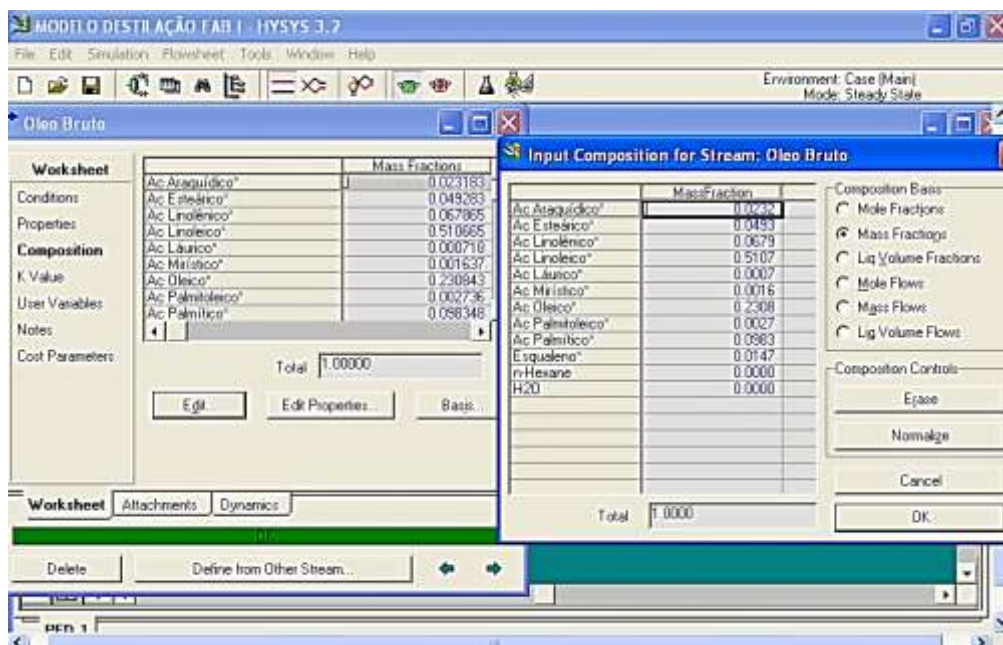


Figura 3.4 Tela de serviço do HYSYS para modelar a corrente de óleo hipotético de soja.

Para realizar a avaliação do óleo de soja hipotético, formado a partir do método UNIFAC, foi realizada a comparação com os resultados experimentais da literatura, apresentados em função da temperatura. As propriedades físicas utilizadas na comparação do óleo de soja simuladas no *HYSYS* foram à densidade mássica, capacidade calorífica, viscosidade dinâmica, tensão superficial e condutividade térmica.

Para realizar a simulação das propriedades físicas do óleo de soja, o *HYSYS*, disponibiliza a ferramenta *Data book*, demonstrada na Figura 3.5. Inicialmente foram estabelecidas as variáveis a serem analisadas da aba *Variables*, disponibilizada como ferramenta do *software*, selecionando o nome da corrente e as propriedades, em seguida. Posteriormente, foram selecionadas as variáveis dependentes e as variáveis independentes, sendo que nesta análise de comparação foi fixado como variável independente a temperatura, as propriedades foram variadas utilizando a aba *Case Studies*, como demonstrada na Figura 3.6. Os dados simulados foram obtidos e formatados em planilhas e comparados com os resultados encontrados na literatura. A partir destes resultados, foram gerados gráficos para análise e conclusão.

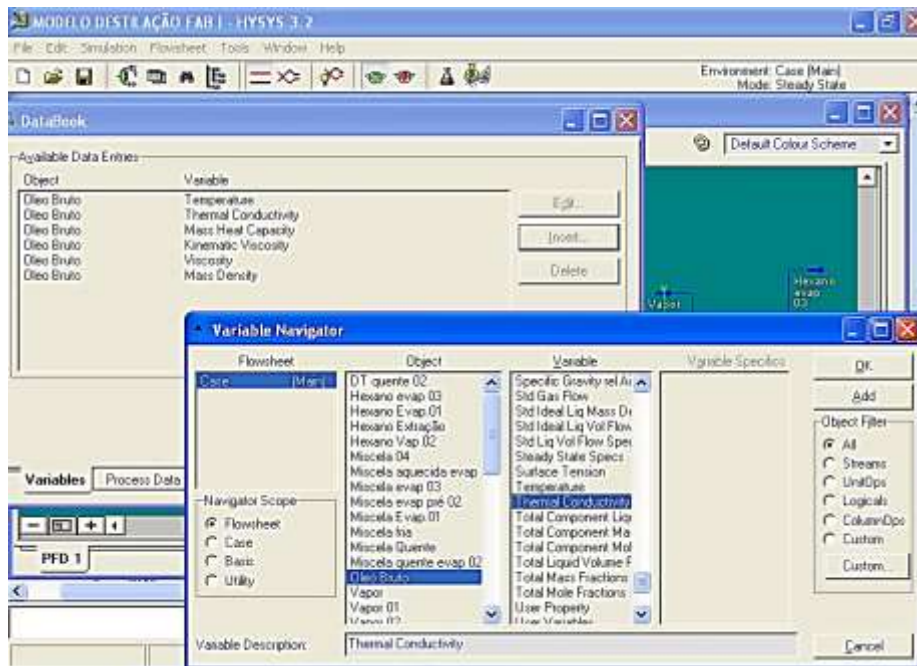


Figura 3.5 tela de serviço do HYSYS na ferramenta *Data book*, aba *Variable*

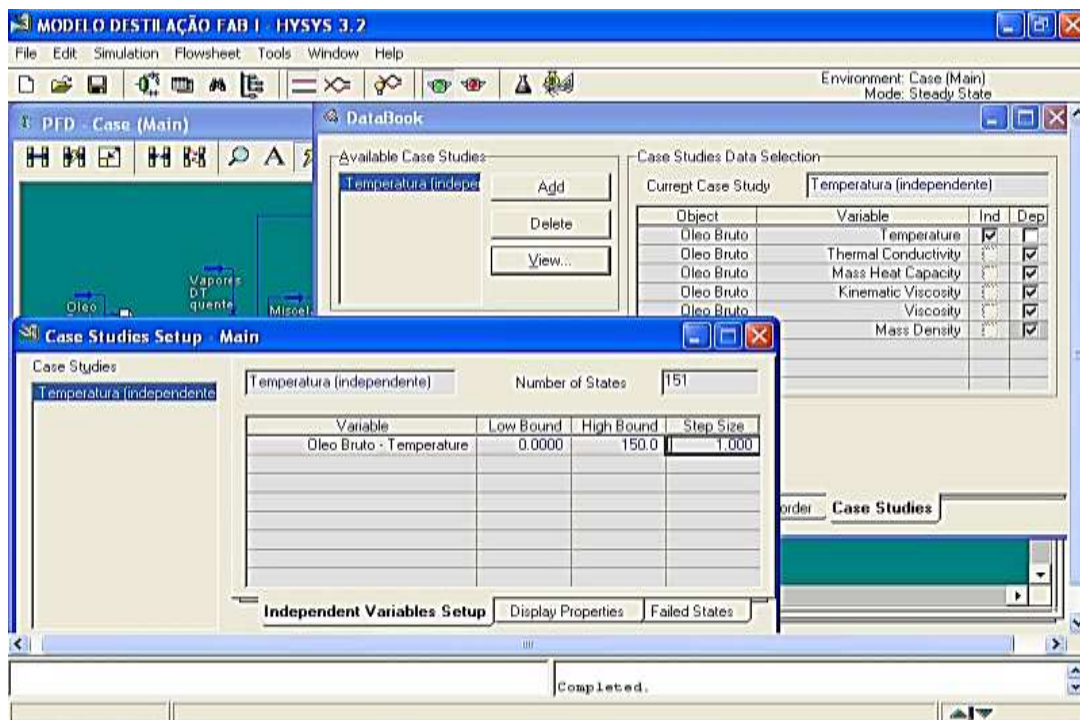


Figura 3.6 Tela de serviço do HYSYS da ferramenta Databook, aba Case Studies

3.5. Resultados e análises parcial

3.4.1 Densidade mássica

Com base na Figura 3.7, para análise dos resultados gerados no gráfico, observa-se que a densidade mássica do óleo de soja hipotético, tendo como variável a temperatura, simulado no *HYSYS* e resultados da literatura. Os resultados obtidos por ALVARADO (1995), ALVARADO (1996), RICE e HAMM (1988), NOUREDDINI *et. al.* (1992), tiveram os resultados aproximadamente iguais, entre eles. Esses autores encontraram estes resultados, a partir de experimentos com óleo de soja real. A simulação para o óleo hipotético no *HYSYS* demonstrou-se mais próxima dos resultados da literatura, das referencias citadas acima, do que o modelo proposto por MARIANI (2007) e NETO (2012), também desenvolvido no *HYSYS*, em cujo modelo o óleo de soja foi aproximado por uma molécula de éster com massa molar próxima a do óleo real. Com relação, ao modelo proposto nesse trabalho, revelou-se um desvio menor que 7,0%, quando comparado com os dados da literatura, utilizada como referencia (Figura 3.8). A simulação da densidade mássica, com o óleo hipotético, resultou em um comportamento decrescente linear (Equação 3.1), com $R^2=1,00$, para a variação da densidade mássica

com temperatura entre $0^{\circ}\text{C} \leq T \leq 150^{\circ}\text{C}$. Este comportamento também foi observado nos dados experimentais da literatura.

$$\rho_{\text{óleo hipotético}} = -0,0007T + 0,9374 \quad (3.1)$$

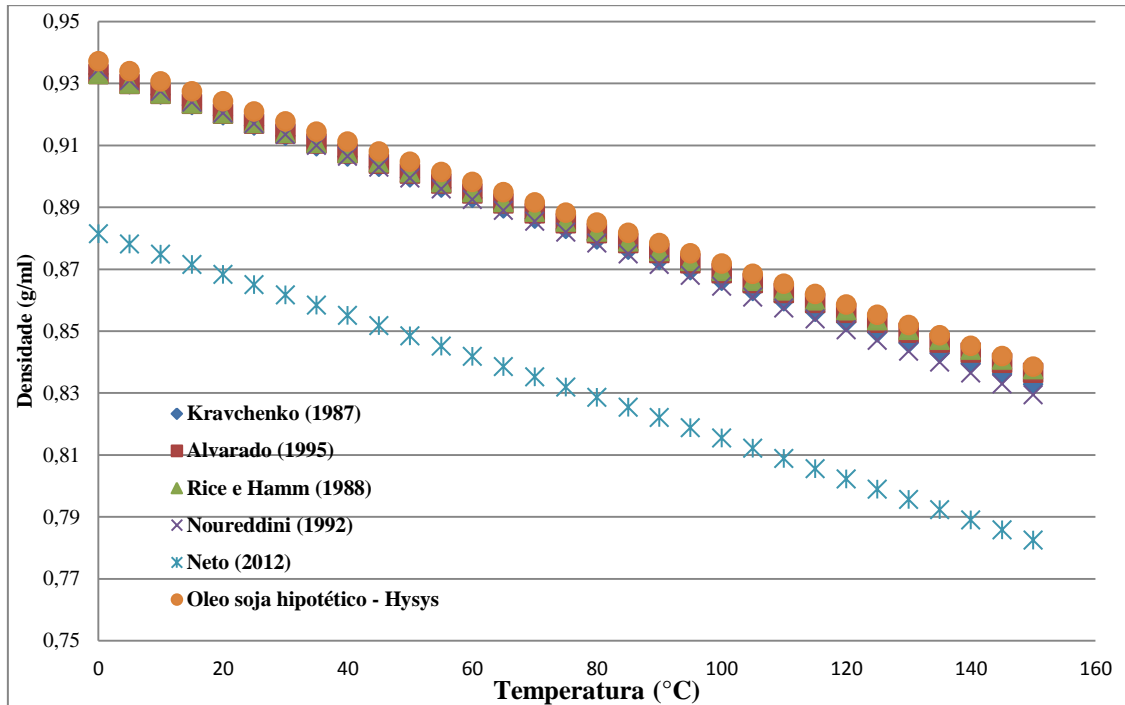


Figura 3.7 Comparação da densidade mássica do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS e os resultados da literatura.

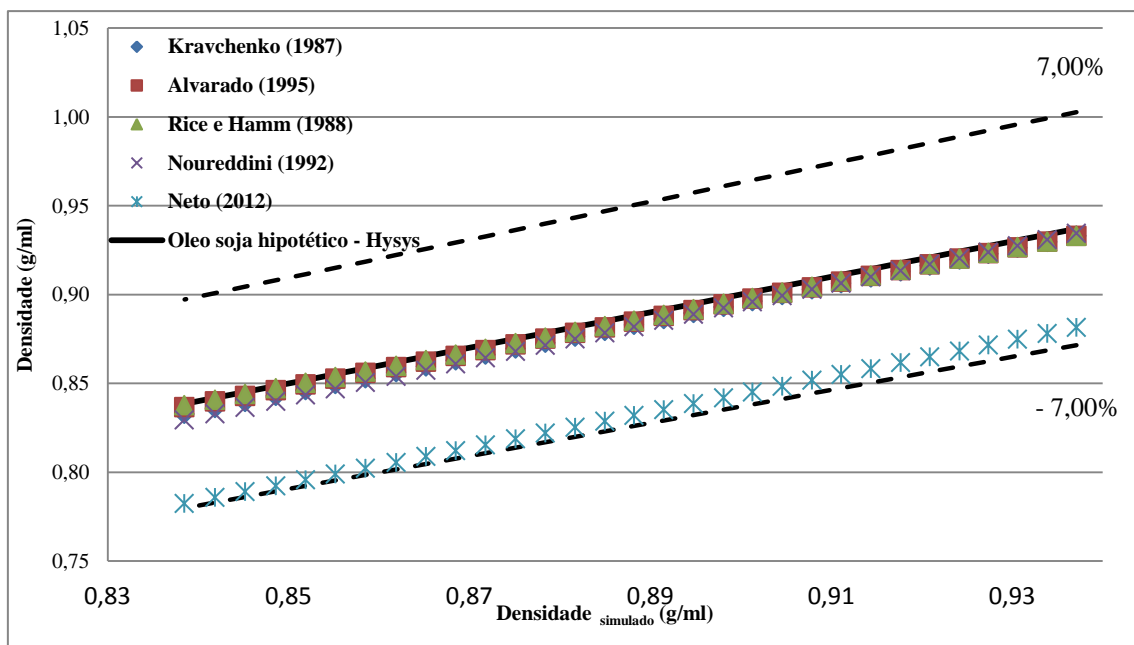


Figura 3.8 Comparação da densidade mássica do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS com os resultados da literatura.

3.4.2 Capacidade calorífica

Com base na Figura 3.9, para análise dos resultados gerados no gráfico, observa-se que a capacidade calorífica do óleo de soja hipotético, tendo como variável a temperatura, simulado no HYSYS e resultados da literatura. Para esta propriedade, capacidade calorífica apresentou comportamento crescente linear, com o aumento da temperatura. Com os dados simulados no HYSYS, chegou-se a Equação 3.2, com $R^2=0,9987$, no intervalo de $0^\circ\text{C} \leq T \leq 150^\circ\text{C}$. A Figura 3.10 observa-se um desvio médio, entre a capacidade calorífica do óleo de soja hipotético em relação ao resultado da literatura, de aproximadamente 10%, sendo os resultados gerados pelo óleo de soja hipotético no HYSYS, possuir uma maior proximidade com os resultados do NETO (2012), em todas as faixas de temperatura avaliadas.

$$C_{p,\text{óleo hipotético}} = 0,0039T + 1,7321 \quad (3.2)$$

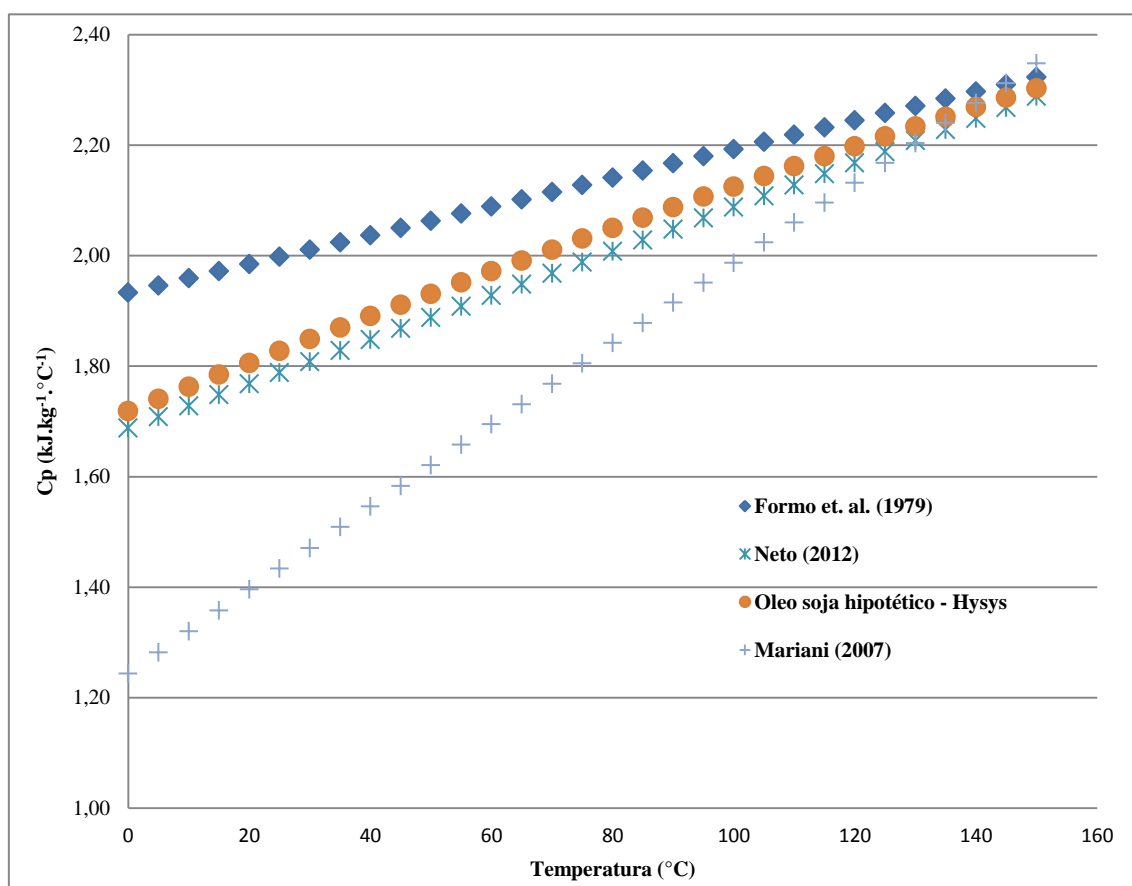


Figura 3.9 Perfil da capacidade calorífica do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS e resultados de literatura.

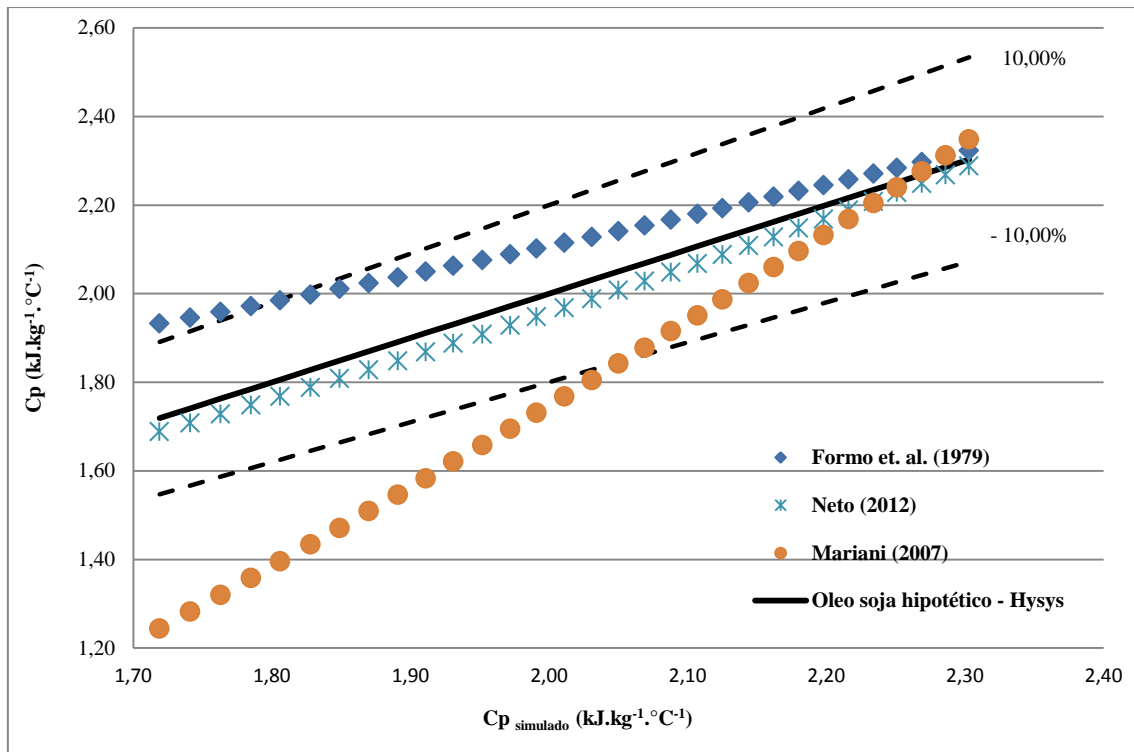


Figura 3.10 Comparação da Capacidade Calorífica do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS com resultados da literatura.

3.4.3 Tensão superficial

Com base na Figura 3.11, para análise dos resultados gerados no gráfico, observa-se que a tensão superficial do óleo de soja hipotético, tendo como variável a temperatura, simulado com o óleo de soja no *HYSYS* e resultados da literatura. Obteve-se a Equação 3.3 com $R^2 = 0,9999$, no intervalo de temperatura entre $0^\circ\text{C} \leq T \leq 150^\circ\text{C}$. Observou-se maior consonância das simulações do óleo de soja hipotético com os resultados encontrados por NETO (2012). Analisando a Figura 3.12, constatou-se que os desvios observados em relação aos dados desse autor foram menores que 40,00%.

$$\sigma_{oleo\ hipotético} = -0,0767T + 42,211 \quad (3.3)$$

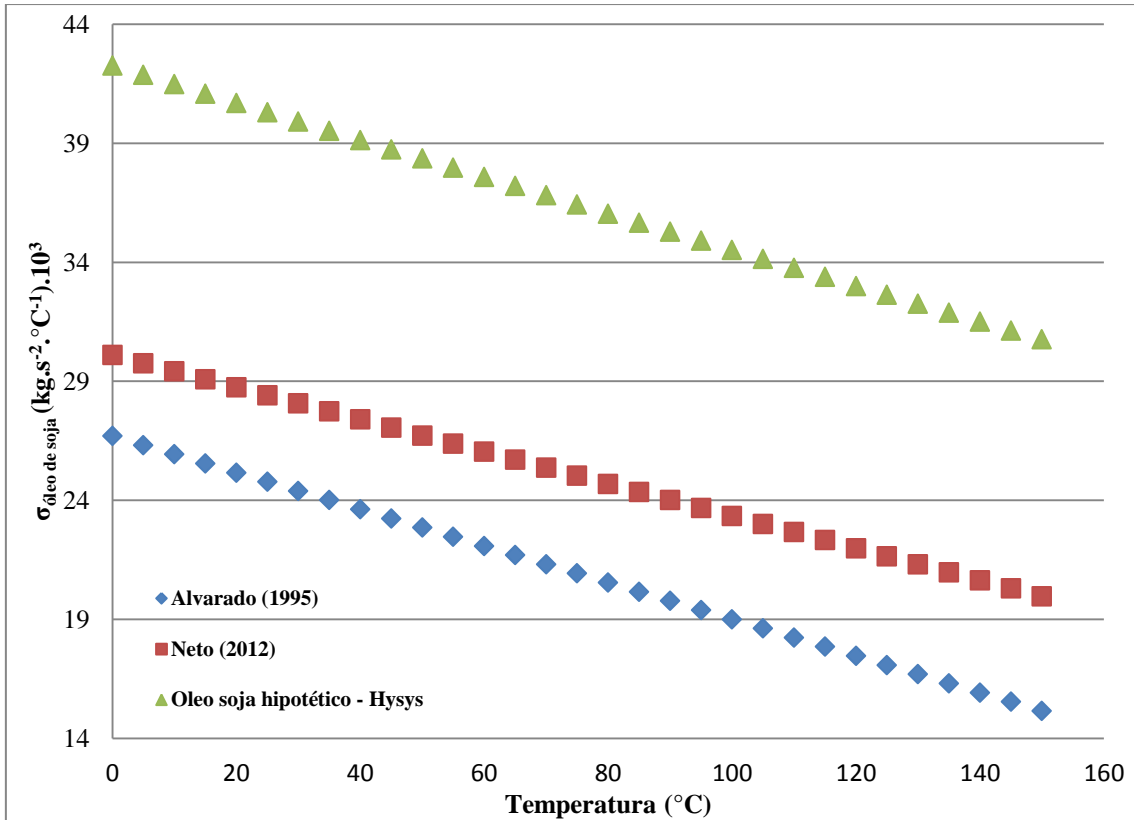


Figura 3.11 Perfil da Tensão superficial do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS e dos resultados da literatura.

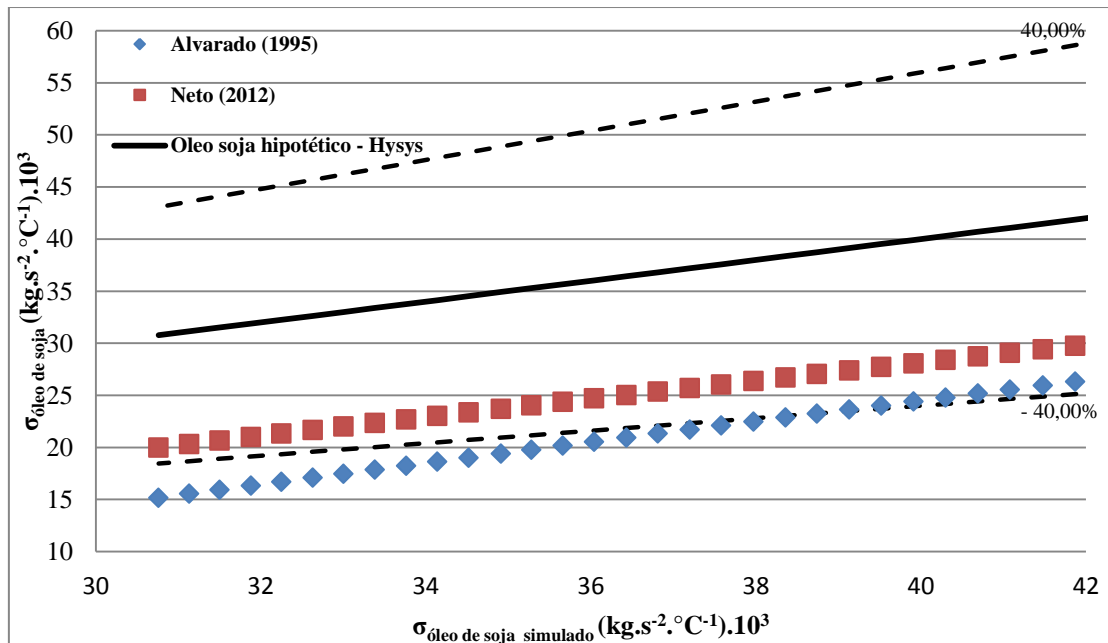


Figura 3.12 Comparação da tensão superficial do óleo de soja hipotético no HYSYS com resultados da literatura

3.4.4 Condutividade térmica

Com base na Figura 3.13, para análise dos resultados gerados no gráfico, observa-se que a condutividade térmica do óleo de soja hipotético, tendo como variável a temperatura, simulado com o óleo de soja hipotético no HYSYS e resultados da literatura. A propriedade física condutividade térmica, apresenta comportamento decrescente linear, com relação ao aumento da temperatura, obtendo a Equação 3.4, com $R^2 = 0,9999$, no intervalo de temperatura de $0^{\circ}\text{C} \leq T \leq 150^{\circ}\text{C}$. Realizando a análise da Figura 3.14, observa-se que houve melhor concordância das simulações com o óleo de soja hipotético, com os resultados encontrados por MARIANI (2007), no entanto, em comparação com os resultados experimentais do óleo de soja hipotético do BROCK *et. al.* (2008) e NETO (2012), encontrou-se um desvio médio menor de 10,00%, no intervalo de temperatura simulado.

$$K_{oleo\ hipotético} = -0,0002T + 0,1718 \quad (3.4)$$

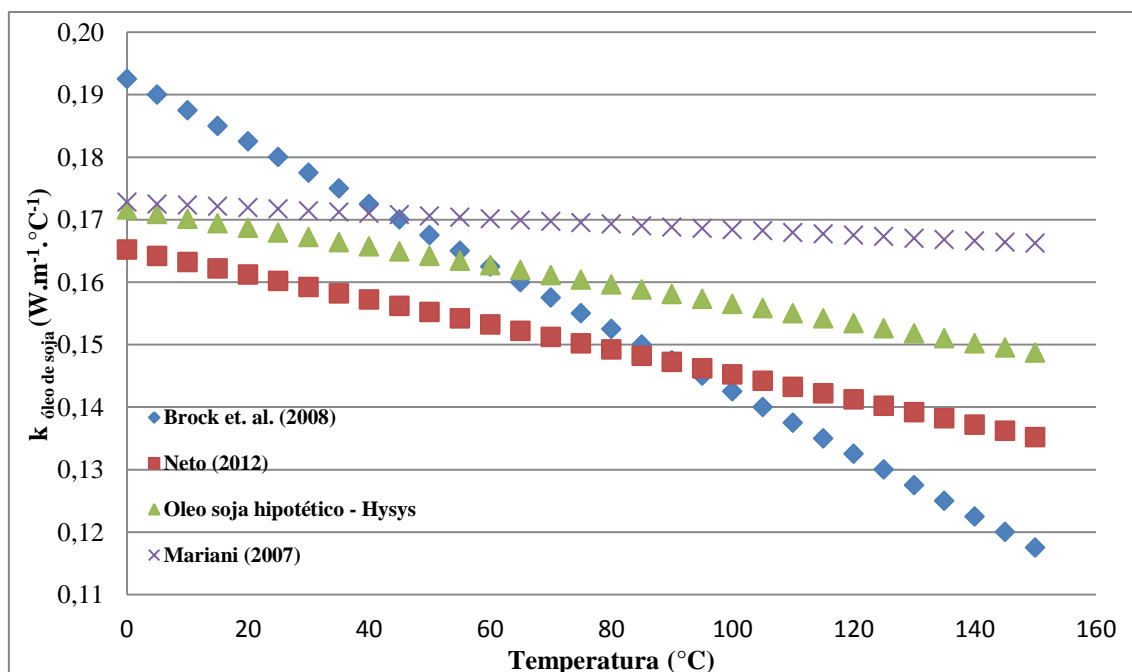


Figura 3.13 Perfil da condutividade térmica do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS e resultados da literatura.

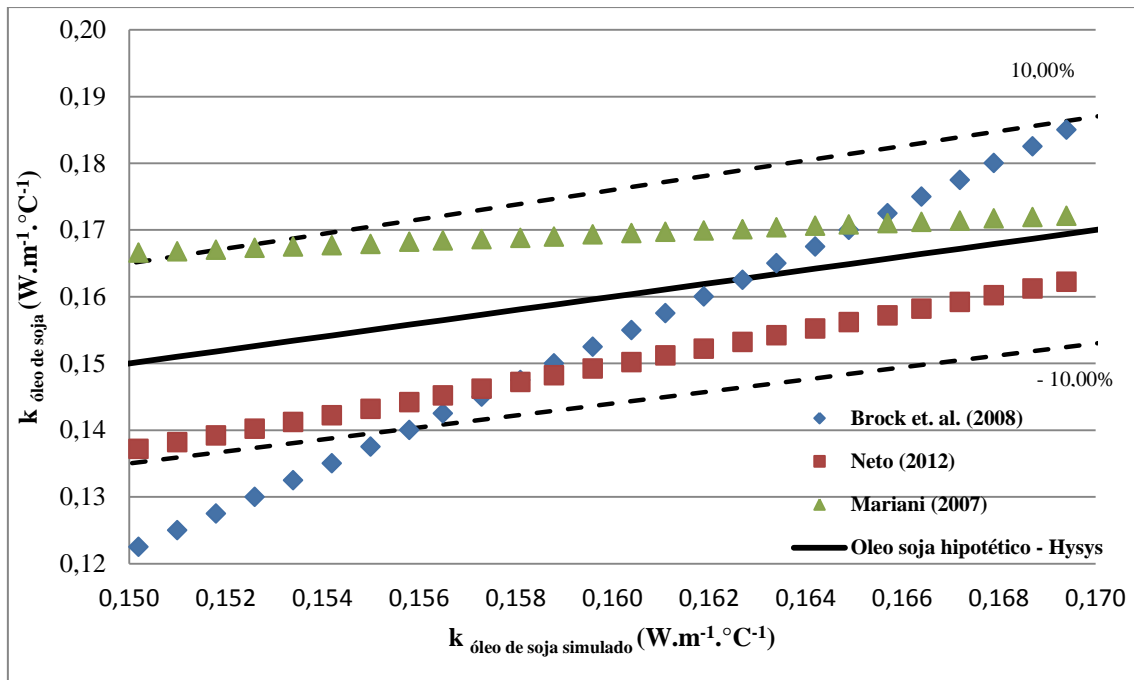


Figura 3.14 Comparação da condutividade térmica do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS com resultados da literatura

3.4.5 Viscosidade dinâmica

Com base na Figura 3.15, para análise dos resultados gerados no gráfico, observa-se que a viscosidade dinâmica do óleo de soja hipotético, tendo como variável a temperatura, simulado com o óleo de soja hipotético no *HYSYS* e resultados da literatura, apresentaram comportamento decrescente com o aumento da temperatura, como observado na Figura 3.15 e observa-se que teve um desvio maior que 50% para esta propriedade física, como observado na Figura 3.16, quando a simulação realizada no *HYSYS*, foi comparada com outros estudos encontrados na literatura. Os resultados experimentais com o óleo de soja real, obtidos por NETO (2012) e MARIANI (2007), observado na Figura 3.15, observa-se que o modelo proposto por NETO (2012), que simulou o óleo de soja hipotético, concordou melhor com os dados simulados, com a simulação deste componente, gerou-se a Equação 3.5, com $R^2 = 0,9537$, em um intervalo de temperatura de $0\text{ }^\circ\text{C} \leq T \leq 150\text{ }^\circ\text{C}$.

$$\mu_{\text{oleo hipotético}} = 16,342e^{-0,026T} \quad (3.5)$$

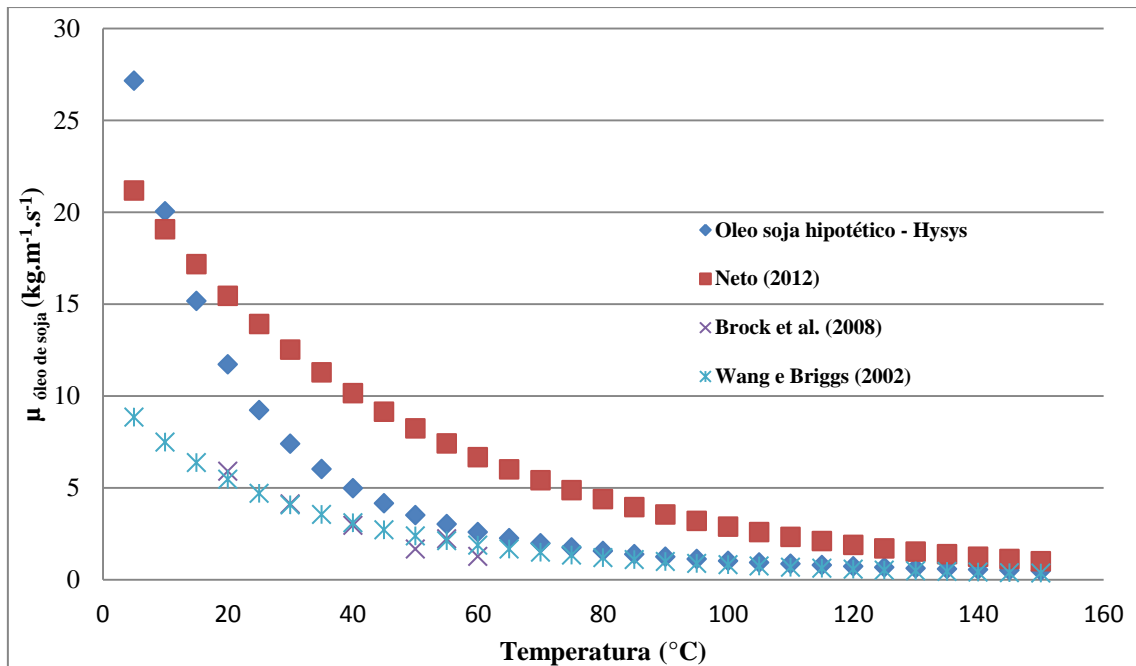


Figura 3.15 Comparação da viscosidade dinâmica do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS e resultados da literatura

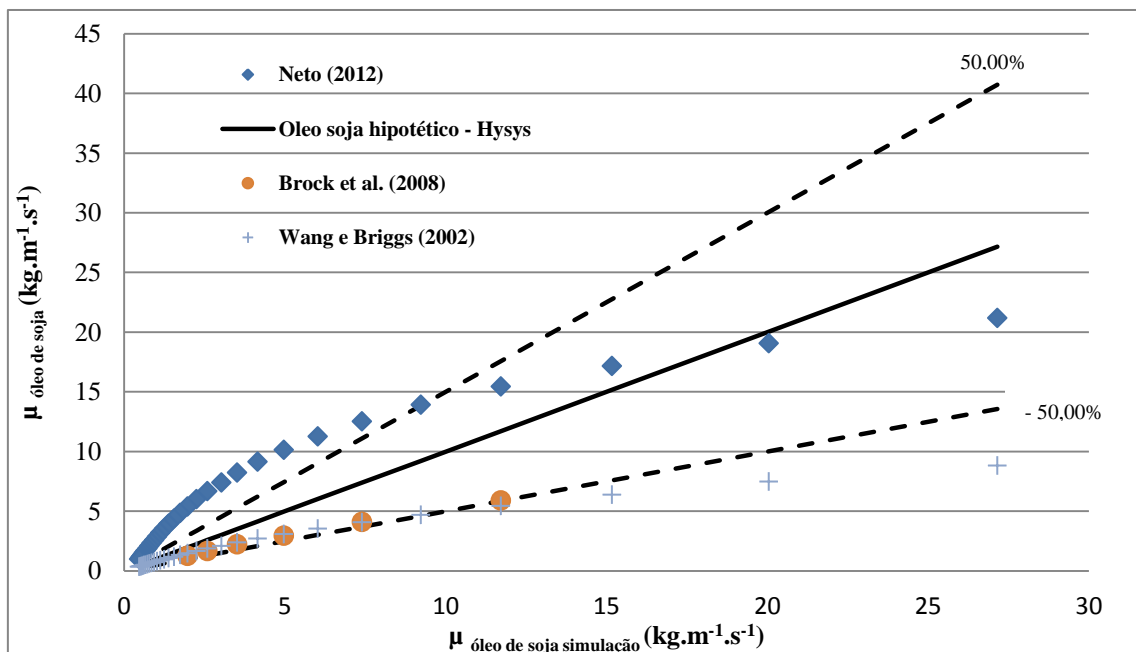


Figura 3.16 Comparação da viscosidade dinâmica do óleo de soja hipotético simulado no HYSYS com resultados da literatura

3.5 Conclusões parciais

Os resultados foram satisfatórios, quando comparados às propriedades físicas do óleo de soja hipotético modelado no *HYSYS*, a partir dos ácidos graxos constituintes e

utilizando a avaliação de distribuição de grupos por moléculas do método UNIFAC, com relação aos dados experimentais da literatura.

Nas simulações das propriedades físicas para o óleo de soja hipotético, quando comparadas com os resultados da literatura, realizados com óleo de soja real, mostraram um desvio relativo menor de 7%, para densidade mássica, menor que 10%, para capacidade calorífica, menor que 40%, para a tensão superficial, menor que 10%, para a condutividade térmica, menor que 50%, para a viscosidade.

As propriedades estudadas apresentam-se coerentes com os valores experimentais da literatura, por tanto o óleo hipotético modelado no *HYSYS* se torna uma alternativa de grande viabilidade na realização de uma modelagem e simulação dos processos que envolvem os equipamentos evaporadores do processo de destilação de miscela.

4 Modelagem e simulação da miscela de óleo de soja e hexano

4.1 Introdução

As propriedades físicas da miscela, constituída pelo óleo de soja e o solvente hexano, tem sido constantemente estudado e os resultados de experimentação em simuladores industriais e em função das variáveis do processo industrial, como a temperatura e a concentração da miscela, durante o processo de destilação, não foram encontradas na literatura.

Para analisar um processo de extração de óleo de soja, é importante ter o conhecimentos dos principais parâmetros físicos envolvidos no processo, como a densidade, o calor específico e a viscosidade da mistura óleo e solvente, em função da concentração e da temperatura de operação nos dimensionamentos dos equipamentos que constituem o processo envolvido, estes parâmetros são utilizados principalmente na troca de calor. Tais alterações das propriedades físicas devem ser quantificadas para prever a variação de transformação ou para modificar o equipamento de processamento para uma operação mais eficiente (JOHNSTONE *et al.*, 1940; MAGNE E SKAU, 1945; SKAU *et al.*, 1955; HOUGEN, 1957; WANG e BRIGGS, 2002; BROCK *et al.*, 2008).

Na realização de projetos de dimensionamentos e manutenção durante análise de equipamentos que envolvem grande transferência de massa e calor, como evaporadores e colunas *stripper*, constituintes da etapa do processo de destilação da miscela (óleo de soja com solvente hexano), os parâmetros físicos são de fundamental importância na análise e conclusão de projetos ou manutenção, onde estes equipamentos apresentam grande interesse na indústria de extração de óleos e solventes, buscando uma diminuição do custo industrial, com o consumo de vapor de água e obter a melhor recuperação do solvente hexano, possível (KENYON *et al.*, 1948).

Como exemplo de aplicação industrial da densidade da mistura óleo de soja com solvente hexano, como função da temperatura e da concentração é de ser possível determinar rapidamente a concentração da miscela, em cada evaporador constituído no processo de destilação, a partir das propriedades físicas, envolvidas neste processo (MAGNE *et al.*, 1950).

OTHMER e JAATINEN (1939) ao estudar o processo de extração de soja, por solvente, determinaram que um parâmetro importante na avaliação do processo é através da observação da proporcionalidade existente entre a taxa de extração do óleo com a relação formada pelos parâmetros da solução (quociente do produto densidade mássica e tensão superficial pela viscosidade dinâmica, em um dados instante do processo. Observando que estes parâmetros é aproximadamente constantes para a concentrações em massa de óleo na miscela menor que 20% e que acima dessa concentração a relação apresenta em comportamento decrescente.

Geralmente, nas determinações experimentais das propriedades térmicas de alimentos, a maior dificuldade é atribuída a grande dependência destas em relação a temperatura e composição. Ainda, a maioria dos estudos envolvendo o desenvolvimento de modelos matemáticos e medidas experimentais de propriedades térmicas de alimentos é realizada utilizando sistemas modelo e os resultados são aplicados em indústrias de alimentos (RESENDE E SILVEIRA, 2002).

Neste contexto, o presente capítulo tem como principal objetivo apresentar a modelagem e a simulação da miscela (óleo de soja + solvente hexano), no simulador industrial *HYSYS*, para obter parâmetros físicos com relação a concentração e

temperatura constante. Na avaliação dos resultados obtidos, foram comparados com os resultados encontrados na literatura.

4.2 Modelagem da miscela hipotética de óleo de soja e hexano

Na modelagem da miscela hipotética do óleo de soja no *HYSYS*, demonstrado na Figura 4.1, utilizou-se a corrente de óleo de soja hipotética, apresentado no capítulo 3, sendo nomeado como “Óleo bruto” e uma corrente composta por n-hexano puro, nomeado como “hexano”, misturando as duas correntes de alimentação inicial, constituindo a corrente “miscela”.



Figura 4.1 integrantes da corrente de miscela hipotética de óleo de soja e hexano no *HYSYS*

Para a validação da miscela foram analisadas as propriedades físicas como a densidade mássica, a tensão superficial, viscosidade dinâmica e o quociente do produto densidade mássica e tensão superficial pela viscosidade dinâmica. O comportamento, das propriedades físicas da miscela hipotética, foi investigado perante a concentração de óleo presente na solução, à temperatura constante.

Durante a simulação das propriedades físicas na miscela hipotética modelada no *HYSYS*, utilizou-se a ferramenta *Data book*, sendo que esta ferramenta, disponibilizada pelo *software* de simulação industrial, pode ser realizada de forma parcial. O primeiro estágio constituiu-se em estabelecer as variáveis a serem avaliadas na aba *Variables*, selecionando o nome da corrente e em seguida a propriedade da mesma, utilizando a mesma analogia demonstrada na Figura 3.5. No segundo estágio, determinaram-se as variáveis dependentes e a variável independente, sendo que esta foi selecionada a concentração do hexano, e o passo de variação desse parâmetro na aba *Case Studies*, utilizando a mesma analogia demonstrada na Figura 3.6. Os resultados foram obtidos

em formato de planilha e comparados com os resultados encontrados com os resultados encontrados na literatura, em forma de gráfico.

No processo de destilação, ocorre o contato de duas fases em equilíbrio, sendo que a velocidade que uma espécie química é transferida de uma parte para outra fase depende do grau de afastamento do sistema, com relação ao equilíbrio, com isso o tratamento quantitativo destes processos de transferência exige o conhecimento dos estados de equilíbrio do sistema. Este conhecimento da transferência se faz através de estimativas do parâmetro do coeficiente de atividade.

O modelo termodinâmico NRTL (non-random two-liquids), proposto por RENON e PRAUSNITZ (1968) e SANDLER (2003) é uma extensão da equação de Wilson e é aplicável a sistemas com miscibilidade parcial, o que permite representar os equilíbrios líquido-vapor, líquido-líquido e líquido-líquido-vapor. CHANG e LIU (2010) apresentam vários trabalhos utilizando simuladores comerciais na modelagem e simulação do processo de produção de biodiesel, onde uma das matérias primas é o óleo de soja. Os trabalhos citados por estes autores com a utilização do *HYSYS* descrevem o uso do modelo termodinâmico NRTL na predição dos valores desconhecidos de equilíbrio de fases. Por tanto, a simulação dos equilíbrios de fases e previsão do coeficiente de atividade, utilizou-se o modelo NRTL, para a fase líquida e o modelo Peng-Robinson para a fase gasosa.

4.3 Resultados e discussões parciais

4.3.1 Densidade mássica

Analisando a Figura 4.2, observa-se que as simulações para densidade mássica da miscela desenvolvida a partir da modelagem no *HYSYS*, em comparação com os resultados encontrados por JOHNSTONE *et al.*, (1940), MAGNE e SKAU., (1945), MAGNE *et al.*, (1950) apresentam uma dispersão aproximadamente linear e crescente com o aumento da concentração de óleo na miscela, sendo que com os dados simulados obteve-se a Equação 4.1, com $R^2=0,9903$, para frações mássicas de óleo de soja na miscela na faixa de $0 \leq x \leq 1$ a 25°C . A boa coerência entre os dados, onde a mesma pode ser visualizada na Figura 4.2, foi demonstrada pelo desvio médio menor que 5%, onde pode ser observado na Figura 4.3.

$$\rho_{\text{miscela hipotética}, 25^{\circ}\text{C}} = 0,0029x_{\text{óleo na miscela}} + 0,6084 \quad (4.1)$$

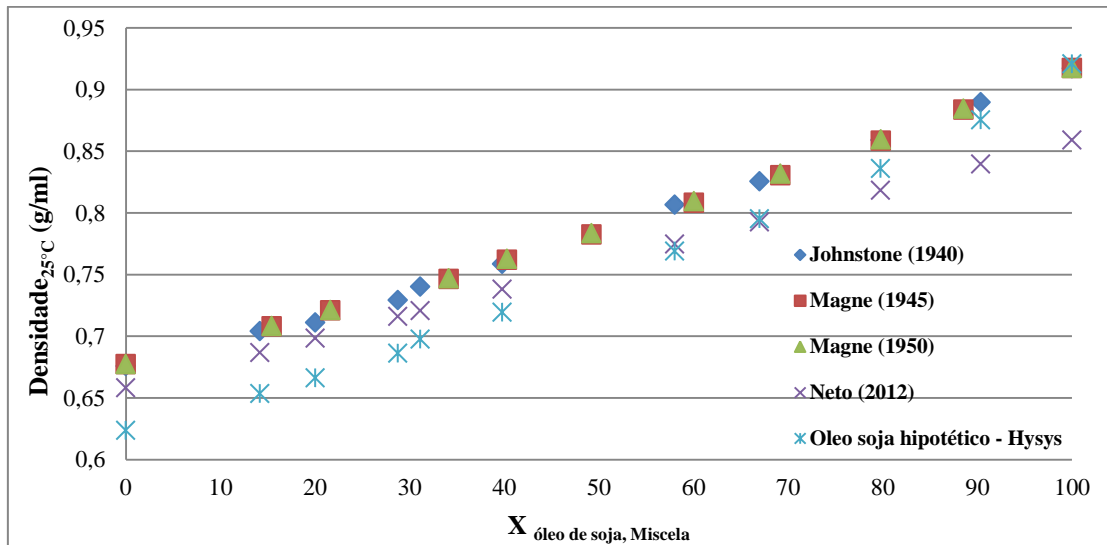


Figura 4.2 Comportamento da densidade mássica na miscela a 25°C formada com o óleo de soja hipotético no HYSYS e os resultados da literatura.

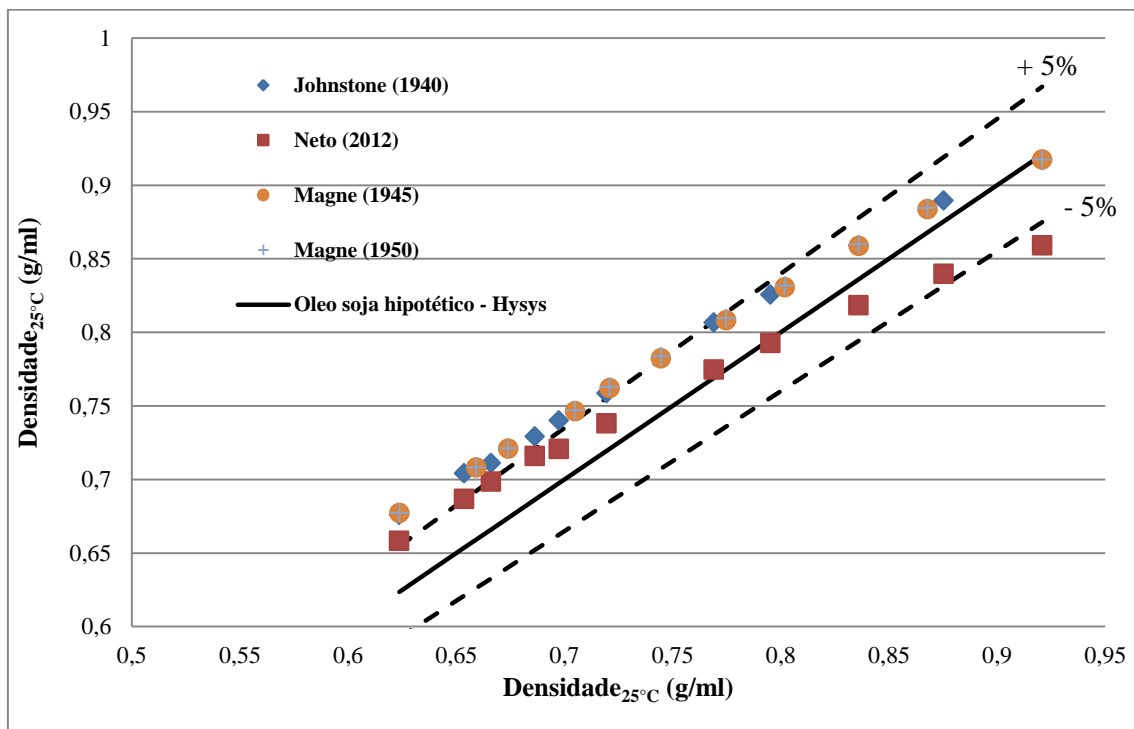


Figura 4.3 Comparação da densidade mássica na miscela a 25°C formada com óleo de soja hipotético no HYSYS e os resultados da literatura

Analisando a Figura 4.4, observa-se que as simulações para densidade mássica da miscela modelada no *HYSYS* e os resultados encontrados por JOHNSTONE *et. al.* (1940), MAGNE e SKAU (1945), MAGNE *et. al.*, (1950) apresentaram comportamento aproximadamente linear e crescente com o aumento da concentração de óleo de soja na

miscela. A partir dos dados simulados obteve-se a Equação 4.2 com $R^2=0,9882$ para frações mássicas de óleo de soja na miscela, no intervalo de $0 \leq x \leq 1$ a 40°C . A boa coerência dos dados simulados no *HYSYS* com os resultados encontrados por JOHNSTONE *et. al.* (1940), MAGNE e SKAU (1945), MAGNE *et al.*, (1950) pode ser analisada na Figura 4.4 e confirmada pelo desvio médio menor que 5%, entre os resultados, observados na Figura 4.5.

$$\rho_{\text{miscela hipotética},40^\circ\text{C}} = 0,0028x_{\text{óleo na miscela}} + 0,6102 \quad (4.2)$$

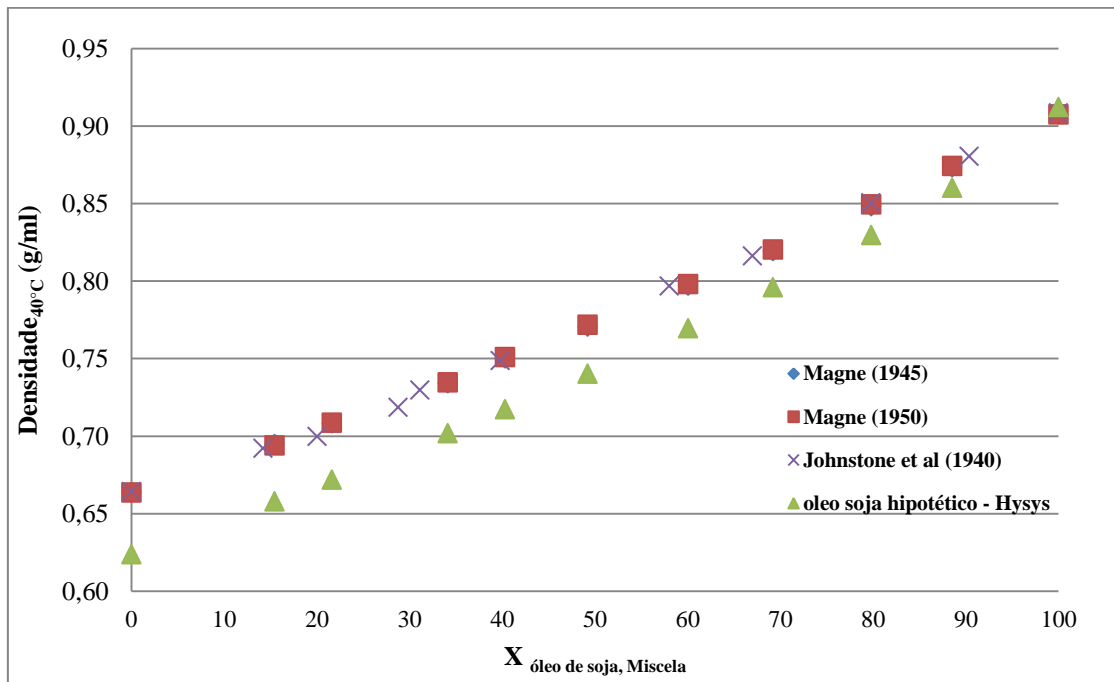


Figura 4.4 Comportamento da densidade mássica na miscela a 40°C formada com óleo de soja hipotético no HYSYS e dos resultados da literatura

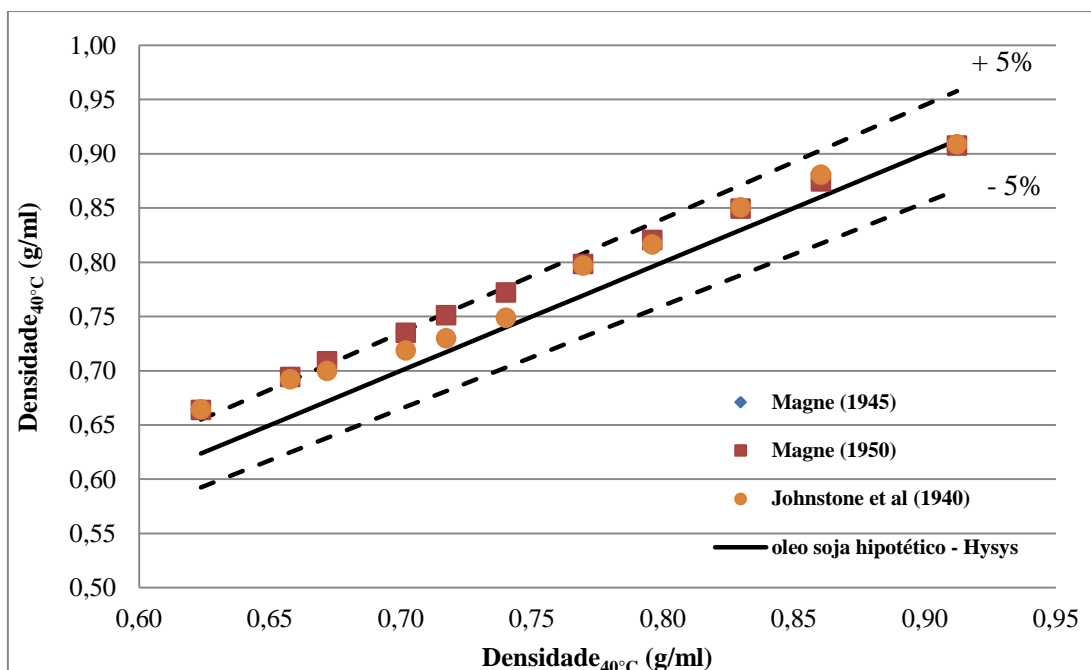


Figura 4.5 Comparação da densidade mássica na miscela formada com o óleo de soja hipotético simulado no HYSYS e resultados da literatura

4.3.2 Viscosidade dinâmica

Analisando a Figura 4.6, observa-se que a simulação para a viscosidade dinâmica da miscela aplicada no *HYSYS* e os resultados encontrado na literatura por JOHNSTONE *et al.* (1940), demonstram que há um crescimento com relação ao aumento da concentração do óleo de soja na miscela. A melhor correlação dos dados gerados na simulação deste trabalho com a literatura pesquisada pode-se observar até a presença de 70% de óleo na miscela, pois até esse valor de concentração a viscosidade do hexano interfere com maior intensidade na viscosidade da solução de miscela. Os resultados obtidos com a formação da miscela hipotética resultaram nas equações Equação 4.3 com $R^2=0,9634$ para a fração mássica de óleo de soja na miscela no intervalo de $0 \leq x \leq 1$, a temperatura de 25°C. Na Figura 4.7 pode-se observar que para concentrações de óleo de soja hipotético na miscela maiores que 60% são observados desvios menores que 20% para viscosidade dinâmica do óleo de soja hipotético em relação aos resultados de JOHNSTONE *et al.* (1940) e para concentrações no intervalo de 0 a 40% os desvios obtidos são aproximadamente nulos.

$$\mu_{miscela\ hipotetica, x(0\ a\ 1)} = 0,0126e^{0,0586x_{oleo, miscela}} \quad (4.3)$$

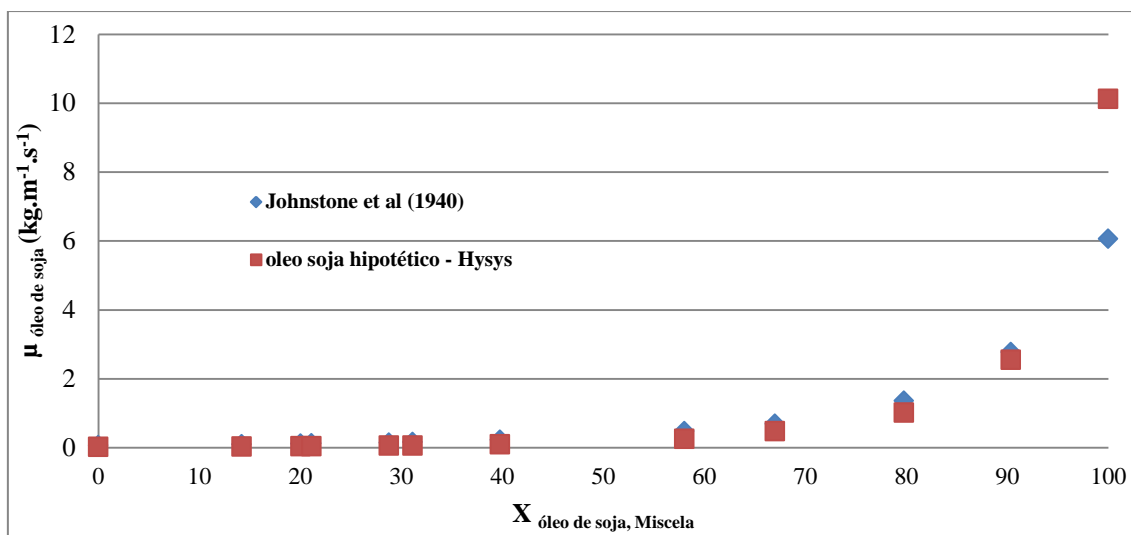


Figura 4.6 Comportamento da viscosidade dinâmica na miscela a 25°C formada por óleo de soja hipotético simulado no HYSYS dos resultados da literatura

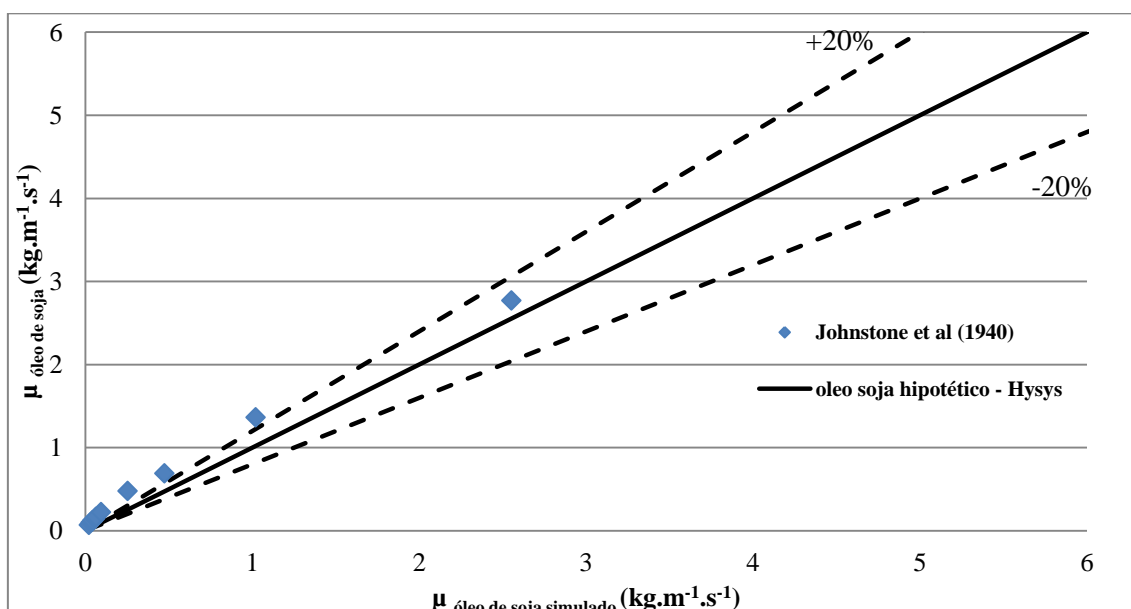


Figura 4.7 Comparação da viscosidade dinâmica na miscela formada por óleo de soja hipotético simulado no HYSYS com resultados da literatura, a 25°C.

Analisando a Figura 4.8, observa-se que as simulações para densidade mássica da miscela modelada no *HYSYS* e os resultados encontrados por *JOHNSTONE et al.* (1940), apresentaram comportamento aproximadamente linear e crescente com o aumento da concentração de óleo de soja na miscela. A partir dos dados simulados obteve-se a Equação 4.4 com $R^2=0,9713$ para frações mássicas de óleo de soja na miscela, no intervalo de $0 \leq x \leq 1$ a 37,8°C. A boa coerência dos dados simulados no *HYSYS* com os resultados encontrados por *JOHNSTONE et al.* (1940), pode ser

analisada na Figura 4.8 e confirmada pelo desvio médio menor que 20%, entre os resultados, observados na Figura 4.9.

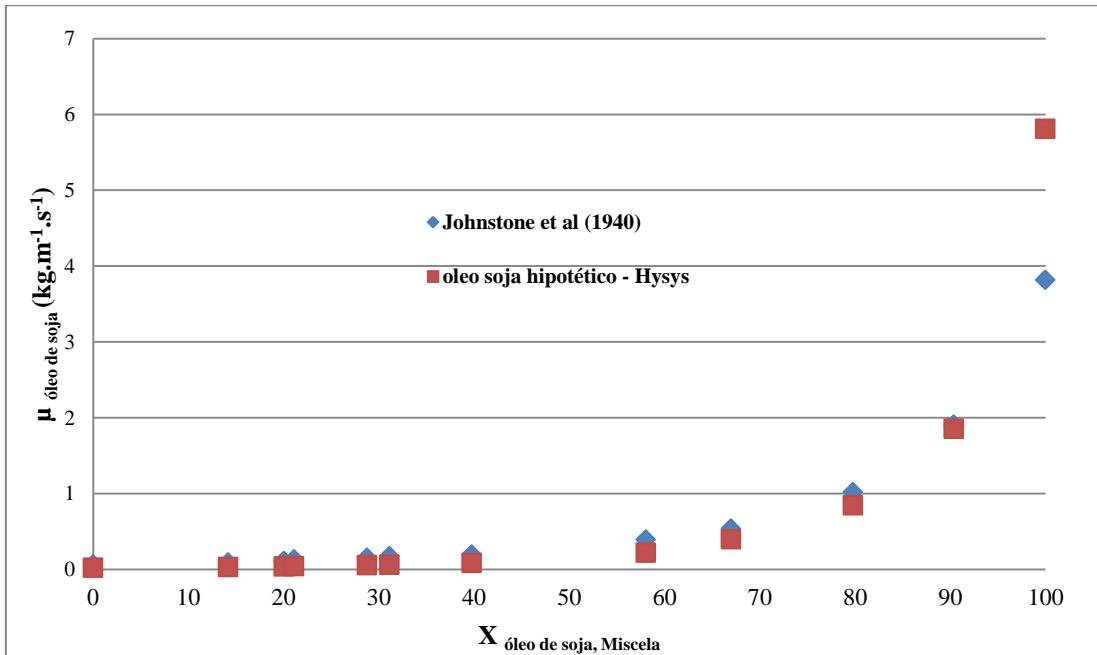


Figura 4.8 Comportamento da viscosidade dinâmica na miscela a 37,8°C formada por óleo de soja hipotético simulado no HYSYS dos resultados da literatura.

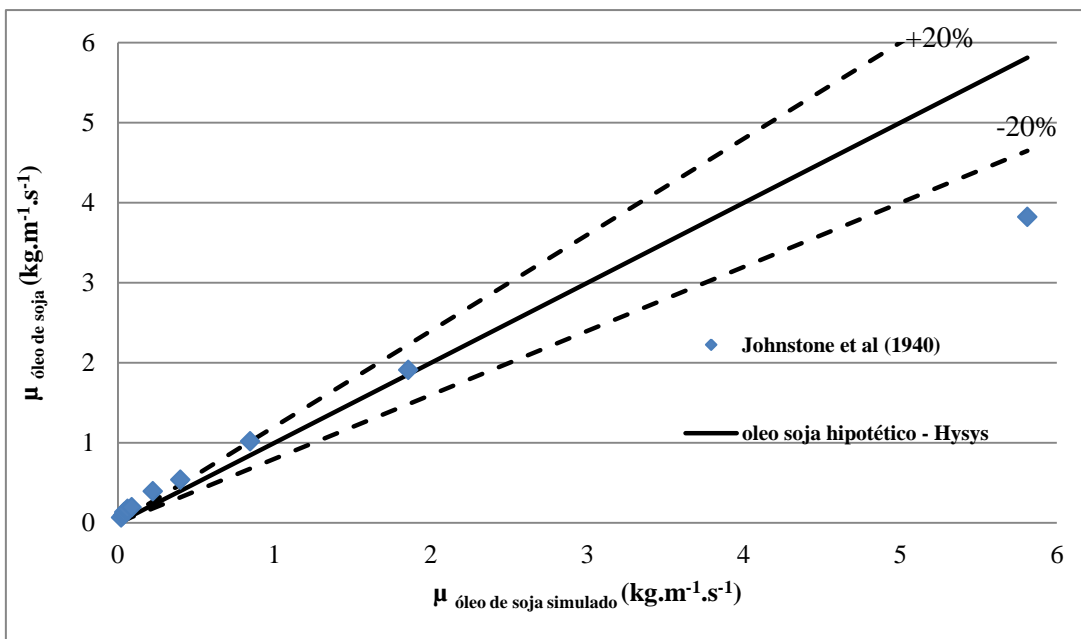


Figura 4.9 Comparação da viscosidade dinâmica na miscela formada por óleo de soja hipotético simulado no HYSYS com resultados da literatura, a 37,8°C.

4.4 Conclusões parciais

Como conclusão parcial dos resultados obtidos apresentam-se coerentes com os valores obtidos experimentalmente na literatura, infere-se que a miscela hipotética, modelada utilizando o *HYSYS*, pode ser utilizada com segurança na modelagem e simulação dos equipamentos que constituem o processo de destilação da miscela, referindo-se as colunas economizadoras, evaporadores e coluna *stripper*.

As propriedades físicas da miscela hipotética modelada, utilizando o *HYSYS*, a partir do óleo de soja hipotético e o solvente hexano, apresentaram uma ótima concordância com relação aos dados experimentais encontrados na literatura para os valores de quociente do produto da densidade mássica e viscosidade dinâmica, originando um desvio padrão menor que 20%, no intervalo de concentração do óleo de soja na miscela de 0% a 100%.

5. Modelagem, simulação e análise do sistema de evaporação de miscela do processo de destilação da COCAMAR

5.1.Introdução

A destilação da miscela é juntamente a extração do óleo de soja, a principal etapa em um processo de extração de óleo, sendo de fundamental importância uma eficiente extração de óleo de soja, com o maior percentual de óleo extraído e uma ótima concentração da miscela, originando uma boa recuperação do solvente hexano, com um baixo consumo de vapor de água.

O processo de destilação da miscela e recuperação do solvente, se inicia na saída da miscela do extrator, desde o momento em que a miscela é transportada, por bomba centrífuga ou gravidade até um tanque pulmão desta mistura (óleo de soja + hexano), constituída a miscela (DEMARCO, 2009).

O processo de evaporação é uma das principais etapas consumidora de grande quantidade de energia e a possibilidade de economizá-la deve ser sempre um fator relevante para uma análise de redução dos custos industriais. O estudo visando essa economia de energia deve sempre levar em conta a quantidade de calor transferida do fluido quente para o fluido frio a ser evaporado (GONZALES *et al.*, 2010).

A operação de evaporação, inserida no processo de obtenção do óleo de soja, tem função de separar o óleo bruto do hexano. Para ocorrer esta separação a corrente de miscela passa por um evaporador onde recebe calor de uma corrente de fluido de aquecimento; ao receber este calor, a solução entra em ebulição vaporizando o hexano e se concentrando.

Entretanto, o hexano é retirado do óleo até certo valor limite de concentração, a partir do qual a temperatura de ebulição aumenta significativamente e torna-se bastante dispendioso continuar retirando todo hexano da miscela. Além disso, uma temperatura de operação muito elevada pode alterar as características físicas do óleo de soja. A seguir, a Figura 5.1, mostra o esquema geral das correntes de entrada e saída do evaporador.

A mistura no evaporador deve estar homogênea de forma que sua temperatura e composição sejam mesmas da mistura de saída, que se supõe estejam em equilíbrio com o vapor. A pressão de operação normalmente é fixada, neste caso, num determinado valor abaixo da pressão atmosférica, de maneira a se ter um determinado valor baixo para a temperatura de ebulição.

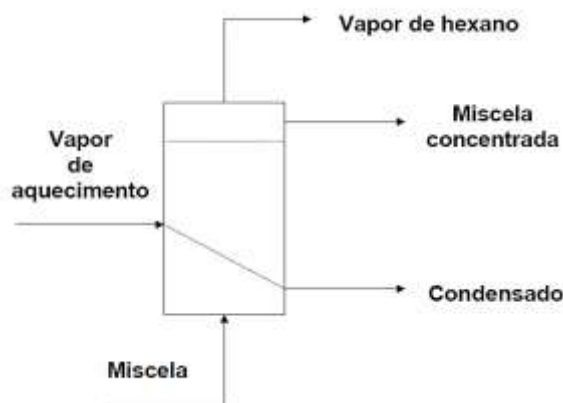


Figura 5.1 Esquema das correntes de entrada e saída do evaporador.

De acordo com FOUST (1982), em um evaporador vertical de tubos longos, estes tubos tem de 3,65 m a 6,10 m. A mistura de líquido e vapor sai pelo topo dos tubos e projeta-se contra uma chicana. A velocidade do líquido evaporado é suficiente elevada para que a chicana atue como um eficiente eliminador de espuma. De acordo com THOMAS (2003), este tipo de evaporador possui um corpo cilíndrico vertical e em sua parte inferior, existe uma câmara anular de vapor, atravessada por um

feixe de tubos abertos nas extremidades e chamados de calandras. O líquido a evaporar entra nesse compartimento e adquire um movimento ascendente ao produzirem as primeiras bolhas de vapor. As porções de líquido no fundo terão que ser substituídas por outras que descem pelo conduto central, produzindo-se uma movimentação ativa que facilita a circulação.

A Figura 5.2 mostra o esquema de um evaporador típico da concentração de miscela. De acordo com PARAISO (2001) e CUSTÓDIO (2003) esse evaporador basicamente exerce a função de um tocador de calor, no qual o vapor de aquecimento flui na parte externa dos tubos, no sentido de cima para baixo, e a miscela escoo na parte interna dos tubos, no sentido de baixo para cima. A operação é de forma contínua e a medida que a miscela vai subindo nos tubos, esta se aquece até seu ponto de ebulição vaporizando grande quantidade de hexano.

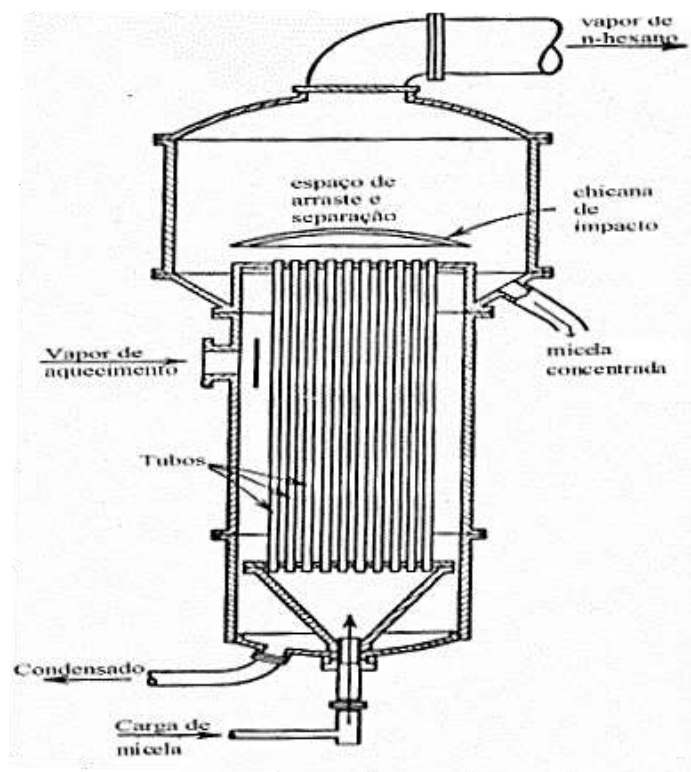


Figura 5.2 Evaporador típico da concentração de miscela.

Fonte: PARAISO *et. al.*, (2003)

No processo de destilação de óleo, parte da energia utilizada na concentração da miscela vem do aproveitamento dos vapores saturados que saem da operação de dessolventização/tostagem. O evaporador que proveita os gases quente da operação de dessolventização/tostagem, segundo THOMAS (2003) e DEMARCO (2009), pode ser

chamado de economizador e é conhecido como o primeiro estágio de evaporação. O restante da energia demandada na evaporação é proveniente do uso de vapor de água saturado, que provem da geração na caldeira. Isso ocorre mais precisamente no chamado segundo estágio de evaporação (PARAISO, 2001). A Figura 5.3 apresenta a parte interna de uma coluna evaporadora, onde ocorre a troca térmica entre o fluido de aquecimento e a mistura.



Figura 5.3 Parte interna do evaporador

Na transição da mistura, entre os evaporadores, ocorre normalmente por uma bomba, fazendo passar por um trocador de calor casco-tubo que aquece a mistura utilizando como fluido de aquecimento a corrente de gases quentes que sai do dessolventizador tostador, de baixa pressão. Após a passagem na coluna economizadora e evaporador, a mistura apresenta aproximadamente 96% de concentração de óleo.

O coeficiente global de transferência de calor, U , é um termo que normalmente se compõe de várias parcelas (PARAISO, 2001). Segundo GEANKOPLIS (1993), U é composto de uma parcela relativa ao coeficiente de condensação do lado do vapor; de uma parcela relativa à parede cuja resistência é praticamente desprezível devido à alta condutividade do metal; de uma parcela devida à resistência provocada pelas incrustações do lado do líquido; e a parcela relativa ao filme do líquido dentro dos tubos.

A determinação do coeficiente global é determinando-se cada uma das parcelas através de modelos específicos e que muitas vezes, resultam em resultados divergentes.

Isso porque dependem das propriedades da solução, do meio aquecedor e da geometria e tipo da superfície. As propriedades da solução, por sua vez, estão fixadas apenas pela especificação de cada componente e por suas concentrações, pela pressão local e pelos detalhes do movimento do fluido. Especificações semelhantes são necessárias para determinar as condições do meio de aquecimento. As condições da superfície de troca térmica incluem a limpeza, a regularidade superficial e a espessura do metal envolvido na troca térmica (PARAISO, 2001).

De acordo com BLACKADDER e NEDDEMAN (1982), uma vez que a solução está em ebulição, ela deve estar em contato com o vapor de solvente puro, e assim, não há resistência à transferência de vapor pela interface. Por tanto, a transferência de calor no interior do sistema controla o processo de evaporação completamente. Essa transferência de calor é efetuada através de uma superfície que separa o meio aquecedor e a solução que está em ebulição no evaporador. O lado da solução normalmente é construído de maneira que haja uma boa mistura na parte interna da solução, e assim a composição da solução no interior do evaporador é a mesma da corrente de saída. Um grande espaço para o vapor juntamente com alguns dispositivos, para formar uma barreira, são instalados na parte superior do evaporador para evitar o arraste da solução de óleo, pelo vapor do solvente e água.

A quantidade de calor transferida para evaporar uma determinada quantidade de solvente da solução, depende da diferença entre as temperaturas do meio aquecedor, vapor de água saturado, e a temperatura de ebulição da solução, óleo e solvente. Esta temperatura, por sua vez, depende da quantidade de moléculas do soluto na solução a qual tem sua pressão de vapor alterada, afetando assim, o seu ponto de ebulição no equilíbrio. É pertinente, na análise de um processo de evaporação correlacionar a temperatura de ebulição e a concentração do soluto na solução (PARAISO, 2001).

De acordo com PARAISO (2001), no processo de evaporação a solução é aquecida em uma determinada pressão até entrar em ebulição, vaporizando o solvente no estado puro e conseqüentemente, concentrando a solução de mistura (óleo e solvente). Nesse processo estabelece-se o equilíbrio entre as fases líquida e a de vapor. Uma vez que as fases estão em equilíbrio, as seguintes condições devem ocorrer: a temperatura da fase de vapor deve ser igual a temperatura da fase líquida; a pressão total

na fase de vapor deve ser igual a pressão total na fase líquida; o potencial químico do solvente na fase de vapor deve ser precisamente igual ao potencial químico do solvente na fase líquida. Além dessas três hipóteses, a fase de vapor é assumida formada pelo solvente puro e o valor da pressão do sistema é tal que o vapor do hexano que sai dos evaporadores podem ser considerado como um gás ideal. A partir destas hipóteses existe na literatura a descrição matemática do equilíbrio que se estabelece entre o vapor do solvente formado e a solução líquida.

SANDLER (2003), descreve um modelo do equilíbrio de fases que origina na relação entre a temperatura de ebulição da solução (T), e a concentração do solvente (x_h), demonstrado pela Equação 5.1, sendo que γ_h o coeficiente de atividade do solvente hexano presente na mistura, ΔH_v^w o calor latente de vaporização do solvente puro na temperatura de saturação T_w e na pressão, P do sistema, $c_{p,h}$ a capacidade calorífica do hexano e R a constante universal dos gases.

$$\ln(\gamma_h x_h) = \frac{\Delta H_v^w}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_w} \right) + \frac{c_{p,h}}{R} \left[1 - \frac{T_w}{T} + \ln \left(\frac{T_w}{T} \right) \right] \quad (5.1)$$

O valor de T_w , pode ser estimado através da equação de Antoine, de acordo com HIMMELBLAU (1982), representado pela Equação 5.2, em que T_w é expressa em °C e P em mmHg. O desenvolvimento do equilíbrio de fases por PARAISO (2001) se desenvolveu a partir do delineamento das Equações 5.1 e 5.2.

$$T_w = \frac{2697,55}{15,8366 - \ln p} - 224,52 \quad (5.2)$$

O objetivo deste capítulo foi desenvolver a modelagem em regime permanente, realizando a simulação e analisando a operação de concentração da mistura de óleo de soja em evaporadores utilizando o simulador *HYSYS*, validando o modelo desenvolvido através de dados reais de processo, comparando os resultados com os valores obtidos no processo real de concentração da mistura e com um modelo matemático baseado nos balanços de massa e de energia do processo de obtenção de óleo bruto de soja.

5.2. Modelagem do sistema de evaporadores de destilação da miscela da COCAMAR

5.2.1. Características do processo de destilação da miscela na COCAMAR

Na Figura 5.4 conseguimos observar um esquema, de maneira simplificada, da configuração dos equipamentos da etapa do processo de evaporação, durante a concentração da miscela, na COCAMAR, onde uma corrente oriunda do dessolventizador/tostador (DT) que entra no primeiro evaporador (economizador) ou primeiro estágio de evaporação (1º evaporador). Esta corrente quente é composta por vapores de hexano e água, fornecendo a energia para a concentração da miscela no 1º evaporador. Na parte superior da coluna, sai a corrente com a miscela concentrada, que é bombeada para o segundo evaporador ou segundo estágio de evaporação (2º evaporador) e a corrente que sai do topo do evaporador é composta por hexano puro, que é transferido para o condensador. A corrente de miscela concentrada proveniente do primeiro evaporador é concentrada novamente no segundo evaporador, utilizando a mesma corrente de aquecimento do primeiro evaporador. Na parte superior da coluna, sai a corrente com a miscela concentrada, que é bombeada para o terceiro evaporador ou terceiro estágio de evaporação (3º evaporador) e a corrente que sai do topo do evaporador é composta por hexano puro, que é transferido para o condensador. A corrente de miscela concentrada proveniente do 2º evaporador é concentrada novamente no 3º evaporador, utilizando como fluido de aquecimento o vapor indireto de água. A miscela concentrada que sai da base do 3º evaporador é bombeada para a coluna stripper, onde ocorre a retirada total do hexano e os vapores de hexano puro que saem no topo da coluna são transferidos para o condensador, enquanto que o óleo sem a presença de solvente é encaminhado para a etapa de degomagem. Os dados do processo e evaporados da COCAMAR, encontram-se na Tabela 5.1.

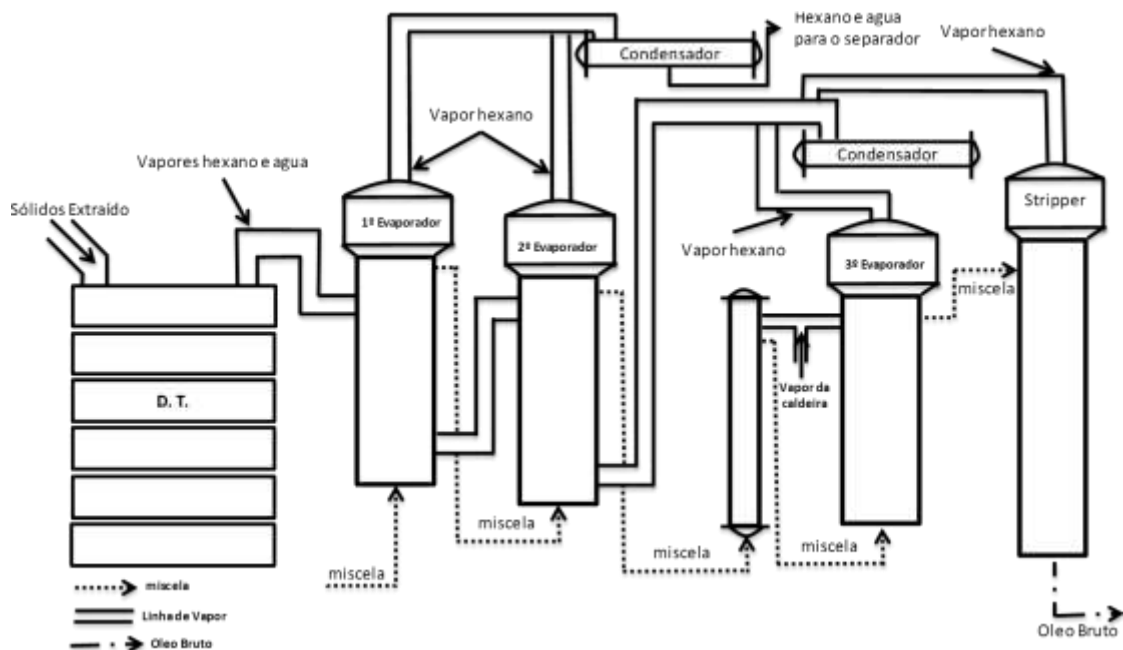


Figura 5.4 Visão do processo de concentração (destilação) da micela na COCAMAR.

Tabela 5.1 Parâmetros operacionais da COCAMAR como referencia na simulação.

Descrição	1º Evap.	2º Evap.	3º Evap.
Vazão Mássica da Miscela na entrada (Kg/h)	87.190	-	-
Fração mássica do óleo na entrada (%)	23,5	-	-
Vazão mássica do Hexano na saída (Kg/h)	53.040	-	-
Temperatura da Miscela, na entrada (°C)	58	60	110
Temperatura corrente de aquecimento (°C)	80	75	180
Pressão de Operação (mmHg)	520	520	520
Área de troca térmica (m ²)	1066	350	266
Número de Tubos	677	915	556
Comprimento dos tubos (m)	10	5	6

5.2.2. Modelagem do sistema de evaporação da micela no HYSYS

Como metodologia utilizada, foram utilizados os blocos de simulação, disponíveis no *software* HYSYS, realizando a emulação de um evaporador pela associação de um bloco de trocador de calor a um bloco de vaso de separação “flash”, uma vez que não há um bloco específico que simbolize um evaporador no simulador. De acordo com FOUST *et al.* (1982), um evaporador em sua forma básica é constituído por um trocador de calor, capaz de elevar a temperatura da solução até o ponto de ebulição e um dispositivo para separar a fase vapor do líquido em ebulição. Esse conceito foi utilizado por CHAWANKUL *et al.* (2001) para a concentração de suco de

laranja, por JORGE *et al.* (2010) para a concentração de caldo de cana de açúcar, no simulador *HYSYS*, sendo que este software, foi adotado neste trabalho.

Utilizando as referencias, descrita no paragrafo anterior, desenvolveu-se o modelo do sistema de evaporação da COCAMAR, no *HYSYS*, representando cada um dos três evaporadores pela associação de um trocador de calor multitubular (trocador de calor) e um vaso flash (separador flash), conforme pode ser observado na Figura 5.5 em que o trocador de calor representa a calandra do evaporador e para fins de simulação admitiu-se um passo no casco e um passo nos tubos, orientação vertical, espaçamento máximo entre os espelhos e classificação A-E-L conforme as normas apresentadas por TEMA (1998). O separador “*flash*” foi admitido como adiabático e teve a função de separar as fases provenientes da corrente miscela quente, que sai do trocador de calor em: hexano evaporador e miscela evaporador.

Como parâmetro deixado a ser estimado pelo *HYSYS*, o coeficiente global de troca térmica, foi necessário realizar duas rotinas de convergência na simulação, impondo a concentração de hexano nas correntes inferiores de cada saída dos separadores 1, 2 e 3, ajustando de maneira interativa a temperatura da entrada da miscela aquecida em cada vaso separador. Os dados operacionais da COCAMAR utilizados como base de referencia para a simulação, foram obtidos no próprio processo real, onde os mesmo estão apresentados na Tabela 5.1. Para a simulação do equilíbrio de fases e previsão do coeficiente de atividade utilizou-se o modelo termodinâmico NRTL para a solução na fase líquida e o modelo de Peng-Robinson para a solução na fase gasosa.

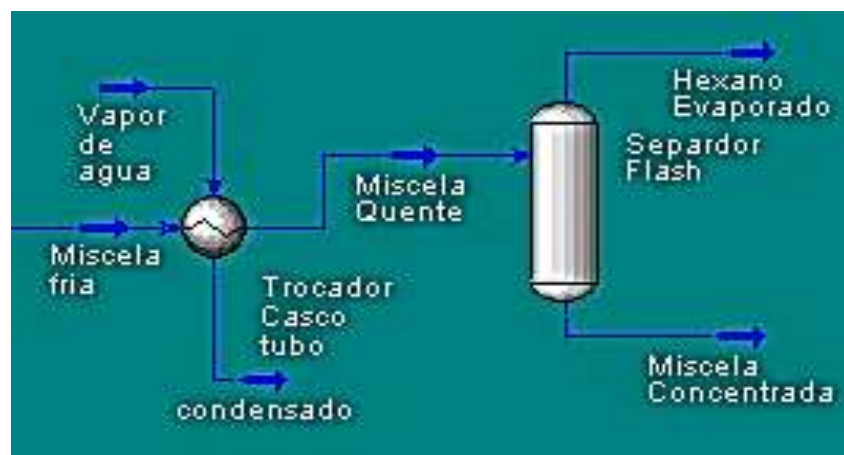


Figura 5.5 Evaporadores representados no HYSYS

No HYSYS, o coeficiente global de transferência de calor é calculado utilizando a média logarítmica da diferença de temperatura (Equação 5.3) nas correntes, dos vapores de aquecimento e mistelas, de cada trocador de calor. Diferentemente de valores para esse parâmetro apresentados na literatura, os quais representam um coeficiente global definido por meio da diferença de temperatura entre o vapor de aquecimento e a miscela no interior do evaporador (Equação 5.4).

$$\Delta T_{LMTD} = \frac{\Delta T_{entrada} - \Delta T_{saida}}{\ln \frac{\Delta T_{entrada}}{\Delta T_{saida}}} \quad (5.3)$$

$$\Delta T = T_{vapor\ aquecimento} - T_{solução} \quad (5.4)$$

Desta forma, as equações para o cálculo da quantidade de calor trocado no HYSYS (Equação 5.5) e para cada evaporador (Equação 5.6) tem forças motrizes distintas, conduzindo a valores distintos de coeficientes globais de transferência de calor.

$$q_{trocador\ de\ calor} = U_{LMDT} A \Delta T_{LMTD} \quad (5.5)$$

$$q_{evaporador} = U A \Delta T \quad (5.6)$$

Considerando que as quantidades de energia obtidas com o uso das Equações 5.5 e 5.6 são aproximadamente iguais, foi obtida a Equação 5.7 para conversão dos coeficientes globais de transferência de calor obtidos nas simulações no *software* HYSYS e possibilitando a comparação com os resultados da literatura.

$$U = U_{LMTD} \frac{\Delta T_{LMTD}}{\Delta T} \quad (5.7)$$

5.2.3. Modelagem convencional do modelo do sistema de evaporação de miscela

De acordo com PROST *et al.* (2006), bem sabe-se que as equações de balanço de massa e energia e a equação da taxa de transferência de calor entre a corrente quente (vapor de aquecimento em condensação) e fria (miscela na alimentação) governam o processo de evaporação. Para se avaliar a qualidade do modelo de evaporação da

miscela, desenvolvido no *HYSYS*, um modelo convencional foi desenvolvido com as equações do balanço de massa (Equações 5.14 e 5.15) e balanço de energia (Equações 5.16 e 5.17), que foram simultaneamente resolvidas para o evaporador *i*, com as Equações auxiliares 5.18 a 5.22. O coeficiente global de transferência de calor (*U*) foi estimado da Equação 5.23.

Balanço de massa no evaporador para o componente óleo de soja

$$F_e^i x_{o,e}^i = F_s^i x_{o,s}^i \quad (5.8)$$

Sendo,

F: fluxo mássico do fluido, em Kg/h;

X_o: fração mássica de miscela, em %;

Entalpia de vaporização na corrente de vapor gerada

$$h_{fgV}^i = h_{F,S}^i - h_V^i \quad (5.9)$$

Sendo,

V: vapor do topo da coluna;

S: Fluido de aquecimento;

Entalpia de vaporização na corrente de aquecimento

$$h_{fgS}^i = h_S^i - h_C^i \quad (5.10)$$

Energia trocada através da corrente de miscela alimentada

$$h_{F,S}^i - h_{F,e}^i = C_{Pm} (T_{F,S}^i - T_{F,e}^i) \quad (5.11)$$

Realizando o balanço de energia, na corrente de miscela (óleo+hexano)

$$F_e^i h_{F,e}^i + Q^i = V^i h_V^i + F_s^i h_{F,S}^i \quad (5.12)$$

Realizando o balanço de energia, na corrente do fluido de aquecimento, das colunas evaporadoras.

$$S^i h_S^i + Q^i = C^i h_C^i \quad (5.13)$$

Para o balanço de massa na corrente de miscela alimentada, temos a seguinte equação:

$$F_S^i = F_e^i - V^i \quad (5.14)$$

Utilizando as equações 5.8 e 5.14, desenvolvendo as mesmas e considerando que a fração mássica de óleo (x_o), resulta na equação 5.15, demonstrada abaixo:

$$V^i = F_e^i (1 - x_{o,s}^i / x_{o,e}^i) \quad (5.15)$$

Utilizando as equações 5.9 a 5.13, reorganizando as mesmas, origina na equação 5.16, demonstrada abaixo:

$$S^i = \frac{F_e^i [C_{pm}(T_{F,s}^i - T_{F,e}^i)] + V^i h_{fgV}^i}{h_{fgS}^i} \quad (5.16)$$

A energia trocada, através do calor latente, entre o fluido de aquecimento e a miscela (óleo+hexano) é representada pela Equação 5.17.

$$Q^i = S^i h_{fgS}^i \quad (5.17)$$

Nas equações demonstradas acima, V^i, S^i, F_e^i, F_S^i , são as representações do fluxo de massa, na unidade em Kg/s, para o vapor gerado, o fluido de aquecimento, a miscela de alimentação do processo de destilação e a miscela concentrada na saída do processo de destilação, respectivamente, no evaporador i. A taxa de energia consumida no evaporador i é representada por Q^i , na unidade em W. A concentração de óleo na miscela no evaporador i é representada por $x_{o,e}^i$ e $x_{o,s}^i$, na unidade em Kg de óleo/Kg de miscela. As temperaturas das misturas no evaporador i são representadas por T_e^i e T_s^i , na unidade em °C. As entalpias de vaporização da corrente de aquecimento e da corrente de vapor gerada no evaporador i são representadas por h_{fgS}^i e h_{fgV}^i , respectivamente, na unidade de J/Kg. De forma geral, a simbologia e e s, indicam as variáveis de entrada e saída de um determinado evaporador i.

Utilizando o ajuste polinomial ($R^2=1$), referentes aos dados da tabela de vapor de água, na faixa de $0,4 \times 10^4 \text{ Pa} \leq P \leq 3,4 \times 10^5 \text{ Pa}$ (PERRY e CHILTON 1980), em que P_i é a pressão absoluta (Pa), obtém-se a Equação 5.18. Através do ajuste polinomial dos dados gerados no simulador HYSYS, para o componente puro hexano, no intervalo de $0 \text{ °C} \leq T \leq 150 \text{ °C}$ ($R^2=0,9999$), obtém-se a Equação 5.19, demonstrada abaixo.

As entalpias de vaporização, obtidas estão representadas abaixo.

$$h_{fg,água} = -4,709 * 10^{-12}P_i^3 + 3,941 * 10^{-6}P_i^2 - 1,435P_i + 2,369 * 10^6 \quad (5.18)$$

$$h_{fg,h} = (0,0027(T_s + 273,15)^2 + 0,0265(T_s + 273,15) + 70,785) * 1000 \quad (5.19)$$

Para os evaporadores 1 e 2 ($i = 1$ e 2), o fluido de aquecimento é composto de vapores de água e hexano, a umas proporção mássica de 9% de água e 91% de solvente (hexano). Na quantificação da entalpia da corrente de aquecimento, dos evaporadores 1 e 2, foram utilizadas essas proporções, com relação a massa, na adição das Equações 5.18 e 5.19.

A capacidade calorífica média da miscela foi obtido, de acordo com a Equação 5.20, realizando a média ponderada da composição de hexano + óleo de soja, na miscela de alimentação da etapa de destilação, considerando a capacidade calorífica do óleo puro (Equação 3.2) e a do solvente hexano puro (Equação 5.21). Na utilização da Equação 3.2, foi necessário multiplicar a mesma por 10000, para realizar a equivalência de unidade no modelo, cuja unidade é J/Kg. A Equação 5.16 foi obtida utilizando o ajuste polinomial de dados simulados no *software HYSYS* ($R^2=1$) para $0 \leq T \leq 66^\circ\text{C}$.

$$C_{pm,miscela} = C_{po}(x_{o,e}) \times C_{ph}(1 - x_{o,e}) \quad (5.20)$$

$$C_{ph} = 5,0485 \times T_m + 2120 \quad (5.21)$$

Na utilização das Equações 3.2 e 5.21, foi utilizada a temperatura média (T_m), da miscela (óleo + solvente), na entrada e saída do evaporador i , sendo representada abaixo, pela Equação 5.22.

$$T_m = \frac{T_e^i + T_s^i}{2} \quad (5.22)$$

As temperaturas de entrada e saída, respectivamente T_e e T_s , foram coletadas diretamente do processo de destilação.

O coeficiente global de transferência de calor, dado pela Equação 5.23, em que U^i é o coeficiente global de transferência de calor, representada pela unidade de $\frac{W}{m^2 \cdot ^\circ\text{C}}$, para cada evaporador i . A diferença média logarítmica das temperaturas, dos gases

quentes e mistelas são representados por $LMDT^i$, com a unidade de °C. A área externa do tubo em cada evaporador i é representada por A_{ext}^i , na unidade de m^2 .

$$U_{LMDT}^i = \frac{Q^i}{A_{ext}^i \times \Delta T_{LMDT}^i} \quad (5.23)$$

O modelo matemático, demonstrado pelas Equações 5.3 a 5.18, foi sequencialmente resolvido em uma planilha eletrônica para os três evaporadores verticais de tubo longos do processo de destilação da miscela da COCAMAR.

5.3. Resultados e discussões parciais

5.3.1. Modelagem do sistema de evaporadores da Cocamar, na destilação da miscela, utilizando o HYSYS

Na Figura 5.6, está representado o modelo do sistema de evaporação implantado no *software HYSYS*. A união entre as correntes de óleo bruto e hexano, no misturador, é uma etapa fictícia, haja vista que a miscela já vem formada a partir do equipamento extrator, sendo armazenada em um tanque pulmão, antes de ser transportada para a primeira coluna evaporadora. A união dos modelos representados por trocador de calor 1, nomeado como *evap. 01* e separador 1, nomeado como *sep.01*, constituem o modelo do primeiro evaporador na etapa de destilação, na concentração da miscela. O segundo evaporador do processo é formado pela união do trocador de calor 2, nomeado como *evap. 02* e o separador *flash 02*, nomeado como *sep.02*. O terceiro evaporador do processo é formado pela união do trocador de calor 3, nomeado como *evap. 03* e o separador *flash 03*, nomeado como *sep. 03*. Na parte inferior da figura 5.6, observa-se quatro losangos com letra A, no centro interno, representando a ferramenta que tem a função de *Adjust*, do *HYSYS*, que é uma rotina de interação para convergência do modelo proposto.

A função *Adjust*, localizada na saída de corrente do misturador, impõe a concentração do óleo de soja na entrada do primeiro evaporador (valor coletado no processo industrial), através do ajuste da temperatura da corrente de solvente hexano que passou pelo misturador. A função *Adjust* localizada no primeiro separador flash 01 (*Sep. 01*) impõe a concentração do solvente hexano na saída do primeiro evaporador

(valor coletado no processo industrial), através do ajuste da temperatura da corrente de miscela que passou pelo trocador de calor 01 (Evap. 01). A função *Adjust* localizada no primeiro separador flash 02 (Sep. 02) impõe a concentração do solvente hexano na saída do segundo evaporador (valor coletado no processo industrial), através do ajuste da temperatura da corrente de miscela que passou pelo trocador de calor 02 (Evap. 02). A função *Adjust* localizada no primeiro separador flash 03 (Sep. 03) impõe a concentração do solvente hexano na saída do terceiro evaporador (valor coletado no processo industrial), através do ajuste da temperatura da corrente de miscela que passou pelo trocador de calor 03 (Evap. 3).

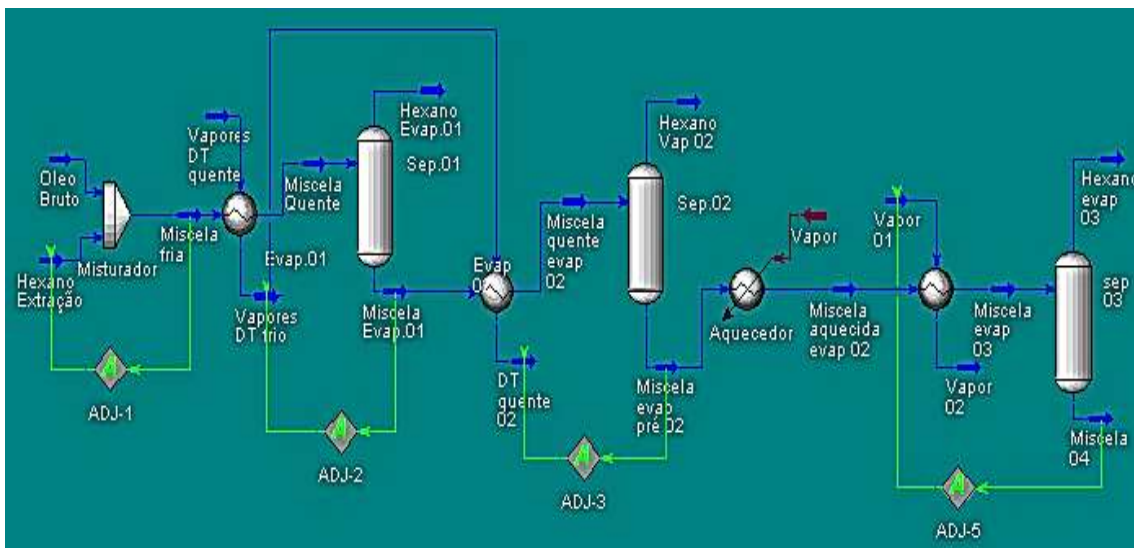


Figura 5.6 Modelagem do sistema de evaporadores da COCAMAR, na destilação da miscela, utilizando HYSYS

Analisando os dados apresentados nas Tabelas 5.2, 5.3 e 5.4 observa-se que além dos dados simulados no *HYSYS* estarem coerentes com os valores operacionais, eles também se demonstram em acordo com os valores médios propostos por DEMARCO (2009) e mais próximos da realidade que os dados obtidos por GONZALES *et al.* (2010). Quanto aos valores dos coeficientes de transferência global de calor pode-se notar que esta de acordo com a faixa de valores proposto por: Gonzales *et al.* (2010) obtiveram U iguais a $171,8 \text{ kcal/m}^2 \cdot \text{h} \cdot \text{C}$ e Neto (2012) obteve U igual a $232 \text{ kcal/m}^2 \cdot \text{h} \cdot \text{C}$ para o primeiro evaporador. Para estas mesmas referencias obtiveram respectivamente $842,0 \text{ kcal/m}^2 \cdot \text{h} \cdot \text{C}$ e $1090 \text{ kcal/m}^2 \cdot \text{h} \cdot \text{C}$, para o segundo evaporador respectivamente. Para o segundo evaporador, McCabe e Smith (1976) o valor de U nesse tipo de evaporador que é de $749\text{-}2513 \text{ kcal/m}^2 \cdot \text{h} \cdot \text{C}$, mostrando a coerência dos valores para este parâmetro obtido neste trabalho com estes autores.

DEMARCO (2009), resume parâmetros médios operacionais de refinaria de óleo de soja apresentando que a temperatura de saída da miscela do primeiro evaporador é de 50,90°C e no segundo evaporador, esta no intervalo de $95^{\circ}\text{C} \leq T \leq 110^{\circ}\text{C}$. A temperatura do vapor de aquecimento na saída do primeiro evaporador é de 62°C. As concentrações de saída de óleo no primeiro evaporador são de 55% a 65% e no segundo evaporador é de 97%. GONZALES *et al.* (2010), realizaram a simulação do processo de evaporação da miscela em uma cooperativa do Paraná, através do desenvolvimento de equações de balanço de massa, energia e equilíbrio líquido-vapor e obtiveram que a temperatura de saída da miscela e a concentração de óleo nessa corrente para o primeiro evaporador foram de 52,70°C e 69,80% e para o segundo evaporador foram de 128°C e 93,96%.

Os resultados obtidos na simulação, utilizando as condições operacionais da Tabela 5.1, foram comparados com os dados do processo industrial da COCAMAR, cujos resultados e desvios percentuais em relação às medidas no processo, encontram-se nas Tabelas 5.2, 5.3 e 5.4, para o 1º, 2º e 3º evaporador, respectivamente.

Tabela 5.2 Avaliação do *HYSYS*, frente as medidas operacionais do 1º Evaporador.

<i>Variáveis</i>	<i>1º Evaporador</i>		
	COCAMAR	HYSYS	Desvio
Vazão mássica da miscela na saída (Kg/h)	34.150	34.150	0%
Fração mássica de óleo na saída (%)	60	60	0%
Temperatura da miscela na saída (°C)	61	61,99	1,62%
Vazão do fluido de aquecimento (Kg/h)	-	34.870	-
Coef. de transferência de calor (Kcal/h.m ² .°C)	-	282,99	-

Tabela 5.3 Avaliação das previsões do *HYSYS*, frente às medidas operacionais do 2º Evaporador.

<i>Variáveis</i>	<i>2º Evaporador</i>		
	COCAMAR	HYSYS	Desvio
Vazão mássica da miscela na entrada (Kg/h)	34.150	34.150	0%
Vazão mássica da miscela na saída (Kg/h)	31.510	31.520	0,03%
Vazão mássica do Hexano na saída (Kg/h)	2.640	2.627	0,49%
Fração mássica do óleo na entrada (%)	60	60	0%
Fração mássica de óleo na saída (%)	65	65	0%
Temperatura da miscela na saída (°C)	59	58,43	0,97%
Vazão do fluido de aquecimento (Kg/h)	-	34.870	-
Coef. de transferência de calor (Kcal/h.m ² .°C)	-	35,60	-

Tabela 5.4 Avaliação das previsões do *HYSYS*, frente às medidas operacionais do 3º Evaporador.

<i>Variáveis</i>	<i>3º Evaporador</i>		
	COCAMAR	HYSYS	Desvio
Vazão mássica da miscela na entrada (Kg/h)	31.510	31.520	0,03%
Vazão mássica da miscela na saída (Kg/h)	21.000	21.010	0,05%
Vazão mássica do Hexano na saída (Kg/h)	10.500	10.510	0,05%
Fração mássica do óleo na entrada (%)	65	65	0%
Fração mássica de óleo na saída (%)	97,5	97,5	0%
Temperatura da miscela na saída (°C)	110	111	0,91%
Vazão do fluido de aquecimento (Kg/h)	-	2.779	-
Coef. de transferência de calor (Kcal/h.m ² .°C)	-	771,32	-

Comparando a fração mássica de óleo, observa-se que não houve desvio na concentração do óleo na miscela de saída dos três evaporadores, como podemos observar nas tabelas 2, 3 e 4. Os valores previstos por simulação foram exatamente os mesmos daqueles medidos no processo industrial.

Permanecendo constante a vazão de entrada da miscela no processo, sendo utilizada a mesma vazão na simulação no *HYSYS*, onde na entrada de miscela do segundo e terceiro evaporador houve um desvio de 0% e 0,03%, respectivamente, este desvio observado deve-se ao valor de vazão imposta para a vazão de hexano na saída do primeiro evaporador, para ocorrer à convergência no *HYSYS*. Para o hexano na saída do segundo e terceiro evaporadores, o desvio observado foi de 0,49% e 0,05%, indicando que há uma grande proximidade dos valores reais do processo industrial da COCAMAR.

Conforme apresentados nas Tabelas 5.2, 5.3 e 5.4, observa-se que os desvios entre as concentrações de óleo na saída dos evaporadores medidas no processo industrial da COCAMAR e as simuladas no *HYSYS* foram nulos. Isso ocorreu devido às valores de concentração ter sido parâmetros impostos nas rotinas de convergência adotadas no modelo.

Comparando as temperaturas na saída dos evaporadores, observa-se um desvio de -1,62%, 0,97% e 0,91% no primeiro, segundo e terceiro evaporador, respectivamente. É interessante observar que os valores dos coeficientes de transferência de calor simulado no *HYSYS*, apresentam valores distintos para os três evaporadores. O 1º evaporador apresenta o maior valor de coeficiente de transferência

de calor (282,99 Kcal/h.m².°C), enquanto que o 2º evaporador apresenta valor substancialmente inferiores, 35,60 Kcal/h.m².°C e para o 3º evaporador o valor de 771,32 Kcal/h.m².°C, correspondendo a resistências térmicas (1/U.A) de 3,31x10⁻⁶, 8,02x10⁻⁵ e 4,87x10⁻⁶ h.°C/kcal, para o 1º, 2º e 3º evaporador respectivamente, indicando que o 2º evaporador apresenta um desempenho térmico inferior ao 1º e 3º evaporador, sugerindo a necessidade de limpeza para remoção de possíveis incrustações no 2º evaporador.

Comparando as vazões de miscela e hexano e a concentração de óleo nas correntes de saída, houve um desvio pequeno, mesmo sendo todos os parâmetros dos componentes hipotéticos do óleo de soja aproximados a partir das frações dos ácidos graxos estimados pelo *HYSYS*, os resultados mostram que esse procedimento foi adequado.

5.3.2. Avaliação do modelo de evaporadores na destilação da miscela, da COCAMAR, implementado no *HYSYS*

A perspectiva do modelo implementado no *HYSYS*, com relação a variações da carga alimentada de miscela, foram bastante próximas daquelas obtidas com o modelo convencional, onde EVP 1, EVP 2 e EVP 3, demonstrada nas Figuras 5.6 e 5.7, referem-se ao primeiro, segundo e terceiro evaporador, respectivamente. As vazões das correntes do processo de evaporação, obtidas com o modelo convencional apresentaram uma diferença média, em relação aos resultados gerados no *HYSYS* (Figura 5.7) menor que 0,01% para o primeiro, segundo e terceiro evaporador. A diferença entre o coeficiente global de transferência de calor (U_{LMTD}), demonstrado pela Figura 5.8, foi de 7,39% para o primeiro evaporador, de -19,09% para o segundo evaporador e de -23,03% para o terceiro evaporador. Os desvios médios relativos aos valores estimados pelo *HYSYS*, com relação ao modelo convencional, foram de 22,90% para o primeiro evaporador, de 5,25% para o segundo evaporador e 51,72% para o terceiro evaporador. Assim, o modelo convencional e do *HYSYS*, representaram adequadamente o sistema de evaporadores de miscela da COCAMAR.

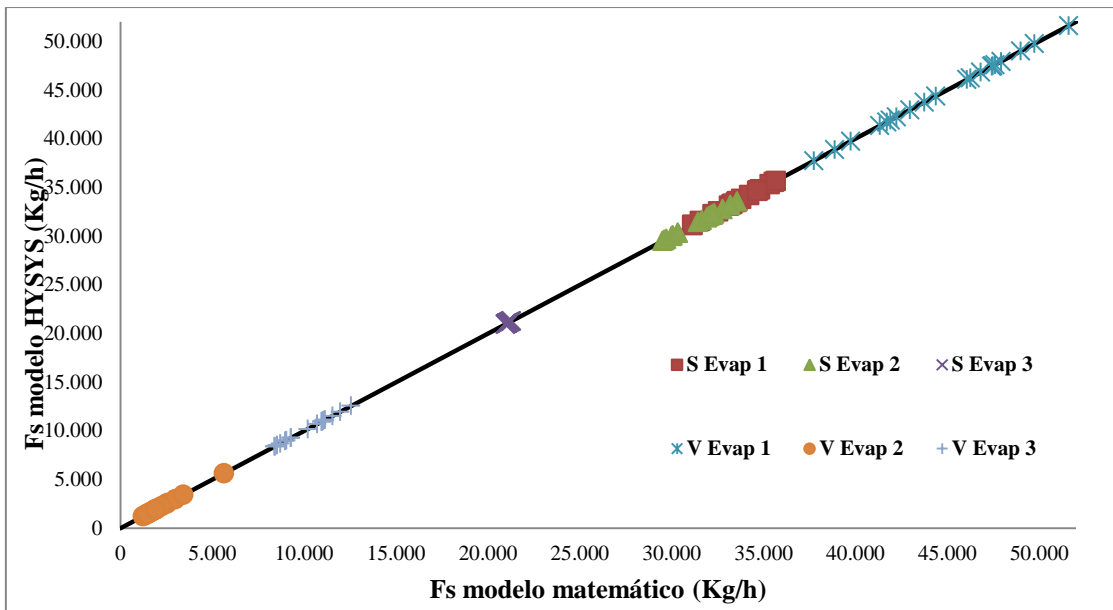
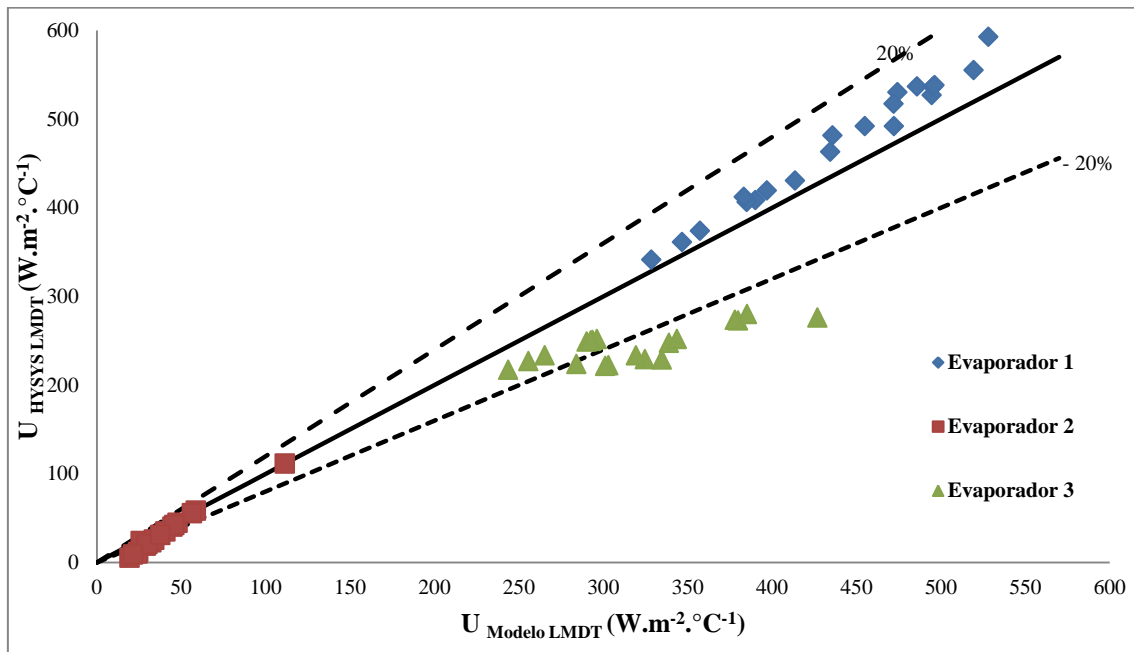


Figura 5.7 Comparação entre as vazões estimadas em cada evaporador



Figuras 5.8 Coeficiente Global de transferência de calor para cada evaporador.

Considerando a influencia da temperatura na carga de miscela alimentada em cada evaporador, observa-se que o comportamento das estimativas do modelo implementado no HYSYS em comparação ao modelo matemático é semelhante para o primeiro e segundo evaporador, como demonstrado pelas Figuras 5.9 e 5.10. Para o terceiro evaporador, demonstrado pela Figura 5.11, observa-se uma pequena variação, entre os resultados do modelo implementado no HYSYS em comparação ao modelo matemático, onde o desvio médio entre estes resultados de menor que 0,01%.

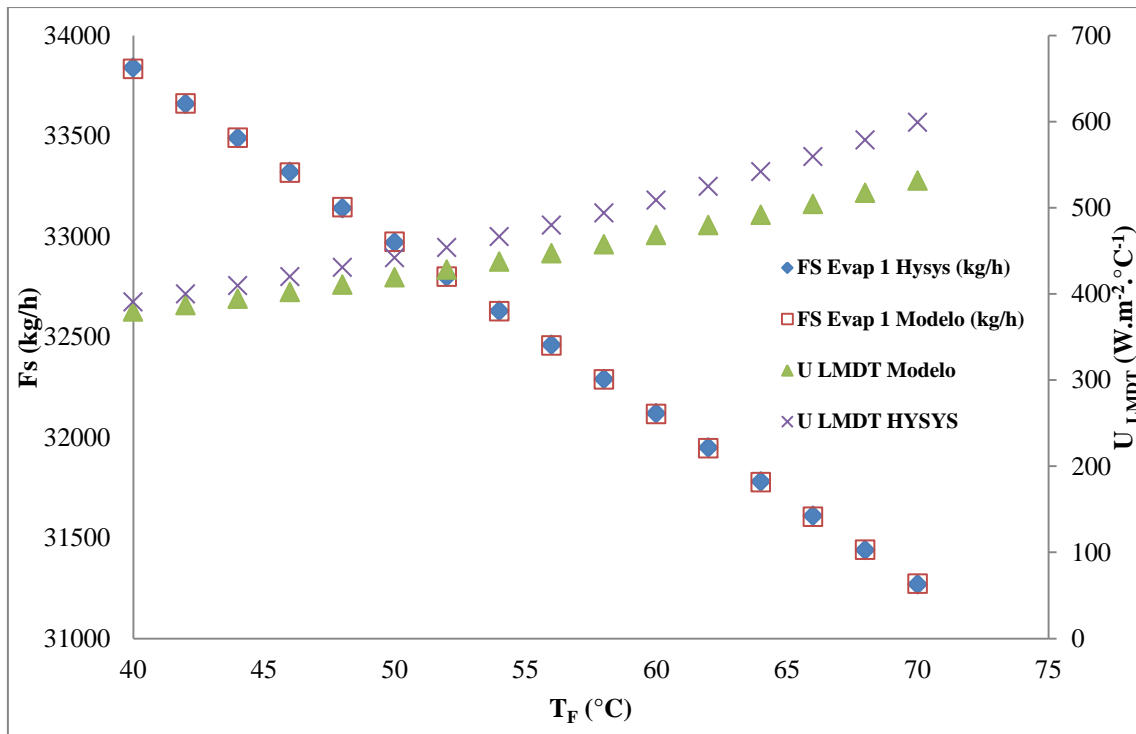


Figura 5.9 Influencia da temperatura, na miscela de saída no evaporador 1.

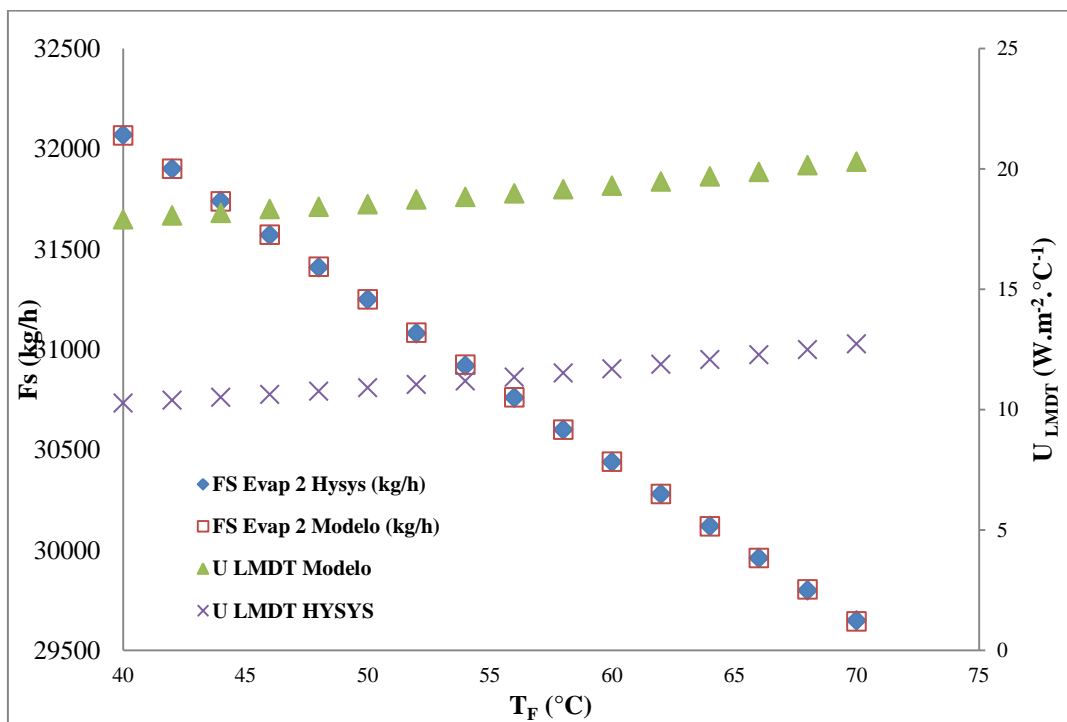


Figura 5.10 Influencia da temperatura, na miscela de saída no evaporador 2.

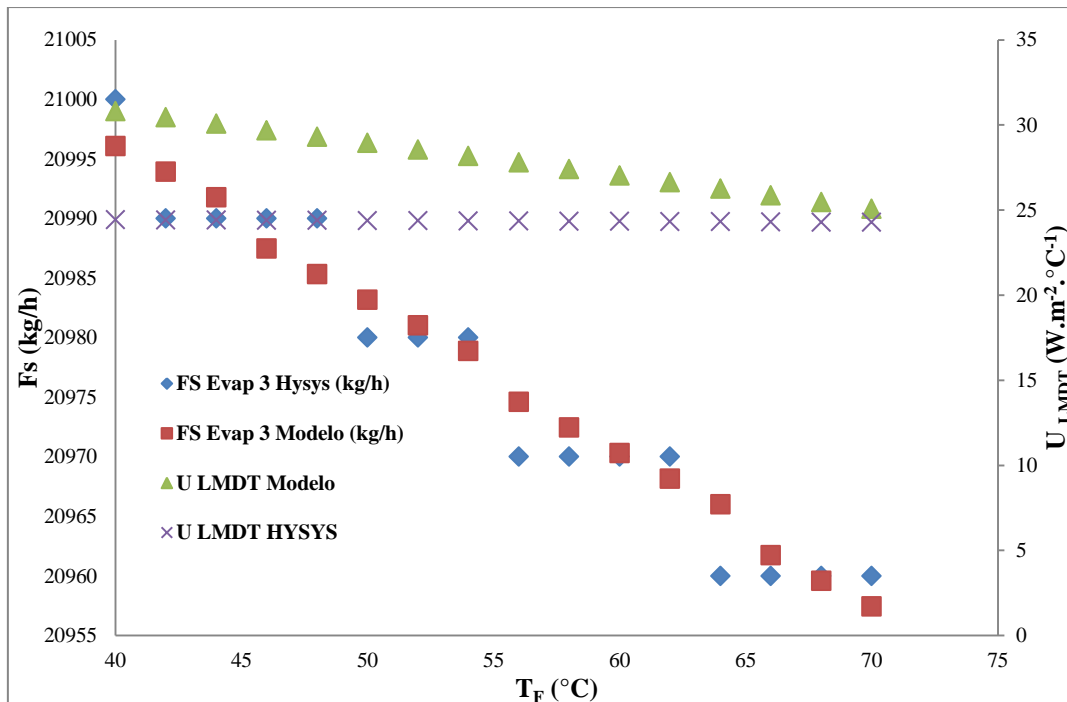


Figura 5.11 Influencia da temperatura, na miscela de saída no evaporador 3.

Nas Figuras 5.12 a 5.14 pode-se observar que para os três evaporadores analisados, que o desvio médio obtido entre a vazão do fluido de aquecimento é insignificante, sendo menor que 0,01%. Para os coeficientes globais de transferência, como podemos observar nas Figuras 5.15 a 5.17, o desvio médio obtido, entre o modelo do *HYSYS* e o modelo matemático foi de 6,88%, para o primeiro evaporador, na faixa de temperatura simulada de 40 a 70°C. Para o segundo evaporador, o desvio médio obtido, entre o modelo do *HYSYS* e o modelo matemático foi de 23,57%, na faixa de temperatura simulada de 40 a 70°C. Para o terceiro evaporador, o desvio médio obtido, entre o modelo do *HYSYS* e o modelo matemático foi de 23,03%, na faixa de temperatura simulada de 40 a 70°C.

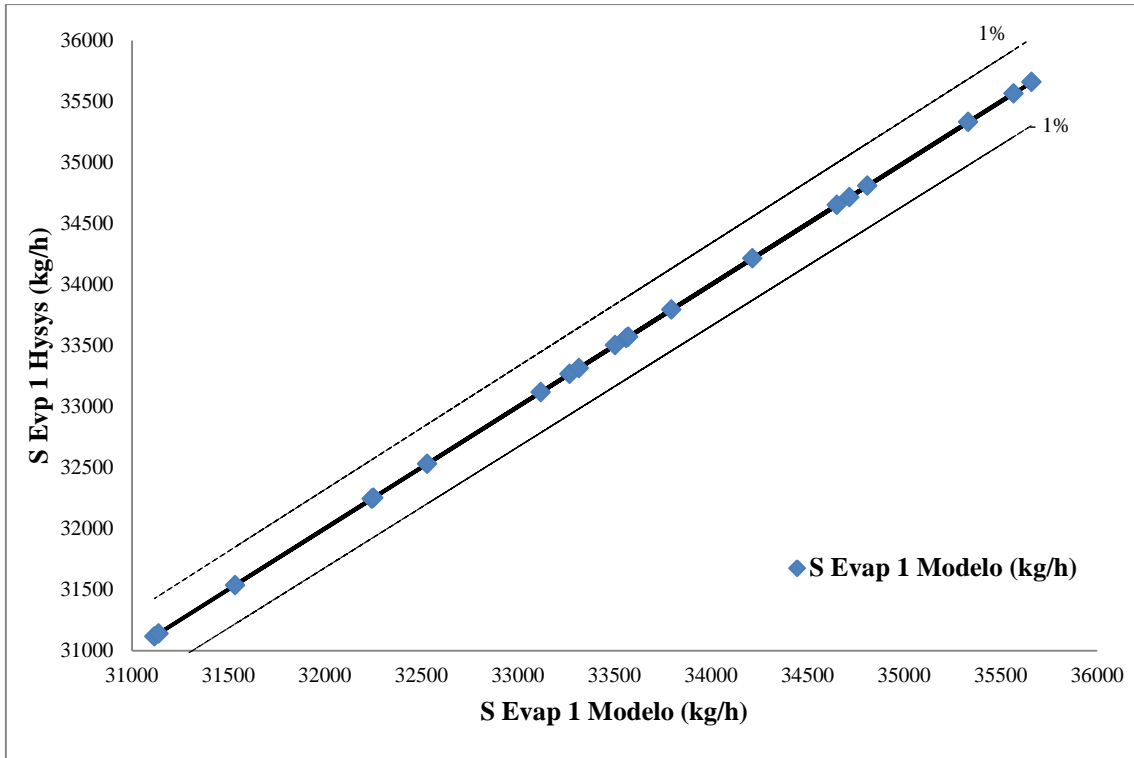


Figura 5.12 Comparação da influencia da temperatura da miscela alimentada na vazão de fluido de aquecimento no evaporador 1.

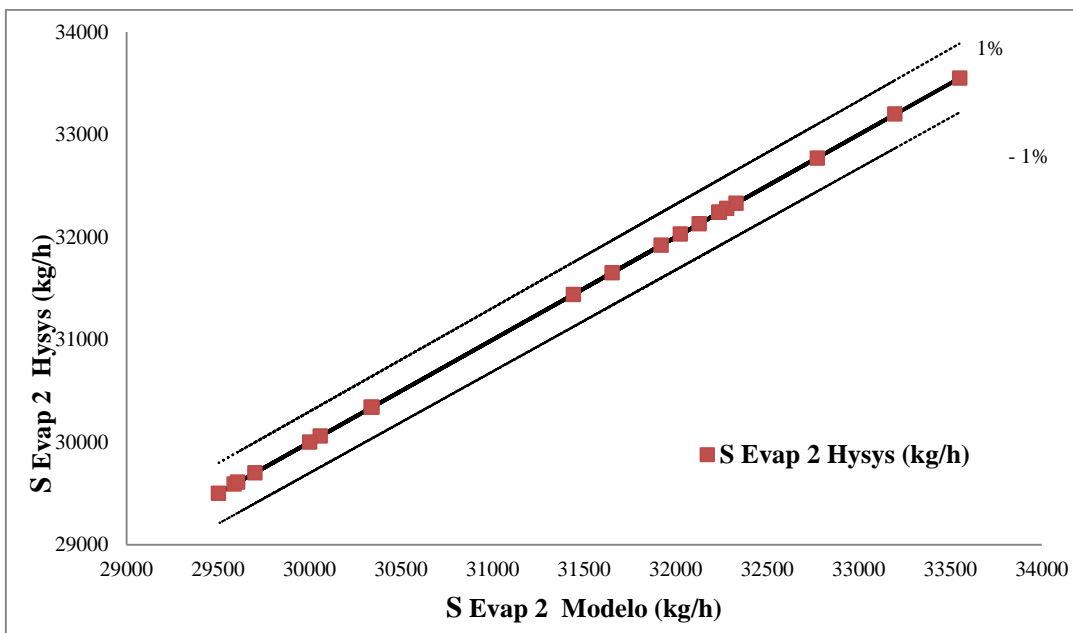


Figura 5.13 Comparação da influencia da temperatura da miscela alimentada na vazão de fluido de aquecimento no evaporador 2.

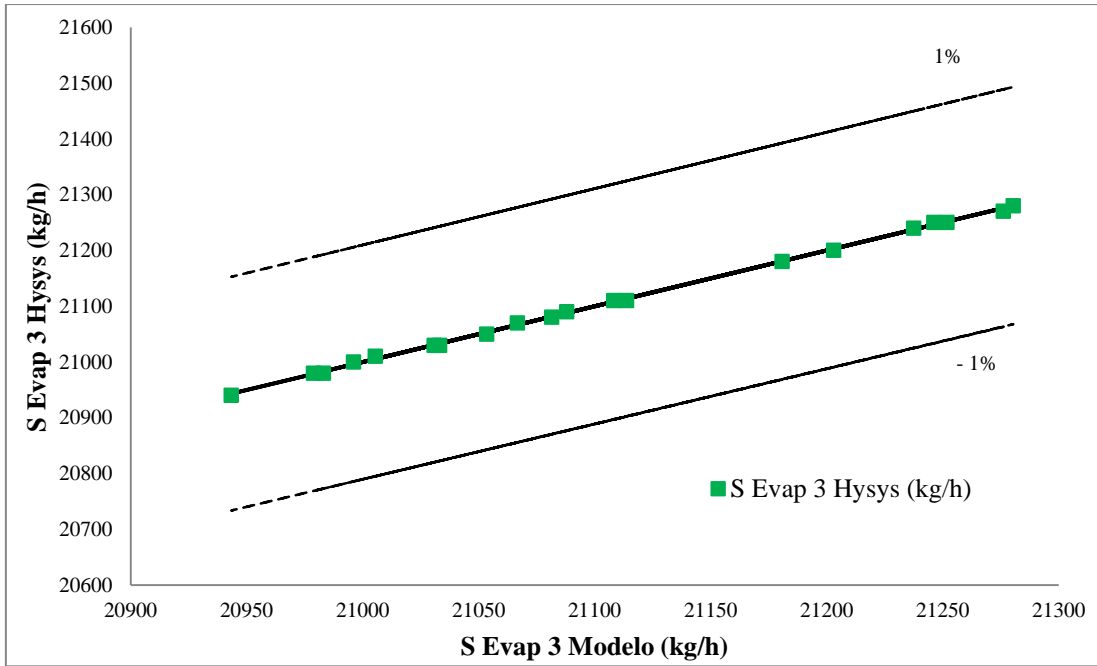


Figura 5.14 Comparação da influencia da temperatura da mistura alimentada na vazão de fluido de aquecimento no evaporador 3.

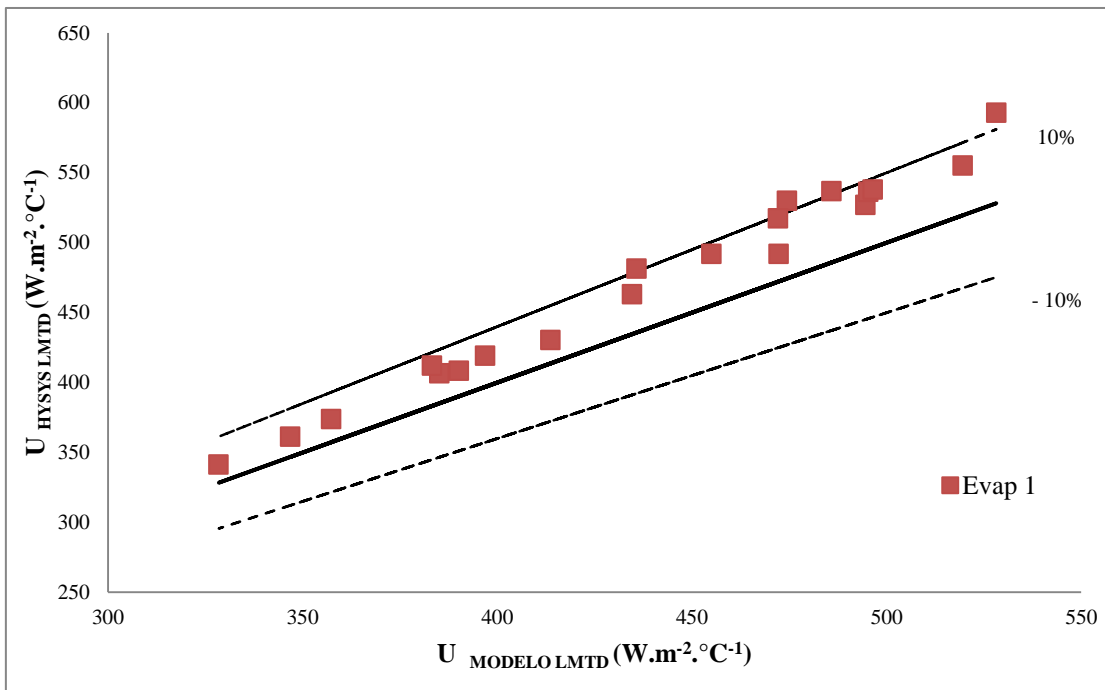


Figura 5.15 Comparação da influencia da temperatura da mistura alimentada no coeficiente global de transferência de calor no evaporador 1.

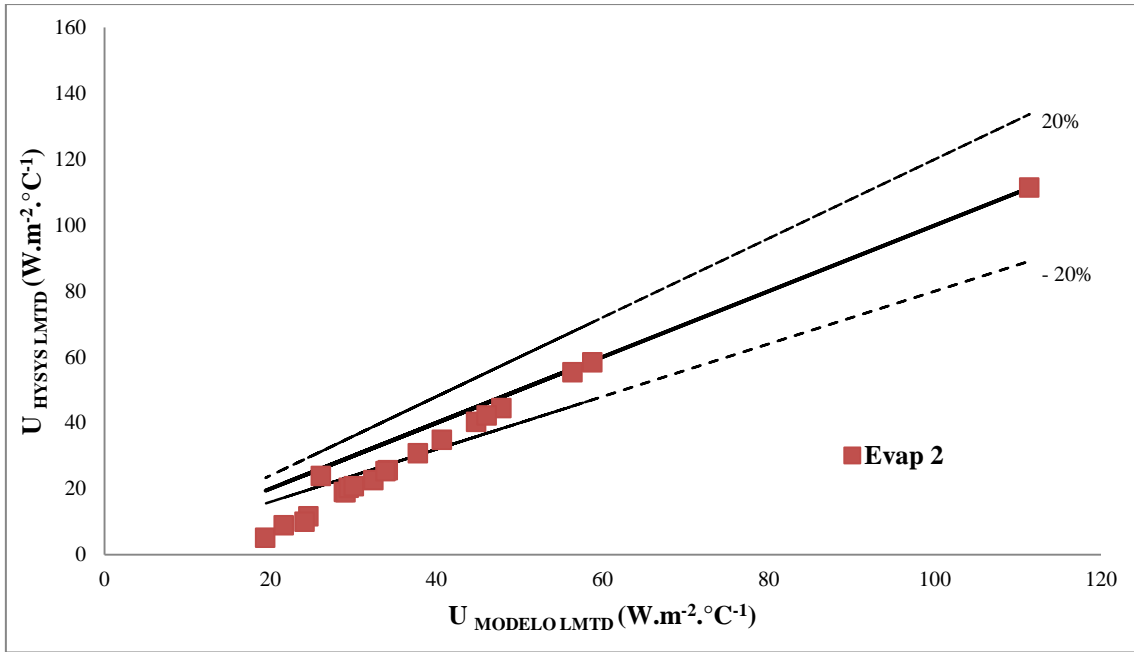


Figura 5.16 Comparação da influência da temperatura da miscela alimentada no coeficiente global de transferência de calor no evaporador 2.

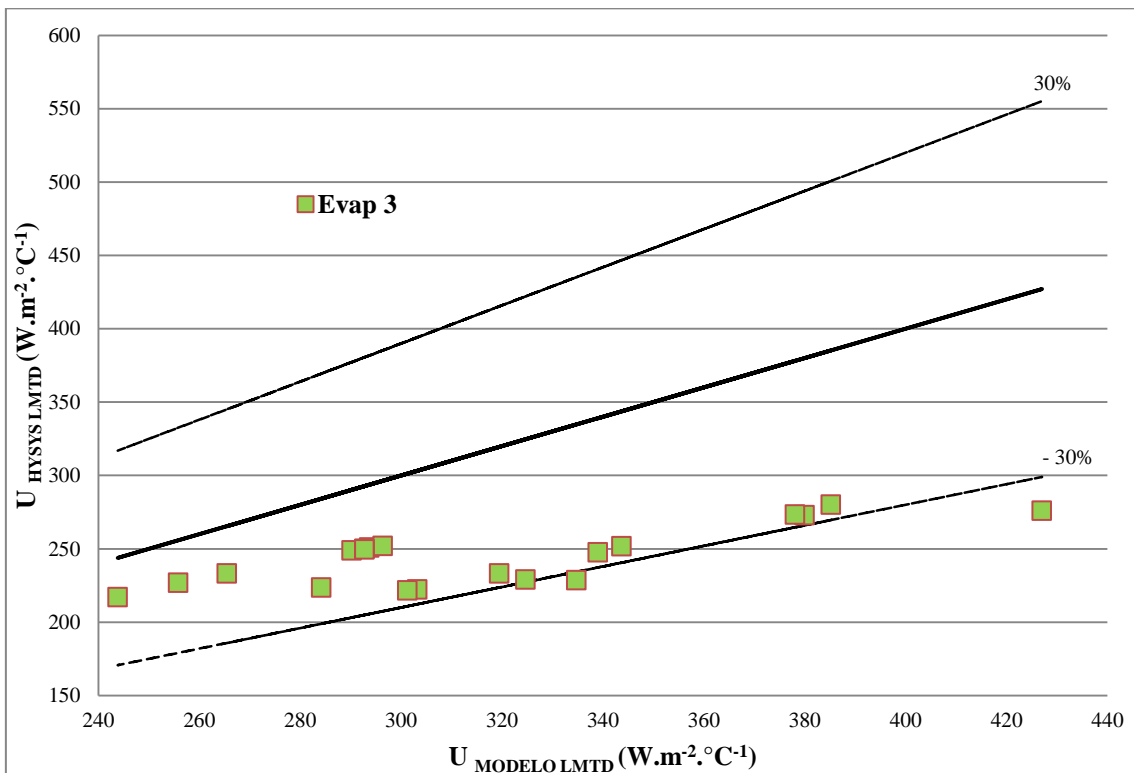


Figura 5.17 Comparação da influência da temperatura da miscela alimentada no coeficiente global de transferência de calor no evaporador 3.

5.3.3. Simulações com o modelo implementado no HYSYS

5.3.3.1. Avaliação da influencia da temperatura da miscela na entrada do sistema de evaporação

A Figura 5.18 apresenta a influencia da temperatura da miscela na entrada do sistema de evaporação sobre as vazões e frações mássicas das correntes de miscela. Realizou a simulação, com as temperaturas utilizadas no processo real, de desilação da miscela. Analisando a Figura 5.18, foi possível concluir que o modelo desenvolvido do sistema de evaporação apresentou convergência em uma faixa de temperatura de alimentação da miscela de 20°C a 70°C. Analisando as frações mássicas de óleo na entrada dos evaporadores, observou-se que no evaporador 1 permaneceu constante na faixa de temperatura simulada, sendo que isso ocorre devido a imposição da composição do óleo de soja, na entrada do sistema de evaporadores, para o evaporador 1, nas rotinas de ajuste de convergência do modelo. Com relação aos evaporadores 2 e 3, observou-se que com o aumento da temperatura houve proporcionalmente um aumento da fração mássica de óleo nos evaporadores, demonstrando a influencia da temperatura de alimentação nos dois evaporadores. As vazões de hexano evaporado, a partir da miscela no evaporador 1, nomeado com a letra V, aumentou proporcionalmente com a temperatura, mostrando a influencia da temperatura da miscela na entrada do primeiro evaporador, onde a carga térmica do fluido de aquecimento é alta, pois a mesma sai diretamente do dessolventizador/tostador. A vazão de hexano do evaporador 2, nomeado com a letra V, se manteve contante, mostrando que com para aquele intervalo de temperatura simulado, não houve influencia na vazão de hexano do segundo evaporador, sendo que a carga térmica no segundo evaporador é baixa, pois este fluido já trocou calor no primeiro evaporador. A vazão de hexano do evaporador 3, nomeado com a letra V, diminuiu com o aumento da temperatura de entrada da miscela no evaporador 3, sendo que este comportamento é pelo intervalo de temperatura simulado no modelo ser pequena, proporcionado pelo aumento da vazão de hexano nos evaporadores anteriores, diminuindo a concentração de hexano na miscela na entrada do evaporador 3, proporcionando um menor retirada do solvente. A vazão da miscela na saída do evaporador 1, diminui com o aumento da temperatura de alimentação, isto ocorre pois com este intervalo de temperatura, simulado no modelo,

ocorre um aumento de vazão de hexano e de acordo com o balanço de massa do evaporador, ocorre a diminuição da vazão a miscela na saída, sendo que a vazão da miscela de entrada do evaporador 1 é constante. A vazão da miscela na saída do evaporador 2, diminui com o aumento da temperatura da miscela de alimentação, isso ocorre em decorrência da diminuição da vazão de entrada do evaporador 2, como a vazão de hexano é constante, neste intervalo de temperatura, é esperado que a vazão de saída de miscela no segundo evaporador diminua com o aumento da temperatura da miscela, na entrada. A vazão da miscela na saída do evaporador 3 se manteve constante, este comportamento é coerente com relação à vazão de hexano, pois no intervalo de temperatura simulado, a vazão de hexano diminui.

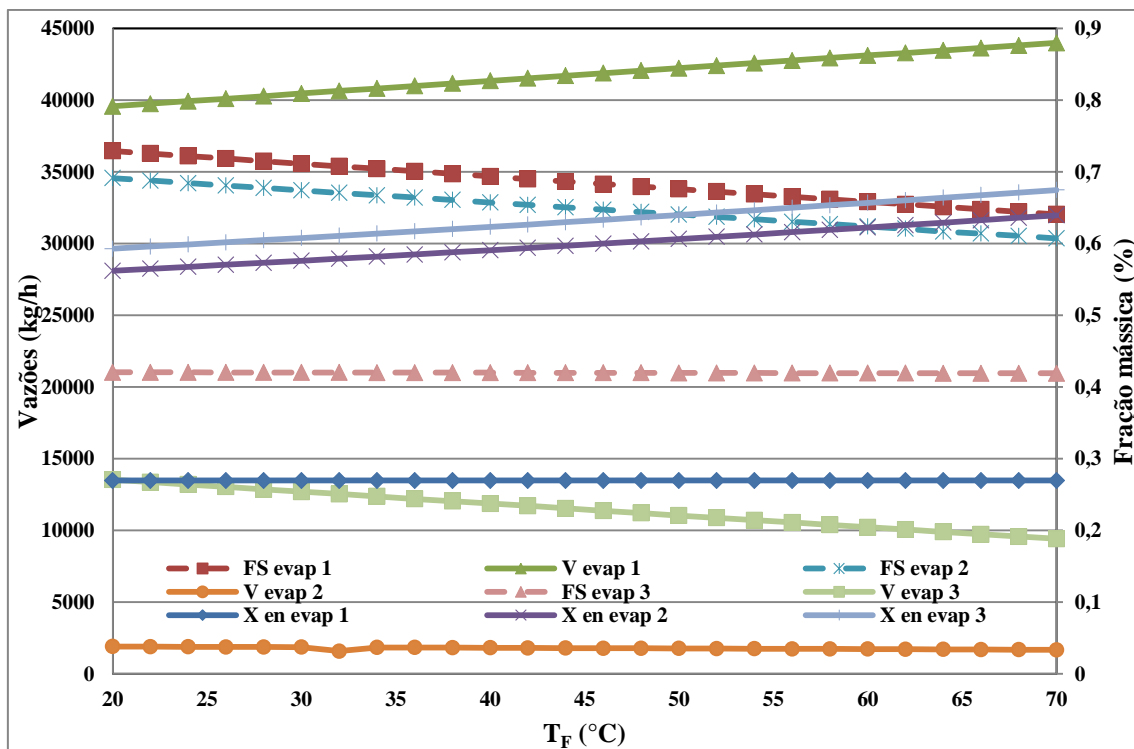


Figura 5.18 Influencia da temperatura da miscela na entrada do sistema de evaporação

5.3.3.2. Avaliação da concentração de óleo na miscela na entrada do sistema de evaporação

Na Figura 5.19 apresenta a influencia da concentração de óleo na miscela na entrada do evaporador 1, as vazões e frações mássicas das correntes. Observa-se que a concentração de óleo na miscela saindo do primeiro evaporador sobe acentuadamente até a fração de 90%, após esta concentração vai subindo moderadamente, demonstrando que mesmo aumentando a concentração da miscela de entrada acima de 40%, não há

energia térmica para aumentar a concentração da miscela, de saída. Com relação à vazão de hexano, ocorre uma diminuição, menos acentuada no intervalo de 17,01% até 40% e que após este intervalo a diminuição é mais acentuada. Este comportamento da vazão de hexano é esperado, pois com o aumento da concentração do óleo na miscela de entrada, há uma menor fração de hexano para ser removido.

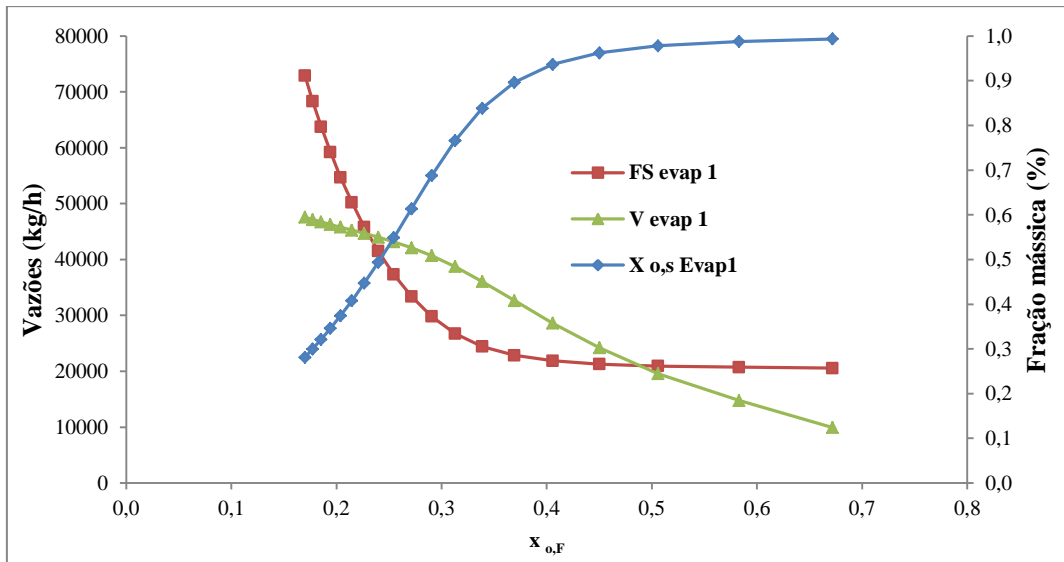


Figura 5.19 Influencia da concentração de óleo na miscela na entrada do evaporador 1

Na Figura 5.20 apresenta a influencia da concentração de óleo na miscela na entrada do evaporador 2, as vazões e frações mássicas das correntes. Observa-se que a concentração de óleo na miscela saindo do segundo evaporador sobe acentuadamente até a fração de 92%, após esta concentração, vai subindo moderadamente. Com relação à vazão de hexano, é aproximadamente constante, observando uma maior diminuição da vazão entre as concentrações de 17,01% a 30,00%, após esta concentração, tem um comportamento constante. Para a vazão de saída da miscela, no evaporador observa uma diminuição acentuado, no intervalo de 17,01% até 31,29%, após esta concentração a vazão de saída de miscela é aproximadamente constante.

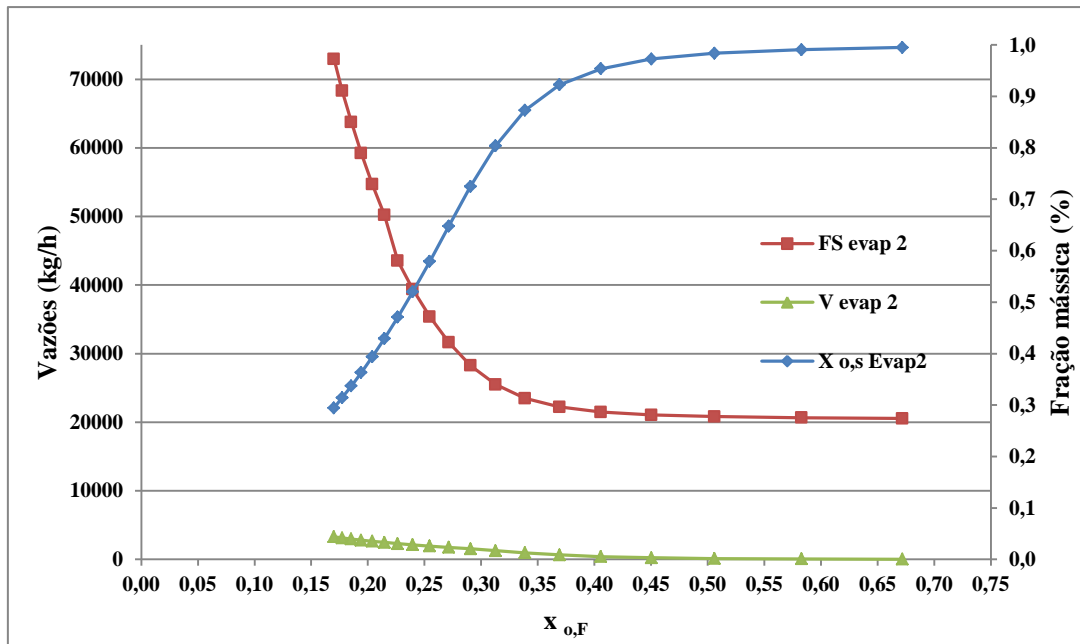


Figura 5.20 Influencia da concentração de óleo na miscela na entrada do evaporador 2

Na Figura 5.21 apresenta a influencia da concentração de óleo na miscela na entrada do evaporador 3, as vazões e frações mássicas das correntes. Observa-se que a concentração de óleo na miscela saindo do terceiro evaporador sobe acentuadamente até a fração de 99,27%, após esta concentração, permanece aproximadamente constante. Com relação à vazão de hexano, observando uma diminuição acentuada na vazão entre as concentrações de 17,01% a 36,63%, após esta concentração, tem um comportamento constante. Para a vazão de saída da miscela, no evaporador observa um comportamento aproximadamente constante, não observando uma variação durante a simulação do modelo, para o intervalo de concentração do óleo na miscela de entrada.

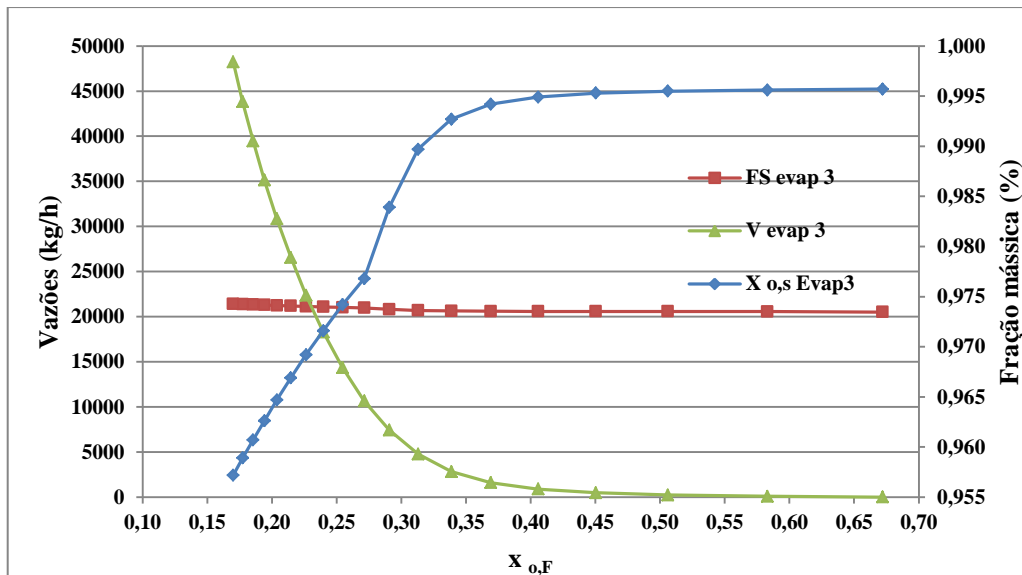


Figura 5.21 Influencia da concentração de óleo na miscela na entrada do evaporador 3

5.3.3.3. Avaliação da influencia da pressão de operação nos evaporadores do sistema de concentração de miscela

A Figura 5.22 apresenta a simulação para capacidade calorifica da corrente de miscela aquecida e a vazão da corrente de miscela de saída em função da variação da pressão de operação em cada evaporador. O intervalo de pressão operacional simulado no modelo, foi de 450 a 900 mmHg.

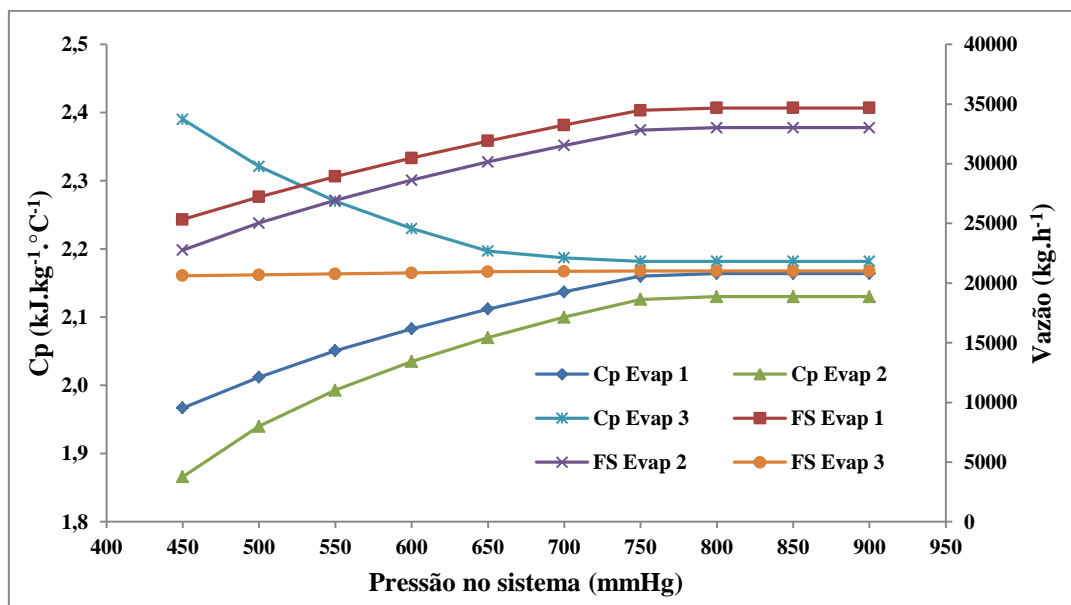


Figura 5.22 Influencia da pressão de operação nos evaporadores do sistema de evaporação

Na Figura 5.23 apresenta a influencia da pressão de operação no evaporador 1, as vazões e a capacidade calorífica da corrente de miscela aquecida. Observa-se que a

maior variação da capacidade calorífica e vazão de saída da miscela, no primeiro evaporador, ocorreu no intervalo de pressão de 450 a 750 mmHg, a partir desta pressão a capacidade calorífica e vazão se manteve praticamente constante.

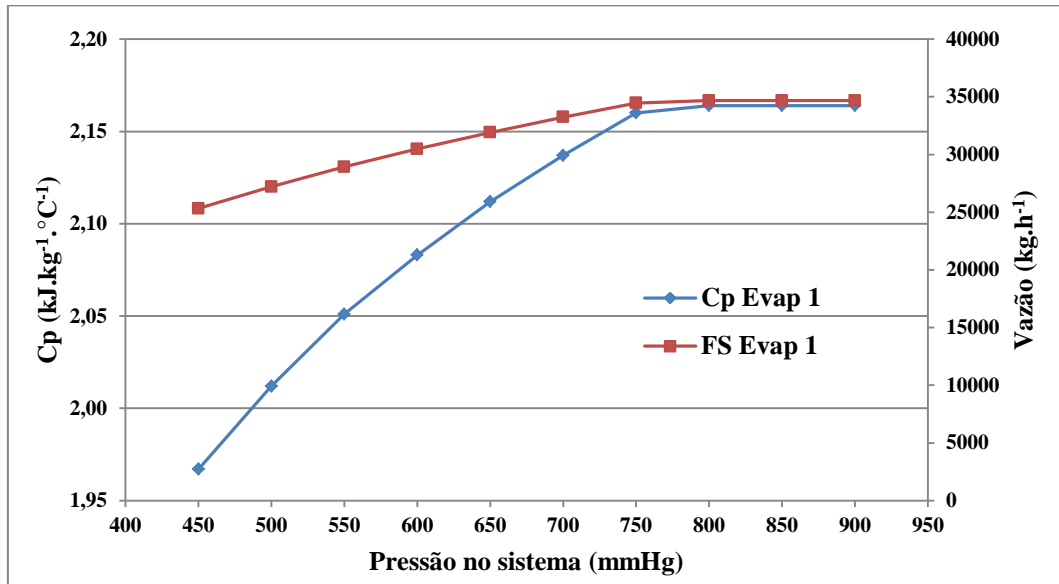


Figura 5.23 Influencia da pressão de operação no evaporador 01

Na Figura 5.24 apresenta a influencia da pressão de operação no evaporador 2, as vazões e a capacidade calorífica da corrente de miscela aquecida. Observa-se que a maior variação da capacidade calorífica e vazão de saída da miscela, no segundo evaporador, ocorreu no intervalo de pressão de 450 a 750 mmHg, a partir desta pressão a capacidade calorífica e vazão se manteve praticamente constante. O comportamento do primeiro e segundo evaporador é igual, pois no processo o sistema de pressão nos dois evaporadores é interligado.

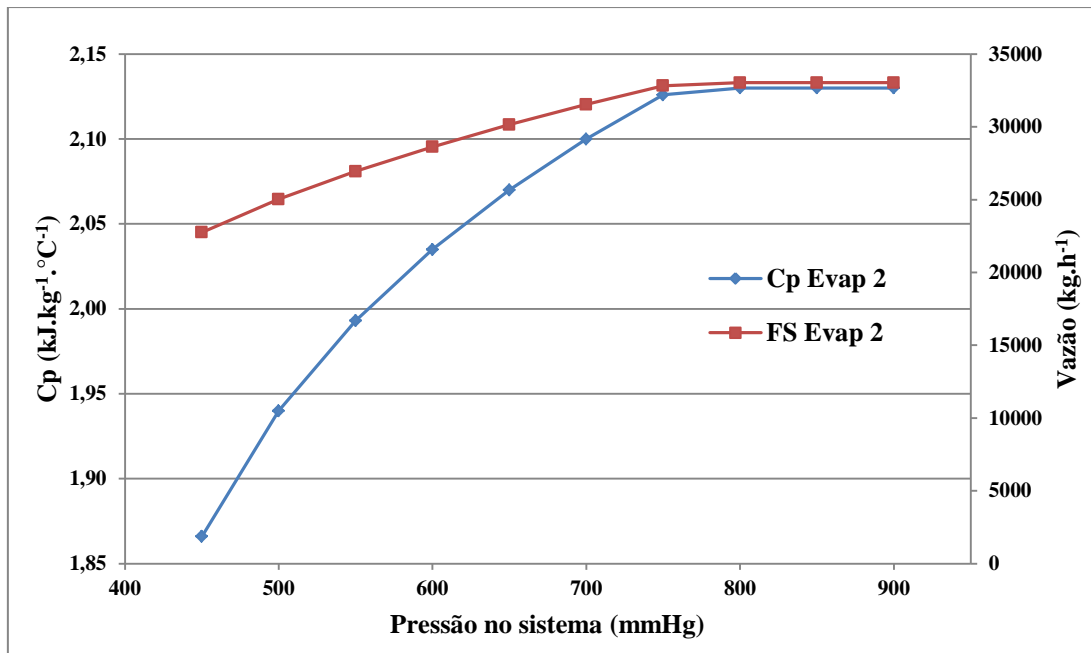


Figura 5.24 Influência da pressão de operação no evaporador 2

Na Figura 5.25 apresenta a influência da pressão de operação no evaporador 3, as vazões e a capacidade calorífica da corrente de miscela aquecida. Observa-se que ocorre uma diminuição acentuada da capacidade calorífica no intervalo de pressão de 450 a 700 mmHg, a partir desta pressão a capacidade calorífica se manteve praticamente constante. Para a vazão de saída da miscela ocorre um aumento acentuado no intervalo de pressão de 450 a 700 mmHg, a partir desta pressão a vazão de saída da miscela se manteve praticamente constante.

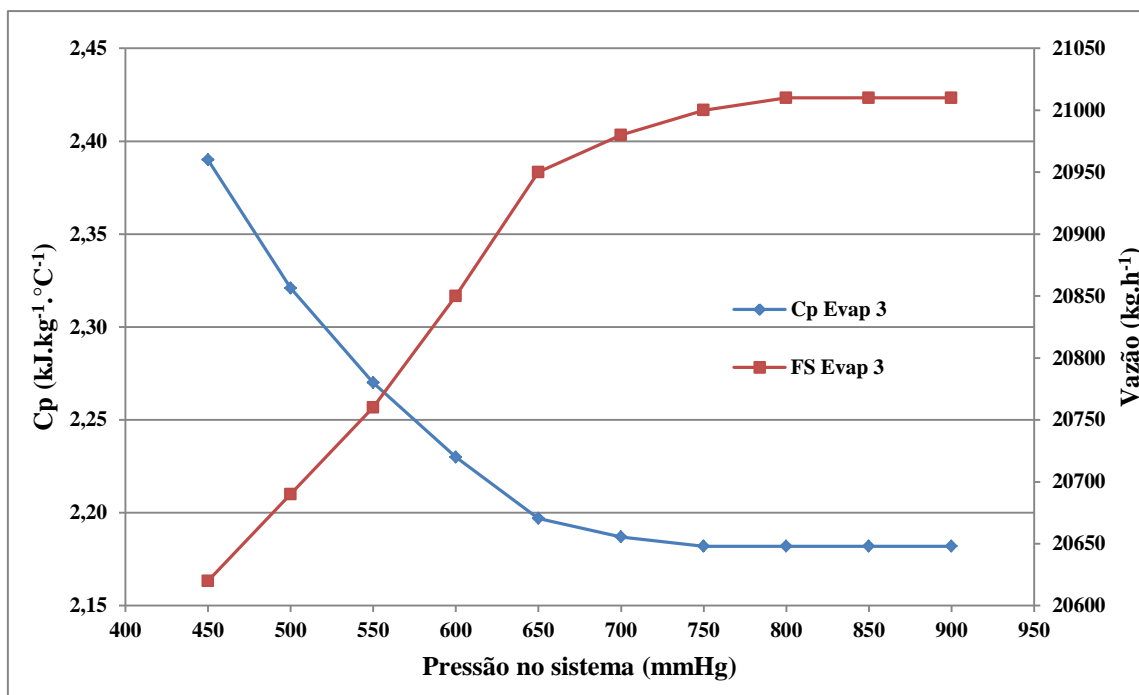


Figura 5.25 Influência da pressão de operação no evaporador 3

5.4. Conclusões parciais

Para o óleo de soja hipotético simulado no HYSYS utilizando a avaliação de distribuição de grupos por moléculas através do modelo UNIPAC e a partir da fração mássica dos ácidos graxos constituintes, foi uma aproximação satisfatória em função dos resultados encontrados na etapa de concentração da miscela nos evaporadores estarem condizentes com as reais de operação na planta, sendo que as frações de ácido graxo foram adicionadas a partir dos resultados laboratoriais, com as frações exatas do óleo de soja utilizado no processo.

A utilização dos modelos NRTL e solução ideal para o cálculo do coeficiente de atividade na fase líquida e Peng-Robinson para cálculo do coeficiente de atividade na fase gasosa conduziram a resultados de simulação coerentes quando comparados aos dados coletados no processo de destilação da miscela.

A estratégia de representar um evaporador no HYSYS pela associação de um trocador de calor com um vaso separador de fases foi utilizada com sucesso e representou satisfatoriamente o comportamento de evaporadores industriais da COCAMAR.

No simulador de processos HYSYS como o modelo convencional desenvolvido representarem adequadamente o comportamento do sistema industrial de evaporação. Os valores previstos com o modelo convencional para as vazões nas principais correntes no sistema de evaporação apresentaram uma diferença média absoluta em relação às simulações com o HYSYS de menor que 1% para os três evaporadores. Quanto ao coeficiente global de transferência de calor, com influência da vazão de alimentação, foram encontradas diferenças médias absolutas de 6,88%, 23,57% e 2,89% para o primeiro, segundo e terceiro evaporadores respectivamente, na comparação entre os dois modelos desenvolvidos. Os valores dos coeficientes globais resultantes do modelo de evaporadores modelados no HYSYS estão dentro das faixas delimitadas pela literatura.

Os resultados obtidos mostraram que a modelagem e simulação do processo de evaporação da miscela utilizando o HYSYS foram bastante coerentes com as condições reais do processo com desvios máximos em relação aos dados coletados na planta de $\pm 1\%$ nas vazões de mistelas e composições das correntes e de $\pm 2,5\%$ para as temperaturas. O HYSYS, pode ser utilizado como ferramenta no processo de análise, simulações e otimizações da operação de concentração da miscela de óleo de soja em evaporadores do tipo vertical de tubos longos.

6. ANÁLISE GLOBAL DO SISTEMA DE DESTILAÇÃO DA MISCELA DA COCAMAR

6.1.Introdução

Nos três capítulos anteriores foram realizadas a modelagem, a simulação e análise das principais operações envolvidas na obtenção de óleo bruto no processo da destilação da miscela. Na realização das simulações, procurou-se obter os valores das correntes e parâmetros operacionais do sistema, em condições reais de operação

JONGENELEN (1976), SCHUMACHER (1983), PARAISO (2001), CAI (2011) enfatizam a grande atenção que deve ser dada a quantidade de energia consumida no processamento da soja, onde é necessária intensa investigação na possibilidade de analisar a diminuição do consumo de vapor d'água e otimização no consumo dos vapores provenientes da etapa de dessolventização. A Tabela 6.1 apresenta os valores de

consumo de vapor d'água nas principais etapas da extração a solvente de óleo de soja propostos por JONGENELEN (1976).

Tabela 6.1 Consumo de vapor d'água nas principais etapas do processo de extração de óleo de soja a solvente

<i>Etapa do Processo</i>	<i>Consumo de vapor d'água (Kg/t de grãos de soja processada)</i>
Preparação (condicionamento)	60
Extração	20
Destilação da miscela	40
Desolventizador/Tostador	150
Secagem e resfriamento	80

Segundo JONGENELEN (1976), de acordo com a Tabela 6.1, a destilação da miscela apresenta um dos menores consumos de vapor d'água em relação às demais etapas do processo, por que utiliza quando quase que a totalidade da energia proveniente dos gases do dessolventizador-tostador. Caso isso não ocorresse a destilação precisaria de uma quantidade de vapor d'água, três vezes maior em relação ao que exige no processo.

Para concluir o estudo da destilação da miscela, este capítulo apresentará a comparação do consumo de vapor d'água obtido com as simulações no HYSYS e com os resultados apresentados por JONGENELEN (1976), PARAISO (2001) e NETO (2012), uma vez que não há os valores reais de consumo dessa utilidade na planta.

6.2. Modelo do sistema de destilação da miscela da COCAMAR no HYSYS

Na Figura 6.1, em que é apresentado o modelo global do sistema de destilação da miscela da COCAMAR, pode-se verificar que as correntes globais de entrada no processo, são:

- ✓ MISCELA FRIA: formada simbolicamente pelas correntes de *Óleo bruto e solvente hexano*, onde estes dois componentes entram no extrator e são misturados. Essa corrente influencia na massa e quantidade de energia consumida no sistema.

- ✓ VAPOR DT QUENTE: formada por vapores originados da etapa de dessolventização e tostagem do farelo de soja. Essa corrente contribui com a energia para o sistema de evaporação, especificamente para o primeiro e segundo evaporador.
- ✓ VAPOR 1: corrente de vapor de água saturado quente que fornece energia térmica para a troca térmica, especificamente para o terceiro evaporador.

As correntes de saída do sistema de destilação da miscela, no modelo implementado no HYSYS e apresentado na Figura 6.1, são:

- ✓ DT QUENTE 02: é a corrente composta pela condensação parcial da corrente *Vapor DT quente*, após a troca térmica no primeiro e segundo evaporador, sendo composto por água e solvente hexano.
- ✓ VAPOR 02: é a corrente composta pela condensação da corrente *Vapor 01*, após a troca térmica no terceiro evaporador.
- ✓ MISCELA 4: é a corrente composta pela destilação da corrente *Miscela fria* inicial alimentada no sistema, após a concentração em três evaporadores, envolvidos no processo de destilação.

O equipamento *aquecedor*, demonstrado na Figura 6.1, representa um bloco de simulação de um aquecedor que se qualifica por utilizar uma corrente de energia (*Vapor*) necessária para modificar a temperatura de uma corrente de miscela. No processo, este equipamento é utilizado para aumentar a temperatura na entrada do terceiro evaporador, ocorrendo à troca térmica indireta entre o vapor d'água saturado, com a miscela, facilitando a concentração da miscela no terceiro *evaporador*.

Nesse capítulo avalia-se a quantidade de vapor de aquecimento no processo de destilação da miscela e um balanço global por componente. Para avaliar a quantidade de vapor d'água consumida no terceiro evaporador, foi realizado um calculo retroativo para colocar a demanda de vapor, em Kg/t de soja processada tomando-se a porcentagem de óleo na corrente *Miscela fria*, demonstrada na Tabela 5.1.

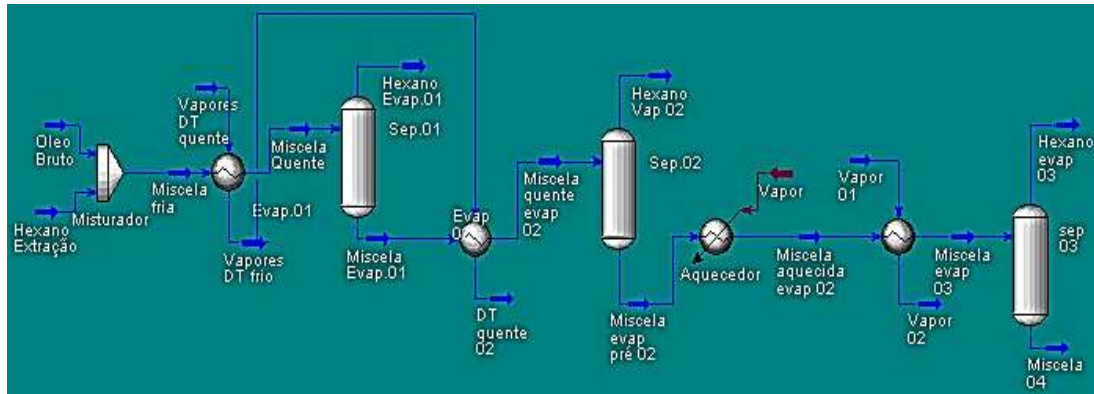


Figura 6.1 Modelo global do sistema de destilação da miscela da COCAMAR no HYSYS

6.3 Resultados e discussões parciais

6.3.1 Avaliação do consumo de vapor de aquecimento

Analisando a Tabela 6.2, onde apresenta os consumos de vapor na etapa de destilação da miscela, verifica-se que o consumo do terceiro evaporador, de vapor d'água previsto pelo modelo montado no HYSYS foi de 26,98 kg de vapor/tonelada de grão de soja processado. Apartir de dados reais do processo pode-se considerar que a coluna *stripper*, consome aproximadamente 10,00 Kg de vapor/ tonelada se soja processada, o vapor apresenta um desvio médio de 7,55% do consumo proposto por JONGENELLEN (1976) indicando que o consumo energético no modelo gerado pode estar de acordo com as condições reais do processo, na operação da planta de extração de óleo de soja. Utilizando a mesma analogia, avaliando-se a quantidade de vapores condensados do DT, no primeiro e segundo evaporador, entre o modelo no HYSYS, PARAISO (2001) e NETO (2012), revela-se um desvio médio de 16,93 % e 11,08% respectivamente, indicando a proximidade entre os dois resultados.

Tabela 6.2 Consumo de vapor na destilação da miscela

Fonte	1º e 2º evaporador (condensação vapores do DT)	3º evaporador (Vapor d'água)
	Kg de vapor / tonelada de grão processado	
JONGENELLEN (1976)	-	40,00
PARAISO (2001)	281,20	37,00
NETO (2012)	301,00	33,50
HYSYS	338,54	26,98

6.4 Conclusão parcial

A análise de consumo de vapor d'água por meio da comparação com os resultados da literatura, pode-se concluir que o modelo dos evaporadores, da etapa de destilação da miscela implementado no HYSYS, demonstra as condições reais de operação da planta de extração de óleo de soja, da COCAMAR.

7. CONCLUSÕES SOBRE A MODELAGEM, SIMULAÇÃO E ANÁLISE DA DESTILAÇÃO DA MISCELA DA COCAMAR

As propriedades físicas do óleo de soja hipotético modelado no HYSYS, a partir da análise laboratorial da fração mássica dos ácidos graxos constituintes no óleo de soja do processo real e utilizando a avaliação de distribuição de grupos por moléculas do método UNIFAC, conduziram a resultados satisfatórios quando comparados a dados experimentais da literatura, o intervalo de temperatura considerado durante a análise das propriedades físicas foi de 0 a 150°C, resultando em desvios relativos menor que 7,00% para a densidade mássica, menor que 10,00% para a capacidade calorífica, menor que 40,00% para a tensão superficial, menor que 10,00% para a condutividade térmica.

Quanto à miscela hipotética modelada no HYSYS, por meio do óleo hipotético modelada por meio hipotético de soja e hexano, as simulações demonstraram que as propriedades físicas dessa solução hipotética apresentaram concordância com os resultados experimentais encontrados na literatura para o quociente do produto densidade mássica e viscosidade dinâmica, sendo que estes parâmetros físicos são fundamentais na avaliação do processo de extração de óleo de soja, analisando entre a temperatura de 25 a 40°C para densidade mássica e de 25 a 37,80°C para a viscosidade dinâmica. Segundo referenciam bibliográficas, evidenciando desvio menor que 5,00% para a densidade mássica, em uma faixa de concentração de óleo na miscela de 0 a

100%. Para a viscosidade dinâmica, em uma faixa de concentração de óleo na miscela de 0 a 100%, evidenciou-se um desvio menor que 20,00%. Em razão dessa constatação infere-se que a miscela hipotética, modelada no HYSYS, pode ser utilizada com segurança na modelagem e simulação dos equipamentos, envolvidos do processo de concentração do óleo bruto de soja.

A partir dos modelos de blocos de simulação, implementados no HYSYS, para cada etapa do processo de destilação da miscela, passando a aplicação prática, em cada equipamento do processo de destilação de miscela, visando obter a confirmação da viabilidade desses modelos desenvolvidos como ferramentas para auxiliar em processos de otimização de destilação da miscela, assim como permitir melhor visualização de suas limitações.

A estratégia de representar um evaporador no HYSYS por meio da associação de um trocador de calor com um vaso separador de fases foi empregada com sucesso e representou satisfatoriamente o comportamento dos três primeiros evaporadores industriais, da destilaria da extração de óleo de soja da COCAMAR. Tanto o software utilizado na simulação do processo, HYSYS, como o modelo convencional desenvolvido representou adequadamente o comportamento do sistema industrial de evaporação. Os valores previstos com o modelo convencional, para as vazões mássicas das principais correntes do sistema que envolve os evaporadores, apresentaram uma diferença média absoluta em relação às simulações desenvolvidas, com a utilização do HYSYS, foram de 0,002%, 0,001% e 0,002% para o primeiro, segundo e terceiro evaporadores, respectivamente. Com relação ao coeficiente global de transferência de calor, com influência da vazão de alimentação, foram encontradas diferenças médias absolutas de 7,07%, 7,17% e 12,92% para o primeiro, segundo e terceiro evaporadores, respectivamente, na comparação entre os dois modelos desenvolvidos. Os coeficientes globais resultantes do modelo de evaporadores implementado na HYSYS, encontram-se dentro das faixas delimitadas pela literatura.

As simulações realizadas na operação de evaporação de miscela foram analisadas frente aos dados operacionais da planta industrial de extração de óleo de soja da COCAMAR e os resultados da literatura, revelando que os modelos propostos são coerentes. Esta constatação pode ser confirmada, uma vez que os níveis de separação do

solvente hexano com o óleo de soja previsto pelos modelos, bem como as temperaturas de saída dos equipamentos estão muito próximos dos valores reais do processo. Portanto, pequenos desvios foram observados em relação as variáveis estudadas durante a simulação. Isso pode ser devido a fatores não previstos nos modelos desenvolvidos, como as perdas de calor para o ambiente, não inclusos no modelo de todos os equipamentos do processo, tais como tubulações, bombas transportadoras e válvulas controladoras, que contribuem na variação de temperatura e pressão das correntes e equipamentos do processo de concentração da miscela.

A existência de informações operacionais da planta industrial sobre a quantidade de vapor d'água de aquecimento consumido nas operações que envolvem os evaporadores, a produção de gases nos topos dos equipamentos e a composição do óleo bruto poderiam conduzir a conclusões ainda mais precisas sobre o modelo realizado no HYSYS, haja vista que o valor de geração de vapor está muito elevado, ocasionado pelo elevado custo da matéria prima para gerar o mesmo. Nos últimos dois anos, a COCAMAR está utilizando o cavaco como matéria prima para queima, pois o bagaço de cana de açúcar, esta com valor muito elevado. Os resultados obtidos durante a simulação em estudo foram comparados com alguns resultados da literatura, por tanto podemos concluir que houve uma boa consonância.

Por final, pode-se destacar que o objetivo principal da dissertação foi atingido, uma vez que os resultados obtidos, com as simulações, revelaram que foi possível implementar um modelo de destilação da miscela no HYSYS, por meio dos recursos existentes no simulador e alcançou, com coerência, o comportamento real da planta de extração de óleo de soja da COCAMAR.

Como sugestão para trabalhos futuros, o modelo global para a destilação de miscela da COCAMAR, implementado e desenvolvido no HYSYS, poderá ser utilizado, futuramente, para analisar e otimizar o processo de concentração da miscela, de uma forma mais abrangente, focada no consumo de vapor saturado, no processo.

8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

A&G Aceites y Grasas. Libro 10^a Aniversario Recopilacion de Articulos Tecnicos. Ediciones 1 a 41 – 1990/2000. Pagina 490 a 510, 2000.

ABIOVE – Associação Brasileira das Indústrias de Óleos Vegetais. Disponível em <<http://www.abiove.com.br>>. Acesso em 20 de Novembro de 2012.

ALVORADO, J. D., *Chem. Abstr.* V.124, 200581, 1996.

ALVORADO, J. D., Mechanical properties of vegetable oil and fats, *Grasas Aceites*. V. 46, p. 264-269, 1995.

AMARAL, L.; JAIGOBIND, S. J.; JAIGOBIND, A. G. A. Óleo de Soja. *Dossier Técnico*. Paraná: Instituto de Tecnologia do Paraná, 2006.

ASPENTECH, HYSYS 3.1 User's Guide, 2003.

BARBOSA, M. Z., de FREITAS, S. M. e FRANCA, T. J. F. Considerações sobre os desafios da cadeia de produção de óleo de soja no Brasil, *Óleos & Grãos*, p. 44, Setembro/Outubro, 1998.

BASTIN, G. J. Q. Aceites Vegetales y Semillas oleaginosas: guia del comerciante, principales aceites y semillas em El comercio mundial. Genebra: CCI, v.2, 275 p, 1990.

BENNET, C. O. MEYERS, J. E., (1978), *Fenômenos de transporte de quantidade de movimento, calor e massa*, McGraw-Hill, Rio de Janeiro-RJ.

BLACKADDER, D. A.; NEDDERMAN, R. M. Manual de operações unitárias. São Paulo: Hemus Editora Limitada, 1982.

BOSS, E. A., *Análise do desempenho de plantas de extração de óleos convencionais e de processos supercríticos*, Unicamp, dissertação de mestrado. Campinas-SP, 2000.

BROCK, J.; NOGUEIRA, M. R.; ZAKRZEWSKI, C.; CORAZZA, F. C.; CORAZZA, M. L.; OLIVEIRA, J. V. Determinação experimental da viscosidade e condutividade térmica de óleos vegetais. *Ciênc. Tecnol. Aliment.*, v.28 (3), p. 564-570, 2008.

CAI, W.; SUN, Y.; PIAO, X.; LI, J.; ZHU, S. Solvent recovery from soybean oil/hexane miscella by PDMS composite membrane. *Chin. J. Chem. Eng.*, v.19(4), p. 575-580, 2011.

CHANG, A.; LIU, Y. A. Integrated Process Modeling and product Design of Biodiesel Manufacturing. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.49 (3), p. 1197-1213, 2010.

CHAWANKUL, N.; CHUAPRASERT, S.; DOUGLAS, P.; LUEWISUTTHICHAT, W. Simulation of an agitated thin film evaporator for concentrating orange juice using AspenPlus™. *J. Food Eng.*, v.47, p. 247-253, 2001.

CONAB, Companhia Nacional de Abatecimento. *Conjuntura da soja*. Disponível em <http://www.conab.gov.br/OlalaCMS/uploads/arquivos>. Acesso em 01 de Dezembro de 2012.

CONZ, V. *Desenvolvimentos de analisadores virtuais aplicados a colunas de destilação industriais*. Dissertação de mestrado. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, UFRGS, Porto Alegre – RS, 2005.

CUSTÓDIO, A. F., *Modelagem-Simulação do processo de separação de óleo de soja-hexano por evaporação*, Unicamp, Campinas-SP. Dissertação de mestrado, 2003.

DEMARCO, A. Extracción por solvente em *Temas Selectos em Aceites y Grasas*. BLOCK, J. M.; BARRERA-ARELLANO, D., Eds., São Paulo: Blucher, 2009.

DURKEE, M. M. Soybean oil in the food industry. *Ind. Eng. Chem.*, v. 28(8), p. 898-903, 1936.

EMBRAPA, Empresa Brasileira de Pesquis Agropecuaria. Documento 171 Tecnologia para produção do óleo de soja: descrição das etapas, equipamentos, produtos e subprodutos, 2001. Disponível em http://aboissa.com.br/informativos/espec/soya/processos_da_soja.pdf Acessado em 28 de Novembro de 2012.

ERICKSON, D. R. ; PRYDE, E. H. ; BREKKE, O. L. ; MOUTS, T. L. & FALB, R. A. Handbook of Soy Oil Processing and Utilization, *American Soybean Association and American Oil Chemists's Society*, 1987, 598p.

ERICKSON, D. R. *Practical handbook of soybean processing and utilization*, Am. Oil Chem. Soc. New York: Press and the United Soybean Board, 1995.

ERNEST, YOUNG e FGV projetos, “Estudos Econômicos”, site FGV (2008).

FERNANDES-JUNIOR, C. C.(2009), Integração energética da etapa de extração de óleo de soja, utilizando a análise Pinch, Unioeste, Toledo-PR (dissertação de mestrado).

FORTUNA, L., GRAZIANI, S., RIZZO, A. & XIBILIA, M. G.. *Soft Sensors for Monitoring and Control of Industrial Process*. Springer, London, 2007.

FOUST, A. S., WENZEL, L. A., CLUMP, C. W., ANDERSON, L. B. *Princípios das Operações unitárias*, Guanabara Dois, Rio de Janeiro-RJ, p.436, 1982.

FREGOLENTE, P. B. L. *Obtenção de monoacilglicerol de alta concentração através de glicerólise enzimática e destilação molecular*, Tese de doutorado, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Campinas: 2010.

FUGÈRE, M., FARAND P., CHABOT R., STUART P. Design and techno-economic analysis of a process for transforming pig manure into a value-added product. *Can J. Chem. Eng.* V. 85, p. 360-368, 2007.

GAVIN, A. M. Energy conversation in edible uses. *J. Am. Oil Chem. Soc.*, v.3 (60), 1983.

GEANKOPOLIS, C. J. *Transport processes and unit operation*. New Jersey: Prentice-Hall, 1993.

GERMANO, P. M. L.; GERMANO, M. I. S. *Higiene e Vigilância Sanitária de Alimentos*. São Paulo: Editora Livraria Varela, 2001.

GMEHLING, J. et. al. Modified UNIFAC Model. 2. Present Parameter Matrix and Results for Different Thermodynamic Properties, *Industrial Engineering Chemistry Research*, vol. 32, n. 1, p.178, 1993.

GMEHLING, J. et. al. Vapor-Liquid Equilibria by UNIFAC Group Contribution. Revision and Extension.2, *Industrial Engineering Chemistry Research*, vol. 21, n. 1, p.118- 127, 1982.

GONZALES, P. E. M., FILHO, L. L., ANDRADE, C. M. G., JORGE, L. M. M., PARAISO, P. R., “Evaporação da miscela: avaliação de parâmetros de processo”, *Anais do XVIII Congresso Brasileiro de Engenharia Química – COBEQ*, 3182 – 3190., 2010.

GONZALEZ, G. D., *Soft Sensors for processing plants*. In: Proc. 2nd International Conference on Intelligent Processing and Manufacturing of Materials, IPMM 99, v. 1, p. 59-70, Hawaii, 1999.

GUARIENTI, E. P.; LOVATO, A. O solvente Hexano no Processo de Extração de Óleo de Soja. 2009.

HAMID, M. K. A. *HYSYS An Introduction to chemical engineering simulation*. Universiti Teknologi Malaysia, Johor, 2007.

HAMMING, R. W. *Numerical Methods for Scientists and Engineers*, 2nd Edição, 1973, 721p.

HAMMOND, E. G.; JOHNSON, L. A.; WHITE, P. J.; WANG, T.; SU, C. Soybean Oil, in “Bailey’s industrial Oil and fat Products”, 6th., SHAHIDI, F. Eds., New York: John Wiley & Sons, 2004.

HANSEN, H. K.; RASMUSSEN, P.; FREDENSLUND, A.; SCHILLER, M.; GMEHLING, J. Vapor-liquid equilibria by UNIFAC Group Contribution. 5. Revision and Extension. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 30(10), p. 2352-2355, 1991.

HIMMELBLAU, D. M. *Engenharia química: Princípios e cálculos*. Rio de Janeiro: Sindicato Nacional de Editores de Livros, 1984.

HOCH, P. M.; ESPINOSA, J. Conceptual Desing and Simulation Tools Applied to the Evolutionary Optimization of a Bioethanol Purification Plant. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.47 (19), p. 7381-7389, 2008.

HOUGEN, J. O. Thermal properties of soybean oil meal. *Chem. Eng. Data Ser.*, v.2(1), p. 51-54, 1957.

INCROPERA, F. P.; DEWITT, D. P. *Fundamentos de transferência de calor e massa*, 5th ed.. Rio de janeiro: Livros técnicos e Científicos Editora, 2003.

JOHNSTONE, H. F.; SPOOR, I. H.; GOSS, W. H. Properties of soybean oil-solvent mixtures. *Ind. Eng. Chem.*, v. 32, p. 832-835, 1940.

JOHNSON, L. A. & LUSAS, E. W. Comparison of alternative Solvents for Oils Extraction. *JAOCS: Journal of the American Oil Chemists Society*, v. 60, n. 2, p. 229-242, February, 1983.

JOHNSON, L. A. Theoretical, comparative and historical analyses of alternative technologies for oilseeds extraction em *Technology and Solvents for Extracting Oilseeds and Nonpetroleum Oils*, WAN, P. J.; WAKELYN, P. J. eds., AOCS Press, Champaign, Illinois: 1997.

JONGENELEN, H. P. J. Energy Conservation in Solvent Extration Plants, *JAOCS Journal of the American Oil Chemists Society*, vol.53, p. 291, June, 1976.

JORGE L. M. M.; A. R. RIGHETTO; P. A. POLLI; O. A. A. SANTOS, R. MACIEL FILHO., Simulation and Analysis of Sugarcane Juice Evaporation System, 2010 — *Journal of Food Engineering*.

KEMPER, G.T. Minimização da perda de solvente, **Grãos & Óleos**, p. 22, Setembro/Outubro, 1998.

KENYON, R. L.; KRUSE, N. F.; CLARK, S. P. Solvent extraction of oil from soybeans. *Ind. Eng. Chem.*, p. 186-194, 1948.

KERN, D. Q. Processos de Transmissão de Calor, Guanabara S.A , 1980, 671p.

KUMORO, A. C.; SINGH, H.; HASAN, M. Solubility of Piperine in supercritical and Near Critical Carbon Dioxide. *Chin. J. Chem. Eng.*, v.17 96), p. 1014-1020, 2009.

LIU, K. *Expanding soubean food utilization. Food Technology*. Chicago, v.54(7), p.46-58, 2000.

LOPES, K. S. *Avaliação da Etapa de Clarificação do Óleo de soja através de Planejamento Composto Central e Investigação do potencial de Melhoria Energética no processamento da Soja*. Dissertação de mestrado, 2008.

MAGNE, F. C.; HUCHES, E. J.; SKAU, E. L. Density-composition data for cottonseed oil-solvent mixtures. *J. Am. Oil Chem. Soc.*, v.27, p. 552-555, 1950.

MAGNE, F. C.; SKAU, E. L. Viscosities and densities of solvent-vegetable oil mistures. *Ind. Eng. Chem.*, v. 37(11), p. 1097-1101, 1945.

MARIANI, D. C., *Modelagem, simulação e otimização de uma planta de produção de biodiesel*. Dissertação de mestrado, Universidade Estadual de Maringá (UEM), Maringá, 2007.

MARQUEZAN, Marta. Obtenção e Caracterização de um Concentrado de Tocoferóis (vitamina E) a partir do Destilado da Desodorização do Óleo de Soja. Campinas: FEA, UNICAMP, 1983. Dissertação (Mestrado) – Faculdade de Engenharia de Alimentos, Universidade Estadual de Campinas, 1988. p. 6-10.

MCCABE, W. L.; SMITH, J. C. *Unit Operations of Chemical Engineering*, 3rd ed.. Tokyo: McGraw-hill, 1976.

MILLIGAN, E. D. & TANDY, D. C. Field Evolution of Extraction Performance, *JAOCs: Journal of the American Oil Chemists Society*, n. 8, vol. 61, p. 1383, august, 1984.

MORAD, N. A.; KAMAL, A. A. M.; PANAU, F.; YEM, T. W. Liquid specific heat capacity estimation for fatty acids, tiacylglycerols, and vegetable oils based on their fatty acid composition. *J. Am. Oil Chem. Soc.*, v. 77 (9), p.1001-1005, 2000.

MOURA, J. M. L. N. *Degomagem de oleo de soja bruto através da ultrafiltração*, Dissertação de mestrado, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Campinas: 2002.

NETO, J. M. N., *Simulação do sistema de concentração da miscela no processo de refino de óleo de soja*. Dissertação de mestrado, Universidade Estadual de Maringá (UEM), Maringá, 2012.

NOUREDDINI, H.; TEOH, B. C.; CLEMENTS, D. Densities of vegetables oils and fatty acid. *J. Am. Oil Chem. Soc.*, v. 69 (12), p. 1184-1191, 1992.

O'BRIEN, R. D. *Fats and Oils: Formulating and Processing for Applications*. Technomic Publishing Company, Pennsylvania: 1998.

OETTERER, M.; D'ARCE, M. A. B. R.; SPOTO, M. H. F.; Fundamentos de Ciencia e tecnologia de Alimentos. 2006.

OILSEEDS – World Markets and Trade. Washington: USDA, disponível em <<http://usda.mannlib.cornell.edu/MannUsda/viewDocumentInfo.do?documentID=1727>> acessado em 20 de Novembro de 2012.

OTHMER, D. F.; JAATINEN, W. S. Extraction of soybeans – mechanism with various solvents. *Ind. Eng. Chem.*, v.51(4), p.372-378, 1939.

PARAÍSO, P. R., Modelagem e Análise do Processo de Obtenção do Óleo de Soja, 2001, Tese de Doutorado — FEQ/UNICAMP.

PARAÍSO, P. R.; ANDRADE, C. M. G.; ZEMP, R. J. Destillation of the Micella I: modeling and simulation of the hexane evaporation. *Ciênc. Tecnol. Aliment.*, v. 23 (3), 2003.

PERKINS, E. G. *Practical handbook of soubean processing and utilization*, AOCS Press and the United Soubean Board, 1995.

PERRY, R. H. & CHILTON, C. H. Manual de engenharia química. 5. ed. Rio de Janeiro : Guanabara Dois, 1980. 1250 p.

PROST, J. S.; GONZÁLES, M. T.; URBICAIN, M. J. Determination and correlation of heat transfer coefficients in a falling film evaporator. *J. Food Eng.*, v.73, p. 320-326, 2006.

QUESADA-MEDINA, J.; LÓPEZ-CREMADES, F. J.; OLIVARES-CARRILLO, P. Organosolv extraction of lignina from hydrolyzed almond shells and application of the δ -value theory. *Bioresour. Technol.*, v. 101 (21), p. 8252-8260, 2010.

REID, R.C. et al. The properties of gases and liquids. New York: McGraw-Hill Book Company, 1987.

RENON H. e PRAUSNITZ J. M. Local composition in thermodynamic excess functions for liquid mixtures *AICHE Journal* 14. 1968.

RESENDE, J. V.; SILVEIRA JR., V. Medidas da condutividade térmica de modelos de poupas de frutas no estado congelado. **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, v. 22, n. 02, p. 177-183, 2002.

REZENDE, D. F., MACIEL FILHO, R. *Estudo Exploratório de Aplicabilidade dos Meios Supercríticos para Extração e Processamento de Óleos Vegetais com Ênfase em Controle Aplicado à Unidade Extratora*. Tese de Doutorado – Faculdade de Engenharia Química (FEQ), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), 178 p, Campinas: 1998.

RIBEIRO, A. P. B. *Recuperação de solvente em mistelas óleo de soja/hexano utilizando tecnologia de membranas*. Dissertação de mestrado. Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP). Campinas: 2005.

RICE, P.; HAMM, W. Densities of soybean oil/solvente mixtures. *J. Am. Oil Chem. Soc.*, v. 65(7), p. 1177-1179, 1988.

RIGBY, D. K. Ferramentas de gestão: em guia para executives. Bain & Company. Acesso em Março de 2012.

SANDLER, S. I. *Chemical and Engineering Thermodynamics*, 2nd ed., John Wiley and Sons, 2003.

SANTANA, G. C. S.; MARTINS, P. F.; LIMA DA SILVA, N.; BATISTELLA, C. B.; MACIEL FILHO, R.; WOLF MACIEL, M. R. Simulation and cost estimate for biodiesel production using castor oil. *Chem. Eng. Res. Des.*, v. 88 (5-6), p. 626-632, 2010.

SANTANDER, C.M.G.; COSTA, ALINE C.; MACIEL FILHO, R. Pretreatment of sugarcane bagasse with phosphoric and sulfuric diluted acid for fermentable sugar production by enzymatic hydrolysis. *Chemical Engineering Transactions*, v. 20, p. 321-326, 2010.

SAVASINI, J. A. A. Industrialização da Soja. In: Miyasaka,; ed. *A Soja no Brasil*, Campinas, 1981

SCHUMACHER, H. Ultimate energy possibilities in conventional solvent extraction. *J. Am. Oil Chem. Soc.*, v. 60 (2), p. 417-419, 1983.

SKAU, E. L.; MAGNE, F. C.; MOD, R. B.; DURR, R. L. General density equation for glyceridic oil-solvent mixtures. *Ind. Eng. Chem.*, v. 47(5), p. 1043-1049, 1955.

SMITH, A. S., WECHTER, F. J. Vapor Pressure of Hexane-Soybean Oil Solutions at low Solvent Concentrations, *JAOCs: Journal of the American Oil Chemists Society*, 1950, 381-383.

SOARES, M. S. *Processamento de óleo de soja utilizando ultrafiltração em miscela na etapa de degomagem e na obtenção de lecitina*, Tese de doutorado, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Campinas: 2004.

STRAGEVITCH, Luiz, "Equilíbrio Líquido-Líquido de Misturas de Não Eletrólitos", Campinas: FEQ, UNICAMP, 1997. Tese (Doutorado) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 1997.

TEMA, *Standards of the Tubular Exchange Manufacturers Association*, Exchanger Manufacturers, 7. Ed., Nova York: 1998.

THOMAS, G. C. Análise teórico-Experimental da Extração de Óleo de Soja em Instalação Industrial do Tipo Rotocell. Tese doutorado. Porto Alegre, 2003.

TONELLI, S. M. ; ROMAGNOLI, J. A . & PORRAS, J. A . “*Computer Package for Transient Analysis of Industrial Multiple Effect Evaporators*”, **Journal of Food Engineering**, vol. 12, 267-281, 1990.

WANG, T.; BRIGGS, J. L. Rheological and thermal properties of soybean oil with modified F A compositions. *J. Am. Oil Chem. Soc.*, v. 79 (8), p. 831-836, 2002.

ZANETTI, E. L. S. Industrialização da Soja. In: MIYASAKA, S. & MEDINA, C., ed. *A Soja no Brasil*. Campinas, ITAL, 1981.

APÊNDICE A: A SOJA

A soja é uma planta herbácea pertencente à família das *Leguminosas*. Sua semente não possui amido ou possui em pequeníssima quantidade, mas é muito rica em substâncias proteicas e graxas.

A.1. COMPOSIÇÃO DA SOJA

A soja é composta de proteínas, água, óleo, cinzas e carboidratos. A Tabela (A.1) abaixo mostra uma composição média da soja cultivada nas regiões Sul e Sudeste deste país.

Tabela A.1: *Composição média da soja cultivada nas regiões Sul e Sudeste do Brasil.*

<i>Componentes</i>	<i>Percentagem (%)</i>
Proteína	37,0
Carboidratos	28,3
Óleo	20,0
Água	10,0
Cinzas	4,7

A.1.1. Proteínas

Os aminoácidos constituintes das proteínas que compõem o grão de soja serão apresentados pela Tabela (A.2) abaixo.

Tabela A.2: Composição média dos aminoácidos contidos nas proteínas da soja. (Adaptado de ERICKSON, 1995).

<i>Aminoácidos</i>	<i>Porcentagem média (%)</i>
Alanina	4,225
Arginina	7,450
Ácido Aspártico	12,625
Cistina	2,150
Metionina	1,950
Histidina	2,650
Isoleucina	4,200
Leucina	6,875
Glicina	4,075
Ácido Glutâmico	18,925
Fenilalanina	5,300
Prolina	4,850
Lisina	5,775
Serina	4,750
Treonina	4,000
Triptofano	1,325
Tirosina	3,900
Valina	4,575

Outros constituintes das proteínas são os inibidores. Estes inibidores são as tripsinas que constituem cerca de 0.4 % das proteínas . As tripsinas são compostas por quatro radicais ligados à unidade principal. A Tabela (A.3) demonstra os nomes dos inibidores de acordo com os radicais presentes.

Tabela A.3: Isoflavonas da soja. (Adaptado de ERICKSON, 1995).

<i>Isoflavonas</i>	<i>Radical 01</i>	<i>Radical 02</i>	<i>Radical 03</i>	<i>Radical 04</i>
Geinistein	OH	H	OH	OH
Genistin	o-glucosyl	H	OH	OH
Daidzein	OH	H	H	OH
Daidzin	o-glucosyl	H	H	OH
Glycetein	OH	OCH ₃	H	OH
Glycetein b-glucoside	7-o o-glucosyl	OCH ₃	H	OH

A.1.2. Carboidratos

Dentre os carboidratos presentes na soja encontram-se os monossacarídeos, oligossacarídeos e polissacarídeos. Na Tabela A.4 relacionam-se os açúcares presentes na soja.

Tabela A.4: Carboidratos presentes na soja.

<i>Açúcares</i>	<i>Porcentagem média (%)</i>
Monossacarídeos	
Glucose	Pouco
Oligossacarídeos	
Sucrose	20,14
Raffinose	14,49
Stachyose	16,25
Polissacarídeos	
Arabinan	3,50
Arabinogalactan	28,27
Acidic Polysaccharides	17,30

A.1.3. Óleo

Conforme MARQUEZAN (1988), os óleos e gorduras são constituídos principalmente de ésteres de glicerol, denominados glicerídeos e, em menor quantidade de uma fração não-glicerídica. Os óleos vegetais não refinados contêm triglicerídeos, fosfatídios, esterol, hidrocarbonetos, tocoferóis, ácidos graxos livres, vitaminas A, D e E e traços de metais. A composição do óleo de soja varia em função das características genéticas, técnicas, culturais e do meio ambiente onde é cultivada a soja.

A.1.3.1. ÁCIDOS GRAXOS PRESENTES NOS TRIGLICERÍDEOS

Os triglicerídeos representam em média 96% da composição do óleo de soja. Cada triglicerídeo contém três radicais representados pelos ácidos graxos. Na Tabela (A.5) encontram-se os ácidos graxos que fazem parte da estrutura dos triglicerídeos presentes no óleo de soja.

Tabela A.5: Ácidos graxos na estrutura dos triglicerídeos que compõem o óleo de soja.

<i>Ácidos Graxos</i>	<i>Peso molecular</i>
Láurico	199.30230
Mirístico	228.31576
Palmítico	256.36104
Esteárico	284.40362
<i>Araquídico</i>	312.45160
Oleico	282.39038
Linoleico	280.37444
Linolênico	278.35850

A.1.3.2. ÁCIDOS GRAXOS LIVRES

Os ácidos graxos livres compõem aproximadamente 0,3-0,7% do óleo de soja. Na Tabela (A.6) encontram-se os ácidos graxos saturados e insaturados.

Tabela A.6: Ácidos Graxos livres presentes no óleo de soja.

<i>Ácidos graxos</i>	<i>Percentagem média (%)</i>
Saturados	
Láurico	0,1
Mirístico	0,2
Palmítico	11,7
Esteárico	4,1
Oleico	23,8
Linoleico	51,8
Linolênico	7,8

O óleo de soja é altamente insaturado, classificado como semi-secante, e por isso utilizado nas indústrias de tintas, vernizes e sabão.

A.1.3.3. FOSFATÍDEOS

Os fosfatídeos não são desejáveis no óleo de soja porque escurecem o óleo. Os fosfatídeos que podem estar presentes no óleo de soja são *phosphatidyl choline*, *phosphatidyl ethanolamine*, *phosphatidyl inositol*, *phosphatidic acid* e outros, como mostrado na Tabela (A.7).

Tabela A.7: Fosfatídeos que podem estar presentes no óleo de soja.

<i>Fosfatídeos</i>	<i>Percentagem média (%)</i>
<i>phosphatidylcholine</i>	35
<i>phosphatidylethanolamine</i>	25
<i>phosphatidylinositol</i>	15
<i>phosphatidicacid</i>	10
Outros	15

A.1.3.4. ESTERÓIS

Dentre os esteróis existem quatro classes que podem estar presentes no óleo de soja: esteróis livres, esterificados, glicolisados ou acilados. Os esteróis representam cerca de 0.5% da composição do óleo e os mais importantes estão representados na Tabela (A.8).

Tabela A.8: Esteróis normalmente presentes no óleo de soja.

<i>Esterol</i>	<i>Peso molecular</i>
Ergosterol	396.53768
β -sitosterol	414.59220
Stigmasterol	412.57626
Campesterol	361.52555

A.1.3.5. Tocoferóis

Os tocoferóis representam a vitamina E presente no óleo de soja. A vitamina E é o mais importante antioxidante biológico lipossolúvel. A vitamina E é extremamente importante e é produzida para ser adicionada a ração animal, produtos farmacêuticos, no setor de alimentos e no setor cosmético. Ela é produzida por indústrias como a BASF (Alemanha), Hoffmann-La Roche, Rhône-Poulenc (França), Eisai (Japão), ADM e Henkel (Estados Unidos). Dentre os tocoferóis presentes no óleo de soja encontram-se o alfa, beta, gama e delta-tocoferol.

A.1.3.6. HIBROCARBONETOS

Os hidrocarbonetos estão presentes em pequena quantidade no óleo de soja representando cerca de 0.014%. A maior parte destes hidrocarbonetos é representado pela vitamina β -caroteno e *xantophill*.

A.1.3.7. Metais

Os metais também estão presentes em pequena quantidade no óleo de soja e são normalmente compostos de ferro e cobre.

A.1.3.8. Cinzas

As cinzas compõem aproximadamente de 4,7% na composição da soja. Na Tabela (A.9) encontra-se a composição da cinza existente na soja.

Tabela A.9: Composição da cinza na soja.

<i>Cinzas</i>	<i>Percentagem média (%)</i>
Cálcio	9.14
Fósforo	22.43
Ferro	0.34
Sódio	0.20
Potássio	67.88
Cobre	Traços

APÊNDICE B: MÉTODOS DE SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

Nesta seção são revistos alguns métodos, comumente empregados na solução numérica de equações diferenciais ordinárias ou ainda na descrição de equações diferenciais parciais. Entre as várias referências com respeito à solução de equações diferenciais numericamente (HAMMING, 1973).

B.1. Método de Diferenças Finitas

O método das diferenças finitas pode ser empregado para as soluções de problemas de valor inicial e de problemas de valor de contorno, envolvendo equações diferenciais ordinárias ou parciais. Se aplicado à equações diferenciais ordinárias, o método das diferenças finitas gera equações algébricas e se aplicado à equações diferenciais parciais gera equações diferenciais ordinárias.

A aplicação do método das diferenças finitas pode ser dividida em três etapas. A primeira etapa consiste na discretização do domínio da variável independente, ou seja, em sua divisão em subdomínios uniformes (subdomínios de mesma dimensão) ou não uniformes. A segunda etapa consiste na geração de aproximações para as derivadas das variáveis dependentes e, a terceira etapa, na introdução destas expressões de diferenças na equação diferencial que se deseja solucionar.

B.1.1 - Aproximação de derivadas por diferenças

Um modo simples de se obter aproximações para as derivadas é através da série de Taylor em torno de um dado ponto. Chamando-se esse ponto de referência de x_j , pode-se obter o valor da variável dependente $y(x_{j+1}) = y_{j+1}$ pela seguinte série infinita:

$$y_{j+1} = y_j + \dot{y}_j(x_{j+1} - x_j) + \ddot{y}_j \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{2!} + \ddot{\ddot{y}}_j \frac{(x_{j+1} - x_j)^3}{3!} + y_j^{(4)} \frac{(x_{j+1} - x_j)^4}{4!} + \dots \quad (\text{B.1})$$

O valor de $y(x_{j-1}) = y_{j-1}$ pode ser dado por:

$$y_{j-1} = y_j - \dot{y}_j(x_{j-1} - x_j) + \ddot{y}_j \frac{(x_{j-1} - x_j)^2}{2!} - \ddot{\ddot{y}}_j \frac{(x_{j-1} - x_j)^3}{3!} + y_j^{(4)} \frac{(x_{j-1} - x_j)^4}{4!} - \dots \quad (\text{B.2})$$

Substituindo-se a diferença $(x_j - x_{j-1})$ por h_j e multiplicando-se a Expressão (B.1) por h_j^2 e a Expressão (B.2) por h_{j+1}^2 e fazendo-se a diferença entre as expressões resultantes de tais multiplicações chega-se à seguinte expressão para a derivada primeira:

$$\dot{y}_j = \frac{h_j^2 y_{j+1} + (h_{j+1}^2) y_j - h_{j+1}^2 y_{j-1}}{h_j^2 h_{j+1} + h_j h_{j+1}^2} + O\left(\frac{h_j^2 h_{j+1}^3 + h_j^3 h_{j+1}^2}{h_j^2 h_{j+1} + h_j h_{j+1}^2}\right) \quad (\text{B.3})$$

Onde: $O(w)$ indica que o erro cometido na aproximação da derivada tem a ordem de grandeza w . Esse erro advém do truncamento da série de Taylor.

Em uma malha uniforme tem-se que $h_j = h$ para todo o j , de modo que a Expressão (B.3) passa a assumir a forma:

$$\dot{y}_j = \frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2h} + O(h^2) \quad (\text{B.4})$$

que é conhecida como aproximação por diferença central para a derivada primeira de y .

As Equações (B.1) e (B.2) podem ainda ser manipuladas para se obter outras duas expressões de diferenças. São elas:

Expressão de diferenças para trás (*backward difference*):

$$\dot{y}_j = \frac{y_j - y_{j-1}}{h} + O(h) \quad (\text{B.5})$$

Expressão de diferenças para frente (*forward difference*):

$$\dot{y}_j = \frac{y_{j+1} - y_j}{h} + O(h) \quad (\text{B.6})$$

As Equações (B.1) e (B.2) podem ainda ser utilizadas para se obter expressões de diferenças para a derivada segunda. Desse modo, multiplicando-se a Expressão (B.1) por h_j e a Expressão (B.2) por h_{j+1} e somando-se as expressões multiplicadas chega-se a:

$$\ddot{y}_j = \frac{h_j y_{j+1} - (h_j + h_{j+1}) y_j + h_{j+1} y_{j-1}}{h_{j+1} h_j \frac{h_{j+1} + h_j}{2}} - \ddot{y}_j \frac{2}{3!} \frac{h_{j+1}^2 - h_j^2}{h_{j+1} + h_j} - y_j^{(4)} \frac{2}{4!} \frac{h_{j+1}^3 + h_j^3}{h_{j+1} + h_j} + \dots \quad (\text{B.7})$$

O termo da derivada terceira de (B.7) é da ordem de h , ou seja, $O(h)$. Entretanto, se a malha for uniforme, esse termo se anulará e as expressões para diferenças finitas com truncamentos anteriores ao segundo e ao terceiro termos apresentarão erros locais de truncamento iguais e da ordem de h^2 , conforme expressão abaixo:

$$\ddot{y}_j = \frac{y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}}{h^2} + O(h^2) \quad (\text{B.8})$$

que é conhecida como aproximação por diferenças centrais para a derivada segunda de y . Se por outro lado, a malha não for uniforme, os erros serão apenas aproximadamente da ordem de h^2 .

Expressões de diferenças finitas para a derivada segunda mais precisas que a Expressão (B.8) podem ser conseguidas truncando-se a série de Taylor em termos de menor ordem, todavia, aproximações envolvendo mais que três valores funcionais levam à equações algébricas mais difíceis de serem resolvidas.

B.1.2 - Métodos de Euler

Considera-se o seguinte problema de valor inicial, com apenas uma única equação diferencial ordinária de primeira ordem:

$$\dot{y} = f(t, y) \quad (\text{B.9})$$

$$t = 0, y = y_0$$

Utilizando-se a aproximação por diferenças finitas para frente (*forward difference*) (Equação (B.6)) para solucionar a Equação (B.9) para o instante genérico t_j :

$$y_{j+1} = y_j + hf(t_j, y_j) + O(h^2), h = t_{j+1} - t_j \quad (\text{B.10})$$

A Expressão (B.10) representa o método explícito de Euler aplicado à equação $y = \dot{f}(t, y)$. Ela permite que se calcule explicitamente o valor de y no instante $j+1$ conhecido o valor desta função no instante j , com erros da ordem de h^2 , mesmo que a função $f(t, y)$ seja não linear.

Caso se deseje, por outro lado, determinar a solução de (B.9) utilizando-se diferenças finitas para trás (*backward difference*), em acordo com a Expressão (B.5), ter-se à:

$$y_{j+1} = y_j + hf(t_{j+1}, y_{j+1}) + O(h^2), h = t_{j+1} - t_j \quad (\text{B.11})$$

A Expressão (B.11) define o chamado método implícito de Euler. Da mesma forma que para a Expressão (B.10) (método explícito), o erro é da ordem de h^2 . Deve-se notar que para o caso em que a função $f(t,y)$ for não-linear, ou mesmo para o caso linear, a menos que se explicitar y_{j+1} , um método apropriado para a solução de equações algébricas não-lineares será necessário.

B.1.3 - Método de Crank-Nicholson

Utilizando-se diferenças finitas centrais de $y_{j+1/2}$ para a aproximação da derivada de y (Equação (B.9)) no intervalo entre y_{j+1} e y_j , chega-se à seguinte expressão:

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2} [f(t_j, y_j) + f(t_{j+1}, y_{j+1})] + O(h^3), h = t_{j+1} - t_j \quad (\text{B.12})$$

que possibilita o cálculo implícito de y_{j+1} . Este método de resolução de equações diferenciais é conhecido como método Trapezoidal ou Método de Crank-Nicholson. Novamente, o caráter implícito do método leva à necessidade de um método de solução de equações algébricas não-lineares.

B.1.4 - Método Modificado de Euler

Um modo distinto de se resolver a equação implícita (B.12) consiste em se prever y_{j+1} pelo método explícito de Euler (Equação B.10). Isto é:

$$y_{j+1}^P = y_j + hf(t_j, y_j), h = t_{j+1} - t_j \quad (\text{B.13})$$

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2} [f(t_j, y_j) + f(t_{j+1}, y_{j+1}^P)], h = t_{j+1} - t_j \quad (\text{B.14})$$

Assim, gera-se um método explícito em dois estágios do tipo preditor-corretor, conhecido como método modificado de Euler.

Nas Equações de diferenças que se apresentou anteriormente (por exemplo, Equações (B.10), (B.11), (B.12)), a ordem de erro apresentada corresponde ao erro local de truncamento da série de Taylor. O erro global decorrente do truncamento, ou seja, da aplicação de uma determinada expressão de diferenças, é superior a esse erro local.

Considerando-se a integração de y (Equação (B.9)) em N -intervalos iguais, a partir do instante t_0 ao instante t_N , pelo método explícito de Euler (Equação (B.10)). O valor de y no instante final pode ser avaliado por:

$$y_N = y_0 + \sum_{n=0}^{N-1} (y_{n+1} - y_n) = y_0 + \sum_{n=0}^{N-1} hf(t_n, y_n) + NO(h^2) \quad (\text{B.15})$$

Lembrando-se que $N = (t_N - t_0)/h$ chega-se à seguinte expressão:

$$y_N = y_0 + \sum_{n=0}^{N-1} hf(t_n, y_n) + (t_N - t_0)h^{-1}O(h^2) = y_0 + \sum_{n=0}^{N-1} hf(t_n, y_n) + O(h) \quad (\text{B.16})$$

que mostra que o erro global de integração ao se utilizar o método de Euler para integração é da ordem de h . Na verdade, pode-se mostrar que para todos os métodos de integração por diferenças finitas, o erro global terá sempre a ordem do erro local de truncamento menos um.

B.1.5 - Métodos de Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta são tipicamente explícitos e com vários estágios. Estes métodos têm como objetivo projetar, num dado passo, uma alteração na variável dependente que seja uma média ponderada entre as variações calculadas com avaliações distintas da função derivada. Ou seja:

$$y_{j+1} - y_j = \sum_{i=1}^n C_i \Delta y_i \quad (\text{B.17})$$

$$\Delta y_1 = \Delta t f(t_j, y_j) \quad (\text{B.18})$$

$$\Delta y_i = \Delta t f(t_j + \alpha_i, y_j + \beta_i), \quad i > 1 \quad (\text{B.19})$$

onde C_i , α_i e β_i são coeficientes determinados impondo-se a condição de que a Equação (B.17) concorde com a série de Taylor até a precisão desejada.

O leitor atento, se já não o sabia, deve ter percebido que a Equação (B.18) corresponde ao método explícito de Euler. O valor para a variável independente ($t_j + \alpha_i$) é, normalmente, escolhido dentro do intervalo $[t_j, t_{j+1}]$ e β_i é uma combinação linear dos Δy_k anteriores, onde $k=1, 2, \dots, i-1$.

Ao se fazer $n=2$ nas Equações (B.18) – (B.19) obtém-se o método de Runge-Kutta de segunda ordem, que em nada difere do método modificado de Euler, já apresentado. Entre os métodos de Runge-Kutta, os de quarta ordem são, certamente, os mais conhecidos já que têm um compromisso entre aproximação e o número de avaliações da derivada da variável dependente. Assim, para $n = 4$ (R-K de quarta ordem) obtém-se os seguintes valores para as constantes: $C_1 = C_4 = 1/6$, $C_2 = C_3 = 1/3$, $\alpha_2 = \alpha_3 = h/2$, $\alpha_4 = h$, $\beta_2 = \Delta y_1/2$, $\beta_3 = \Delta y_2/2$, $\beta_4 = \Delta y_3$.

B.2 – Erros da Solução Aproximada

A integração numérica por diferenças finitas agrega em si dois tipos básicos de erros: o erro de truncamento e o erro de arredondamento. O erro de arredondamento decorre da limitação da máquina em expressar e tratar números com precisão infinita. Daí, se cuidados não forem tomados, esses erros podem danificar completamente a solução numérica. O erro de truncamento advém de passos anteriores do processo de integração como resultado do erro local de truncamento *da equação de diferenças*.

B.3 – Consistência

Uma equação de diferenças é dita consistente com uma equação diferencial se a diferença entre elas, ou seja, se o erro de truncamento da equação de diferenças tenderem a zero quando o maior elemento de discricção da malha também o fizer.

B.4 – Estabilidade

A estabilidade de integrações numéricas ao se aproximar uma equação diferencial por diferenças finitas está vinculada aos erros de truncamento da equação de diferenças e de arredondamento. Mesmo em problemas nos quais esses erros são desprezíveis, os métodos de solução numérica podem tornar ilimitado o erro cometido na aproximação de equações diferenciais. A estabilidade numérica das soluções de equações de diferenças finitas utilizadas para aproximar derivadas e equações diferenciais difere de acordo com o método utilizado para gerar estas aproximações. Por exemplo, métodos explícitos são considerados condicionalmente estáveis, ou seja, são estáveis apenas sob determinadas condições.

Em problemas de valor inicial, diz-se que uma equação de diferenças é estável se ela leva a uma solução limitada quando a solução exata é limitada e, do mesmo modo, conduz a uma solução ilimitada se a solução exata também o for. Em se tratando de problemas de valor no contorno, diz-se que uma equação de diferenças é estável.

B.5 – Rigidez Numérica

Equações diferenciais ordinárias assim como sistemas de equações diferenciais ordinárias estão sujeitos à rigidez numérica. Abaixo são dadas algumas definições de rigidez que se referem às equações isoladas e aos sistemas:

Quando o passo de variação na variável independente, necessário para estabilidade, for muito menor que o passo de variação necessário para acurácia ou ainda quando esse passo de variação for pequeno o suficiente para tornar significativo o erro de arredondamento diz-se que uma dada equação é rígida;

Se uma equação diferencial ordinária contiver termos transientes que decaiam com velocidades bem distintas diz-se também que esta equação diferencial ordinária é rígida;

Se num sistema de equações diferenciais ordinárias, as variáveis dependentes apresentarem comportamentos transientes bem diferentes, de tal modo que pelo menos um autovalor da matriz jacobiana com parte real negativa seja, em valor absoluto, bem

superior à dos demais autovalores, diz-se que esse sistema de equações diferenciais ordinárias é rígido. O grau de rigidez do sistema é definido pela Equação (B.20) abaixo.

$$\textit{grau de rigidez} = \frac{\max|Re(\lambda_i)|}{\min|Re(\lambda_i)|} \quad (\text{B.20})$$

Um sistema com grau de rigidez de 10 é não rígido, enquanto que um sistema com um grau de rigidez de 10^3 é dito rígido um sistema com grau de rigidez acima de 10^6 é muito rígido.

APÊNDICE C: MONTANDO UMA SIMULAÇÃO NO HYSYS

Para o modelo de sistema de evaporação da miscela, utilizando o software, não temos um modelo específico de evaporadores, sendo que o mesmo deve ser desenvolvido um modelo alternativo para simular o processo de destilação.

Para a elaboração e montagem do processo de evaporação da miscela utilizando o software *HYSYS* na construção de uma simulação, devem-se seguir os seguintes passos: após a instalação do software, ao entrar no simulador de processos *HYSYS* é apresentada a tela mostrada na Figura C.1.

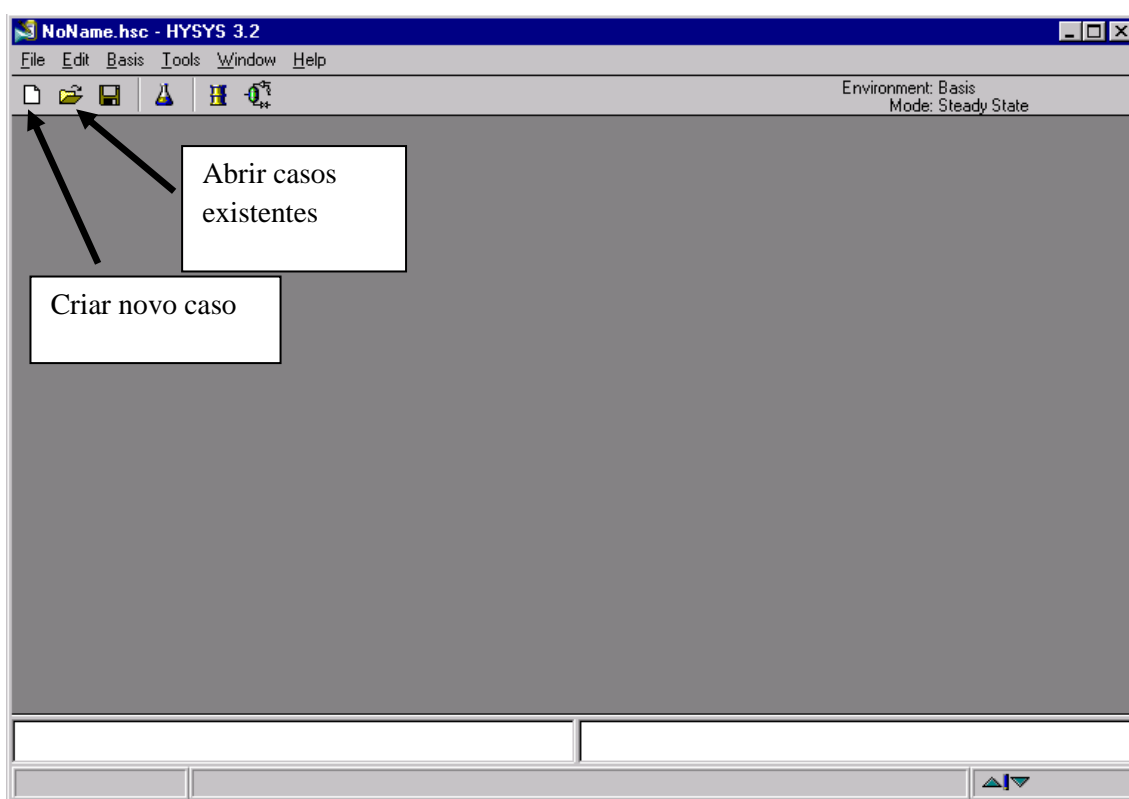


Figura C.1: Primeira tela, na abertura do HYSYS.

Para iniciar uma simulação no HYSYS, devem-se escolher os componentes necessários para a Modelagem e Simulação do Processo, conforme a Figura C.2.

Na parte superior da tela, demonstrada na figura 36, entra-se com o nome do componente desejado no campo *Match*, onde depois de selecionado o componente clica-se em *Add Pure*. Há três opções abaixo do campo *Match* na qual podemos filtrar o tipo de procura de componente.

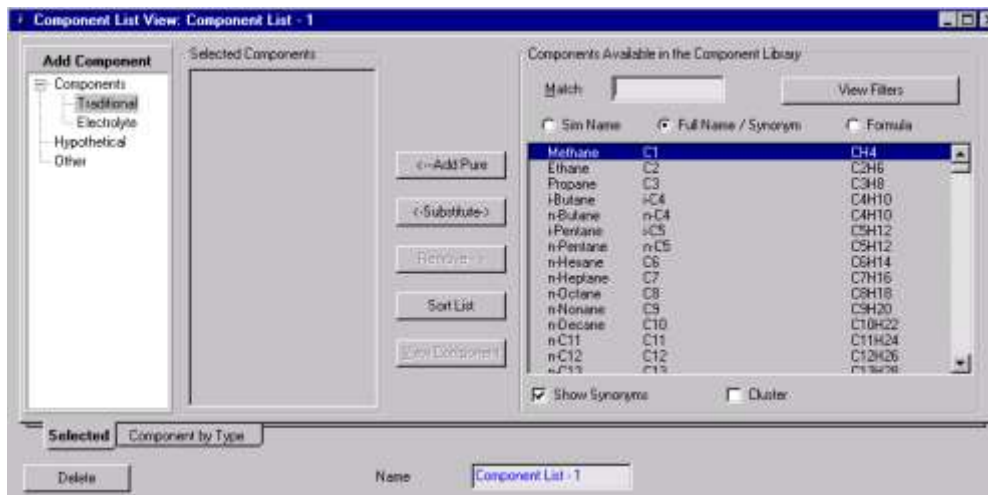


Figura C.2: Escolha de substâncias da composição.

O HYSYS apresenta uma particularidade nesta seção e nas que se seguem nesta fase inicial de montagem da simulação, que não é necessário confirmar a informação, apenas fechar a tela na qual se está trabalhando e os dados escolhidos serão utilizados na simulação.

As próximas telas, apresentadas nas Figuras C.3 e C4, gerenciam as bases termodinâmicas a serem utilizadas nos ambientes de simulação. Clicando na aba inferior denominada Fluid Pkgs temos a tela mostrada na figura C.2, onde se deve escolher a opção *Add* para a escolha de um “pacote termodinâmico” que contem a definição do modelo termodinâmico para equilíbrio de fases, substâncias, parâmetros do modelo, rotinas de estimativa, reações, propriedades físicas particulares do usuário, etc.

Este “objeto” que contem as informações básicas da simulação chamada “pacote termodinâmico”, pode ser salvo e carregado em outras simulações.

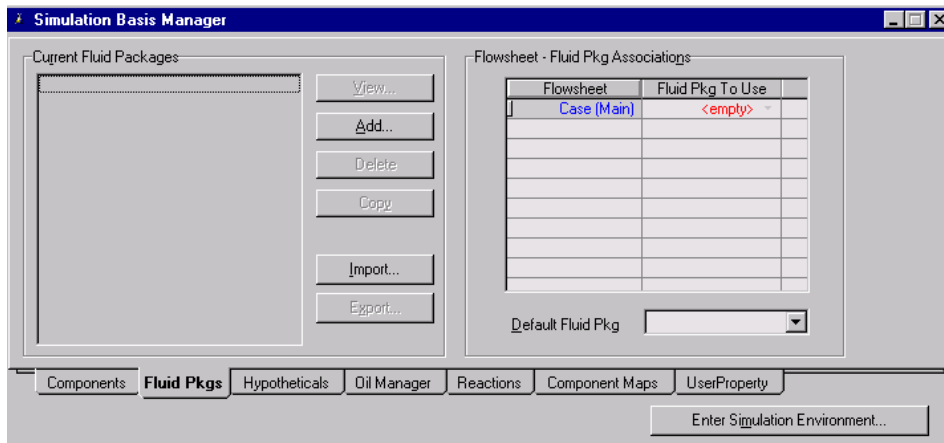


Figura C.3: Adição de um modelo termodinâmico.

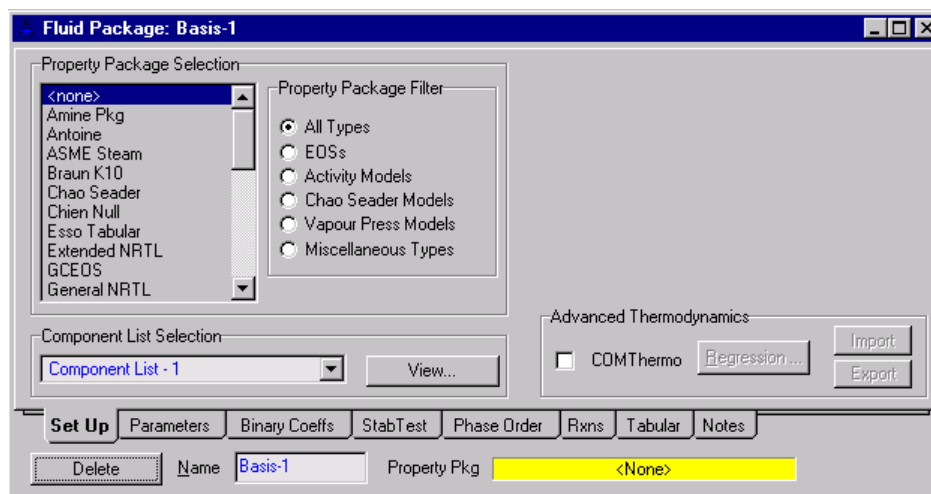


Figura C.4: Escolha do modelo termodinâmico.

Após a escolha dos componentes envolvidos na simulação e do modelo termodinâmico a ser empregado, deve-se clicar no botão *Enter Simulation Environment* para ingressar no ambiente de montagem do modelo de simulação (fluxograma), como ilustra a figura C.5.

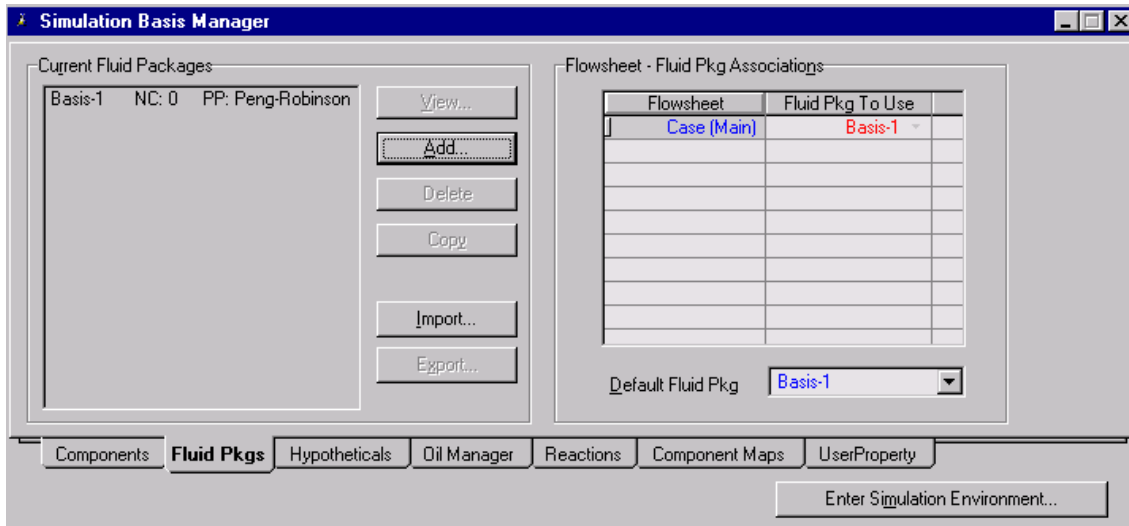
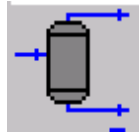


Figura C.5: Entrada ao Ambiente de simulação.

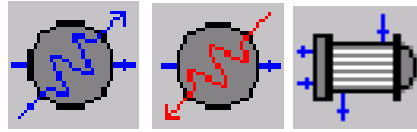
C.1. Principais unidades utilizadas e disponíveis no *HYSYS*

C.1.1. Separadores



- ✓ **Separator** – Em estado estacionário possui múltiplas alimentações, tem como função dividir a mistura em uma fase vapor e uma fase líquida;
- ✓ **3-Phase Separator** – Possui múltiplas alimentações, tem como objetivo dividir a mistura em uma fase de vapor, uma fase de líquidos leves e uma fase de líquidos pesados;
- ✓ **Tank** – Possui múltiplas alimentações, sendo apenas uma líquida, utilizado normalmente para simular vasos de liquefação.

C.1.2. Trocadores de calor



- ✓ **Cooler/Heater** – Estes tipos de trocadores de calor são utilizados quando as operações de aquecimento e resfriamento são trocar de calor unilateral, a corrente de entrada é resfriada (ou aquecida) de acordo com as condições de saída;
- ✓ **Heat Exchangers** – Este tipo de trocador é utilizado para duas correntes. Apresenta modelos de trocadores casco e tubo em co-corrente e em contracorrente.

C.1.3. Compressores



- ✓ **Compressor** – Este tipo de equipamento é utilizado para aumentar a pressão de uma corrente de entrada gás. Dependendo das informações fornecidas, o compressor calcula tanto as propriedades da corrente (temperatura e pressão), quanto à eficiência do compressor.

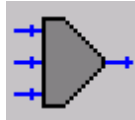
C.1.4. Expansor



- ✓ **Expander** – Este equipamento é utilizado para diminuir a pressão de uma corrente de entrada gás, produzindo uma corrente de saída de gás com menor pressão e maior velocidade. Um processo de expansão promove a conversão da

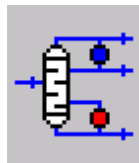
energia interna do gás em energia cinética. O expander pode calcular tanto as propriedades do gás quanto a eficiência do expensor.

C.1.5. Misturador



- ✓ Mixer – Este equipamento é utilizado para combinar duas ou mais correntes de entrada, para produzir apenas uma corrente de saída. O mixer desempenha um balanço completo de massa e energia.

C.1.6. Coluna de destilação



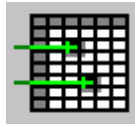
- ✓ **Distillation column** – Fracionamento rigoroso ou aproximado, bi ou trifásico para colunas simples. Apresentam modelos de absorvedores, strippers, destilação reativa, e assim por diante.

C.1.7. Adjust



- ✓ **Adjust** – É a operação que possibilita a variação do valor de uma corrente (variável independente) para determinar um valor exigido ou especificado (variável dependente) em outra corrente ou outra operação.

C.1.8. Spreadsheet



- ✓ **Spreadsheet** – Esta função tem como objetivo aplicar a funcionalidade das planilhas eletrônicas à modelagem de fluxogramas. Podem ser criadas fórmulas matemáticas complexas que usam sintaxe semelhante às planilhas.