

Simulação do processo de destilação da mistura etanol-óleo fúsel utilizando o simulador de processos ProSimPlus

Simulation of the distillation process of the ethanol-oil fusel mix using the ProSimPlus process simulator

Rafael da Silva Eustácio[†], Luana Ferreira da Silva[†], Camila Souza[†], Marisa Fernandes Mendes[†], Miguel Rascado Fraguas Neto[†], Cristiane de Souza Siqueira Pereira^{†‡*}

Como citar esse artigo. Eustácio, RS; da Silva, LF; Souza, C; Mendes, MF; Neto, MRF; Pereira, CSS. Simulação do processo de destilação da mistura etanol-óleo fúsel utilizando o simulador de processos ProSimPlus. Revista Teccen. 2018 Jan./Jun.; 11 (1): 61-67.

Resumo

A destilação de misturas hidroalcoólicas que surgem no processo de produção de etanol por meio da fermentação tem sido bastante aplicada nas indústrias químicas. A separação dos constituintes está baseada nas diferenças de volatilidade, em que uma fase vapor entra em contato com uma fase líquida, e há transferência de massa entre as fases. No processo de produção do etanol, o vinho oriundo da fermentação, possui em sua composição 7 a 10% de etanol, 89% a 93% de água, além de outros componentes, como glicerol, alcoóis superiores, furfural, aldeído acético, dentre outros em baixas concentrações. O principal objetivo da destilação alcoólica, tanto para produção de álcool como para a produção de bebidas destiladas, é a concentração do etanol do vinho até níveis desejados e a redução da concentração de compostos considerados contaminantes dentro do processo. Assim, torna-se necessária a remoção do óleo fúsel, que é um subproduto resultante do processo de destilação do etanol, conhecido por ser sua fração mais pesada, ou seja, menos volátil. O óleo fúsel é denominado como uma mistura de alcoóis superiores, obtida em diversos estágios do processo de destilação do etanol. Sua composição varia conforme o processo de fermentação, sendo o álcool isoamílico o principal componente presente na mistura. O presente trabalho teve como objetivo simular a separação do óleo fúsel no processo de destilação através do software ProSimPlus. Os resultados da simulação foram satisfatórios obtendo-se o etanol como produto de topo praticamente puro e o álcool isoamílico como produto de fundo. A fração molar de etanol no topo foi de 94% e a de álcool isoamílico no fundo foi de 49%, apresentando um resultado eficiente, obtendo um etanol com alta concentração no topo e perdendo-se o mínimo possível de etanol na corrente de fundo.

Palavras-Chave: Destilação; Etanol hidratado; Fermentação; Óleo fúsel.

Abstract

The distillation of hydroalcoholic mixtures that arise in the process of ethanol production through fermentation has been widely applied in the chemical industry. Separation of the constituents is based on differences in volatility, in which a vapor phase comes in contact with a liquid phase, and there is mass transfer between the phases. In the process of producing ethanol, the wine from the fermentation has 7 to 10% ethanol, 89% to 93% water, and other components, such as glycerol, higher alcohols, furfural, acetic aldehyde, among others, in low concentrations. The main objective of alcohol distillation, both for the production of alcohol and for the production of distilled beverages, is to concentrate the ethanol of the wine to desired levels and, at the same time, to reduce the concentration of compounds considered as contaminants within the process. Thus, it is necessary to remove the fusel oil, which is a by-product resulting from the ethanol distillation process known to be its heaviest, ie, less volatile fraction. The fusel oil is termed as a mixture of higher alcohols obtained in various stages of the ethanol distillation process, wherein the composition varies according to the fermentation process, with isoamyl alcohol being the main component present in the blend. Therefore, the present work had as objective to simulate the separation of fusel oil in the distillation process through ProSimPlus software. The results of the simulation were satisfactory yielding the ethanol as the substantially pure top product and the isoamyl alcohol as the bottom product. The molar fraction of ethanol at the top was 94% and that of isoamyl alcohol at the bottom was 49%, yielding an efficient result, obtaining an ethanol with high concentration at the top and losing as little ethanol as possible in the bottom stream.

Keywords: Distillation; Fermentation; Fusel oil; Hydrated ethanol.

Introdução

A destilação é o processo de separação usado na indústria química, também conhecida como

fracionamento ou destilação fracionada. A separação dos constituintes está baseada nas diferenças de volatilidade, em que uma fase vapor entra em contato com uma fase líquida, e há transferência de massa entre as fases. O líquido e o vapor contêm, em geral, os mesmos

Afiliação dos autores: [†] Universidade de Vassouras, Curso de Engenharia Química, Vassouras - RJ, Brasil.

[‡] Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro (UFRRJ), Engenharia Química, Seropédica - RJ, Brasil

[‡] Universidade de Vassouras, Curso de Mestrado em Ciências Ambientais, Vassouras - RJ, Brasil.

* Email para correspondência: crispereirauss@gmail.com

componentes, mas em quantidades relativas diferentes. O líquido está no seu ponto de bolha e o vapor em equilíbrio no seu ponto de orvalho. Ocorre transferência simultânea de massa do líquido pela vaporização, e do vapor pela condensação. O resultado final é o aumento da concentração do componente mais volátil no vapor e do componente menos volátil no líquido (Foust, 1982).

No processo de produção do etanol, o vinho oriundo da fermentação, possui em sua composição 7 a 10% de etanol, 89% a 93% de água, além de outros componentes, como glicerol, alcoóis superiores, furfural, aldeído acético, dentre outros em baixas concentrações. Há ainda sólidos representados por bagacilhos (fragmentos de cana), leveduras e bactérias, açúcares não fermentescíveis, sais minerais, gases dissolvidos, principalmente CO₂ e SO₂. Em seguida, este vinho produzido é enviado para a destilaria onde o etanol hidratado é concentrado em aproximadamente 94% (Silva, 2012).

De acordo com Batista (2008), o principal objetivo da destilação alcoólica é a concentração do etanol do vinho até níveis desejados e, ao mesmo tempo, diminuir a concentração dos congêneres no produto final, até que a concentração dos mesmos alcance os níveis estabelecidos na legislação, ou estejam de acordo com as características sensoriais desejadas.

Diante disso, torna-se necessária a remoção de subprodutos do processo de produção do etanol resultante podendo citar o óleo fúsel conhecido por ser sua fração mais pesada, ou seja, menos volátil. Este é denominado como uma mistura de alcoóis superiores obtida em diversos estágios do processo de destilação do etanol (Barra et al., 2011).

A composição do óleo fúsel varia conforme o processo de fermentação, sendo o álcool isoamílico o principal componente presente em sua composição (60 a 80%). De acordo com a IUPAC (União Internacional da Química Pura e Aplicada), o nome técnico do álcool isoamílico é 3 metil 1 butanol e, este é o álcool de cadeia superior em bebidas alcoólicas (Pubchem, 2017).

Segundo Batista (2008), a retirada do álcool isoamílico é indispensável para o bom funcionamento de uma coluna retificadora e a obtenção de um etanol de boa qualidade. Na coluna retificadora, o óleo fúsel se encontra na região intermediária, em que conforme Barra et al.(2011), sua concentração varia entre 40 a 47% em volume.

O baixo preço do óleo fúsel (R\$0,15 a R\$0,40 o litro) e seu elevado teor de álcool isoamílico, além do elevado volume de óleo fúsel produzido pelo Brasil anualmente, justificam o desenvolvimento de tecnologias para o fracionamento dessa mistura. Sob o ponto de vista técnico-econômico, a utilização do álcool isoamílico presente no óleo fúsel como precursor de ésteres de aroma, bem como ésteres lubrificantes, torna-se uma alternativa atrativa (Lopes et al., 2004, apud

Ferreira, 2012).

No Brasil, a proporção média de óleo fúsel é de 2,5 litros para cada 1000 litros de etanol produzido. A produção brasileira de álcool etílico (anidro e hidratado) da safra de 2010/2011 superou 27 bilhões de litros. Uma produção nessa escala pode gerar em média um total de 67,5 milhões de litros de óleo fúsel por ano (Ferreira, 2012).

Diante disso, o presente trabalho teve como objetivo simular o processo de destilação do etanol+óleo fúsel através do software ProSimPlus. O ProSimPlus é um software de engenharia que realiza balanços de massa e energia para uma ampla gama de plantas de processamento industrial. Fornece possibilidades de simulação para processos nas áreas de petróleo e gás, química, farmacêutica, energia e outras indústrias de processo (Prosimplus, 2017).

Materiais e métodos

Modelagem Termodinâmica

Para a modelagem termodinâmica, considerou-se a formulação “gamma-phi” cálculo do equilíbrio líquido-vapor. O coeficiente de fugacidade (Φ) é um fator introduzido para medir o desvio da fase vapor e, o coeficiente de atividade (γ) é um fator introduzido para medir o desvio da idealidade de um componente na fase líquida. Para o primeiro, optou-se pela equação cúbica de Redlich-Kwong-Soave (SRK) e para o segundo, a formulação UNIFAC-Dortmund, ambas disponíveis no módulo software ProsimPlus.

O modelo termodinâmico foi validado calculando o equilíbrio líquido-vapor no simulador ProsimPlus do sistema binário etanol-água e etanol-álcool isoamílico a 101,3 kPa, este último por ser considerado o componente principal do óleo fúsel.

As Figuras 1 e 2 apresentam os diagramas xy para as misturas binárias etanol-água e etanol – álcool isoamílico. Possível observar que existe uma azetrope no primeiro sistema e a volatilidade relativa do segundo sistema maior.

Sistemas contendo etanol, água e outros alcoóis são bastante estudados. Especificamente, o sistema álcool isoamílico e etanol foi estudado por Martinez, Pereyra & Santiago (2003) e Duran, Córdoba, Gil, Rodriguez & Orjuela (2013) e os resultados obtidos no presente trabalho corroboram os dados obtidos pelos autores citados.

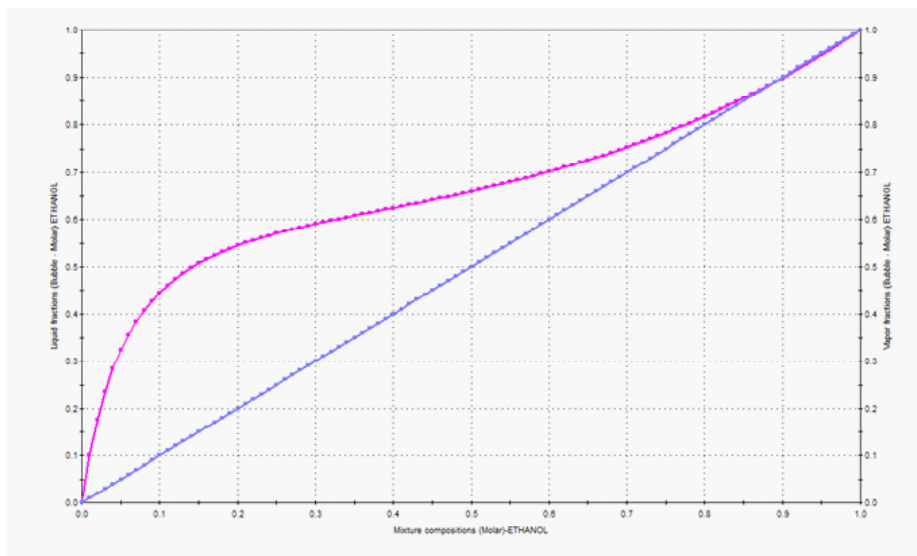


Figura 1. Equilíbrio Líquido-Vapor do sistema etanol – água.

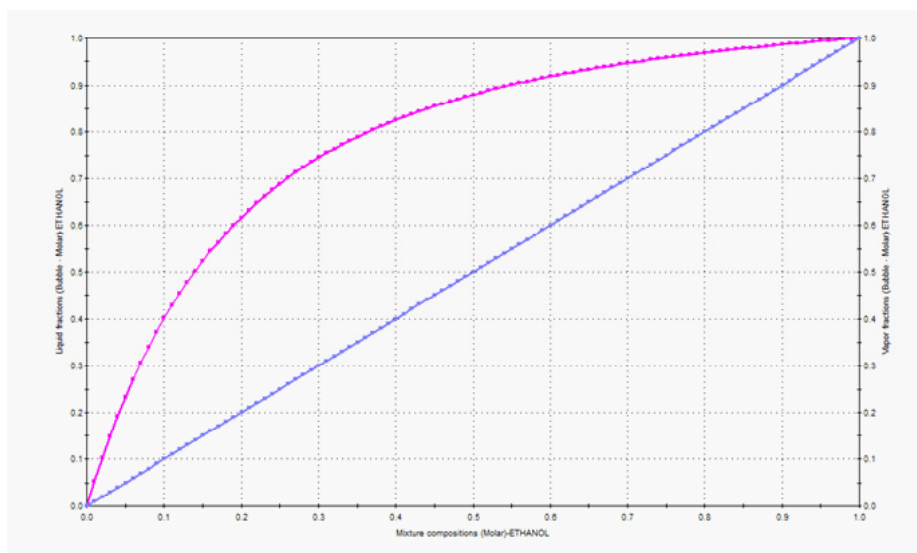


Figura 2. Equilíbrio Líquido-Vapor do sistema etanol @ álcool isoamílico.

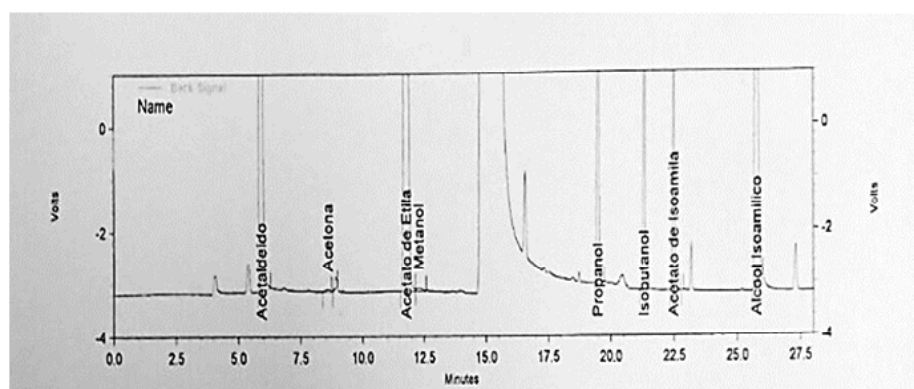


Figura 3. Perfil cromatográfico do vinho.

Simulação do Processo

Através do perfil cromatográfico (Figura 3) obtido em uma indústria de produção de álcool, estabeleceu-se a composição da carga de alimentação inserida no processo de simulação.

A Tabela 1 apresenta a composição deste vinho e a Tabela 2 os componentes de interesse que foram utilizados na simulação. Considerou-se como

componentes de interesse (tabela 2) os compostos alimentados na coluna de retificação de uma planta industrial de produção de álcool.

As condições operacionais da coluna, necessárias à simulação são descritas na Tabela 3. Os dados foram baseados em uma planta de destilação de etanol hidratado, visando maior aproveitamento da carga e melhor qualidade do etanol destilado.

O fluxograma do processo de uma coluna de

Tabela 1. Composição do vinho.

Componentes	Concentração mg/L
Acetaldeído	2,0
Acetona	0,035
Acetato de Etila	5,3
Metanol	2,5
Propanol	2164,6
Isobutanol	1114,0
Acetato de Isoamila	34,0
Álcool Isoamílico	3667,0

Tabela 2. Alimentação de carga.

Componentes	Fração molar
Etanol	0,85
3-metil-1-butanol	0,05
Furfural	0,03
1-propanol	0,02
Água	0,02
Acetaldeído	0,01
Acetato de Etila	0,02

Tabela 3. Condições de operação da coluna de destilação.

Número de estágios	Vazão de alimentação (Kg/s)	Prato de alimentação	Destilado chave pesada	Produto de fundo chave leve	Razão de refluxo
20	5000	5	2%	2%	18

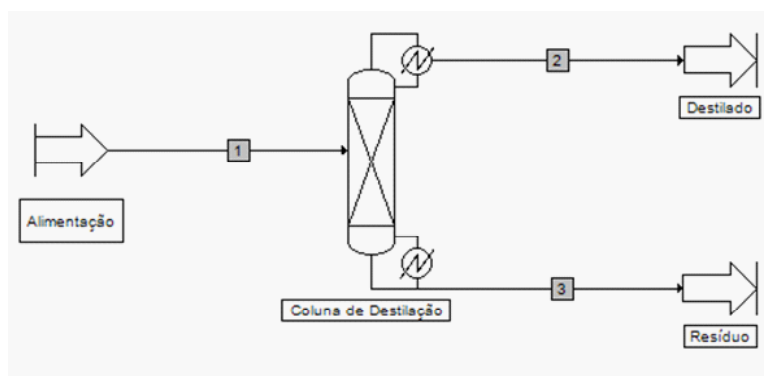


Figura 4. Fluxograma do processo de separação do óleo fúsel.

destilação de etanol para a simulação do processo de separação do óleo fúsel foi elaborado no software ProSimPlus e é apresentado na Figura 4.

Resultados

A tabela 4 apresenta os resultados obtidos com a simulação realizada pelo programa ProsimPlus.

De acordo com os resultados verificou-se que as frases obtidas no topo e fundo das colunas atenderam as expectativas, pois garantiu em etanol praticamente isento de contandade, facilitando a recupeação do óleo fúsel.

Discussão

A eficiência do resultado da simulação também foi observada na pequena perda de etanol, visto que o

produto do topo apresentou 94% de etanol e o produto do fundo 0,15%.

Também foi possível prever nesta simulação a separação e recuperação do álcool isoamílico, que é um dos principais componentes do óleo fúsel, visto que a fração molar de etanol no topo foi de 94%, enquanto que o álcool isoamílico concentrou-se em maior parte no fundo, com fração molar de 49%. Vale ressaltar, que na prática o óleo fúsel tende a permanecer na zona intermediária da coluna devido ao seu ponto de ebulição e a imiscibilidade com a água, entretanto nesta simulação não foi possível dividir a coluna em zonas, e sim, em topo e base.

Os resultados obtidos na simulação foram comparados com os resultados obtidos por Marquini *et al.* (2007) e com os dados experimentais fornecidos por uma empresa de destilação. Os resultados comparativos são apresentados na Tabela 5 e Figura 5. Observe-se que o simulador reproduziu com confiabilidade o processo

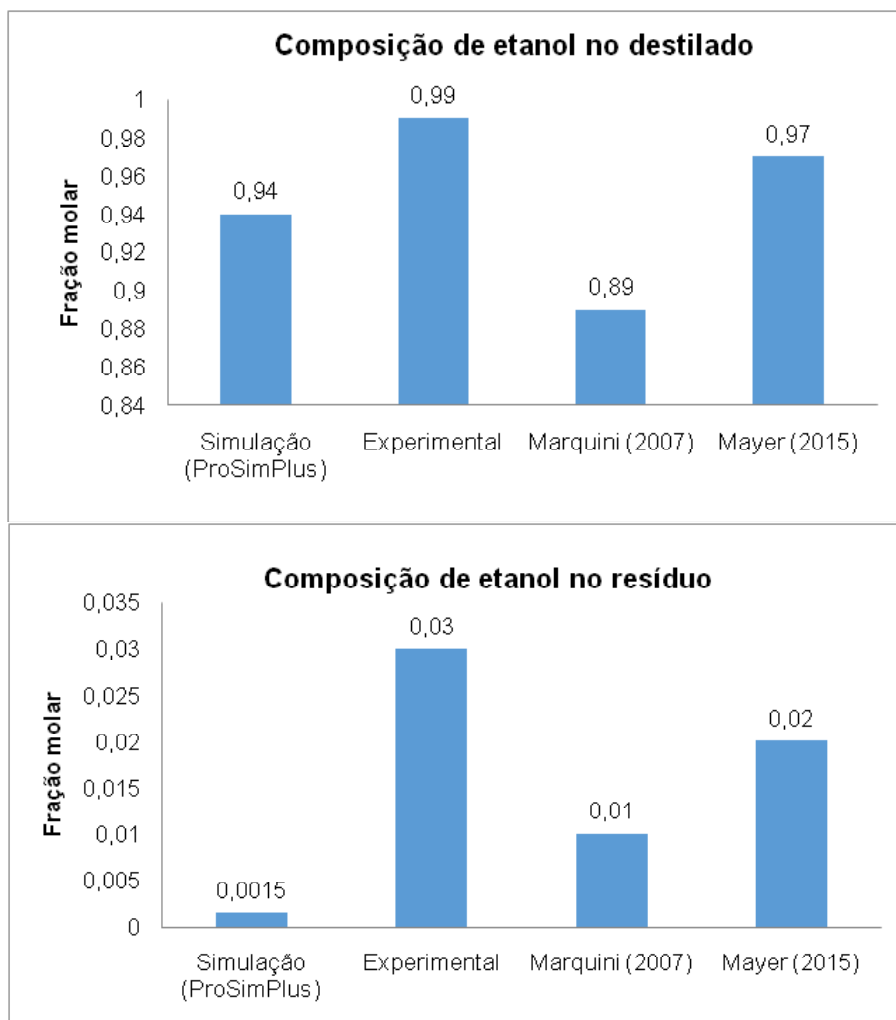
Tabela 4. Resultados da simulação do processo de separação do óleo fúsel.

Componentes	Fração Molar Destilado	Fração Molar Resíduo
Etanol	0,94	1,49E-03
Álcool Isoamílico	1,64E-07	0,49
Acetaldeído	1,11E-2	0
Acetato de Etila	2,22E-02	9,20E-10
Furfural	3,02E-07	2,90E-01
Água	2,22E-02	3,60E-07
Propanol	1,65E-04	1,90E-01

Tabela 5. Comparação da composição do destilado e produto de fundo no processo de destilação do etanol.

Componentes	Simulação (ProsimPlus)		Resultados Experimentais*		Marquini (2007)	
	Topo	Fundo	Topo	Fundo	Topo	Fundo
Etanol	0,94	1,49E-03	0,99	0,03	0,89	5,00E-03
Álcool Isoamílico	1,64E-07	0,49	0,08	0,51	0	2,33E-15
Acetaldeído	1,11E-02	0	0,02	4,19E-02	0	0
Acetato de Etila	2,22E-02	9,2E-10	0,02	1,74E-01	0	0
Furfural	3,02E-07	0,29	-	-	-	-
Água	2,22E-02	3,60E-7	-	-	0,11	0,99
Propanol	1,65E-04	0,19	0,47	1,43E-01	2,8E-11	4,87E-06

* Dados fornecidos por uam empresa de produtos destilados (nome confidencial).

**Figura 5.** Composição de etanol na corrente de topo (destilado) e de fundo (resíduo).

em questão.

Conclusão

Pode-se observar que a simulação do processo de destilação da mistura etanol+óleo fúsel apresentou-se satisfatória obtendo-se etanol praticamente isento de “contaminantes”, com alta concentração do etanol no topo, enquanto que a corrente de fundo teve maior concentração do álcool Isoamílico, um dos principais componentes do óleo fúsel, prevendo a recuperação e separação deste.

As condições e parâmetros estipulados para a coluna de destilação foram favoráveis para este resultado.

Referências

Barra, A. R. C.; Boaventura, B. S.; Leal, D. M. N.; Queiroz, F. O.; Pereira, G. B. L. R.; Souza, L. C.; Ferreira, D.C. (2011). Óleo fúsel: caracterização e aplicações.

Batista, F. R. M. (2008). Estudo do processo de destilação alcoólica contínua: Simulação de Plantas Industriais de Produção de Álcool Hidratado, Álcool Neutro e Cachaça.

Duran, J. A., Córdoba, F. P., Gil, I. D., Rodríguez, G., & Orjuela, A. (2013). Vapor–liquid equilibrium of the ethanol+ 3-methyl-1-butanol system at 50.66, 101.33 and 151.99 kPa. *Fluid Phase Equilibria*, 338, 128-134.

Mayer, F. D., Feris, L. A., Marcilio, N. R., Staudt, P. B., Hoffmann, R., & Baldo, V. (2015). Influence of fusel oil components on the distillation of hydrous ethanol fuel (HEF) in a bench column. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 32(2), 585-593.

Marquini, M. F. (2007). Simulação e análise de um sistema industrial de colunas de destilação.

Martínez de la Ossa, E., Pereyra, C., & Santiago, I. (2003). Vapor– liquid equilibrium of the ethanol+ 2-methyl-1-butanol system. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 48(1), 14-17.

Ferreira, M. C. (2012). Estudo do processo de destilação de óleo fúsel.

Foust, A. *Princípios das Operações Unitárias*. 2ª edição. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, c1980, 1982.

PROSIMPLUS (2017). ProSimPlus Library (Standard version + rate base option). Disponível em: <<http://www.prosim.net/bibliotheque/File/Brochures/Unit-Operations-ProSimPlus-Library-3-5-11.pdf>>. Acesso em: 10/10/17.

PUBCHEM. 3-Methyl-1-butanol. Disponível em: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/3-Methyl-1-butanol#section=Top>>. Acesso em: 11/10/2017

Silva, J. I. S. D. (2012). Simulação dinâmica do processo de destilação de bioetanol em simulador baseado em equações (EMSO).