



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Faculdade de Engenharia Química (FEQ)

IGOR LUCAS RODRIGUES DIAS

DESENVOLVIMENTO DE SISTEMA DE VÁCUO E CONDENSAÇÃO PARA RECUPERAR
ACETONA-BUTANOL-ETANOL DE CALDOS FERMENTATIVOS

Campinas

2021

IGOR LUCAS RODRIGUES DIAS

DESENVOLVIMENTO DE SISTEMA DE VÁCUO E CONDENSAÇÃO PARA
RECUPERAR ACETONA-BUTANOL-ETANOL DE CALDOS FERMENTATIVOS

Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas, como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Adriano Pinto Mariano

Co-orientador: Dr. Jean-Christophe Stefen Gilles Bonhivers

ESTE TRABALHO CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELO ALUNO IGOR LUCAS RODRIGUES DIAS, E ORIENTADO PELO PROF. DR. ADRIANO PINTO MARIANO.

Campinas

2021

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura
Rose Meire da Silva - CRB 8/5974

D543d Dias, Igor Lucas Rodrigues, 1994-
Desenvolvimento de sistema de vácuo e condensação para recuperar acetona-butanol-etanol de caldos fermentativos / Igor Lucas Rodrigues Dias. – Campinas, SP : [s.n.], 2021.

Orientador: Adriano Pinto Mariano.
Coorientador: Jean-Christophe Stefen Gilles Bonhivers.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Fermentação. 2. Vácuo. 3. Condensação. 4. Butanol. 5. Simulação de processos. 6. Integração energética. 7. Análise econômica. I. Mariano, Adriano Pinto, 1978-. II. Bonhivers, Jean-Christophe Stefen Gilles, 1969-. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Development of a vacuum and condensation system to recover acetone-butanol-ethanol from fermentation broths

Palavras-chave em inglês:

Fermentation

Vacuum

Condensation

Butanol

Process simulation

Energy integration

Economic analysis

Área de concentração: Engenharia Química

Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora:

Adriano Pinto Mariano [Orientador]

Rubens Maciel Filho

Valdir Apolinário de Freitas

Data de defesa: 04-08-2021

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)

- ORCID do autor: <https://orcid.org/0000-0002-2520-3459>

- Currículo Lattes do autor: <http://lattes.cnpq.br/0330096585114094>

Folha de Aprovação da Dissertação de Mestrado de IGOR LUCAS RODRIGUES DIAS, aprovada em 04 de agosto de 2021 pela comissão examinadora da defesa constituída pelos doutores:

Prof. Dr. Adriano Pinto Mariano (Presidente e Orientador)

FEQ/UNICAMP

Videoconferência

Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

FEQ/UNICAMP

Videoconferência

Dr. Valdir Apolinário de Freitas

Rhodia Solvay Group

Videoconferência

A Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria do Programa da Unidade.

Dedico este trabalho à minha amada avó, Antônia.

Agradecimentos

A Deus.

À minha família, especialmente à minha mãe Kelly.

Aos meus amigos que conheci em Campinas, em especial, Michelli, Nadia, Silvio, Felipe Matheus, Felipe Feltrin, Elaine, Michelle, Marcela, Ana Luisa, Ana Gabriela, Alessandra, Daniel, Andressa, Ercília e irmãos da IPBG.

Aos meus amigos de longa caminhada, em especial, Guilherme, Sophia, Leonardo, Matheus, Ana, Dayse, Fernanda, amigos do COLTEC e irmãos da PIBB.

Aos meus orientadores, Prof. Dr. Adriano e Dr. Jean-Christophe.

Aos membros da comissão examinadora da defesa, Prof. Dr. Rubens e Dr. Valdir.

À Faculdade de Engenharia Química (FEQ) da Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP).

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), processo nº 2019/03019-0 vinculado ao Projeto Temático nº 2015/20630-4, pelo financiamento do Projeto de Pesquisa tornando possível a produção desta dissertação.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

O presente trabalho foi realizado com apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Destacamos que as opiniões, hipóteses e conclusões ou recomendações expressas neste material são de responsabilidade dos autores e não necessariamente refletem a visão da FAPESP, da CAPES e do CNPq.

Bactérias do gênero *Clostridia* responsáveis pela fermentação ABE (Acetona-Butanol-Etanol) sofrem forte inibição pelo butanol, resultando em processos diluídos com baixa eficiência energética e volume excessivo de vinhaça. Uma forma de resolver esse problema é com o uso de tecnologias de fermentação com recuperação integrada de produtos. Entre estas, destaca-se a fermentação a vácuo devido à sua simplicidade. Contudo, estudos anteriores demonstram que a etapa de condensação dos vapores gerados durante a ebulição do caldo fermentativo consome muita energia elétrica, o que encarece muito o processo. Para tentar resolver esse problema da fermentação a vácuo, desenvolvemos um sistema de condensação que se baseia em ejetores operados com solvente orgânico para a geração do vácuo. O solvente orgânico é o etileno glicol que pode ser reaproveitado na etapa de purificação dos produtos pela destilação extrativa. Foram propostas diferentes configurações para o processo com ejetores a vapor de etileno glicol. Ainda, desenvolvemos outros cenários utilizando ejetores a vapor de água e compressores. Os estudos foram realizados via simulação computacional (Aspen Plus®) e a eficiência de cada processo proposto (fermentação a vácuo/condensação/destilação) foi avaliada mediante análises energética (análise *pinch*) e econômica. A substituição de compressores por ejetores reduz muito o consumo de eletricidade, porém aumenta a demanda de outras utilidades. De todos os processos desenvolvidos, a planta com apenas compressores apresentou o menor custo total (209.8 US\$/ton butanol) seguida da planta com ejetores a vapor de etileno glicol (233.7 US\$/ton butanol). Ambos os casos foram mais econômicos que o processo convencional sem vácuo (235.3 US\$/ton butanol). A vantagem dos novos processos é ainda maior para custos menores de eletricidade e custos altos de investimento. Concluímos que a fermentação ABE a vácuo do tipo *flash* com compressor e/ou ejetor a vapor de etileno glicol tem potencial de apresentar um custo total inferior ao processo convencional sem vácuo, desde que haja integrações energéticas. Além dos benefícios econômicos, as plantas desenvolvidas são mais compactas e causam um menor impacto ambiental com a fertirrigação excessiva de vinhaça.

Palavras-chave: Fermentação a vácuo; ejetor; compressor; butanol; etileno glicol.

Abstract

Solventogenic *Clostridium* species responsible for the ABE fermentation (Acetone-Butanol-Ethanol) are strongly inhibited by butanol, resulting in dilute processes with low energy efficiency and large stillage production. Possible solutions include fermentation technologies with integrated product recovery. Among these technologies, vacuum fermentation attracts attention due to its simplicity. However, previous studies have demonstrated that the energy cost to condensate the vapors generated during the boiling of the fermentation broth is prohibitive. To try to solve this problem of vacuum fermentation, we developed a condensation system based on ejectors operated with an organic solvent to generate the vacuum. The organic solvent is ethylene glycol, which is reused in the product purification step by distillation. Different configurations have been proposed for the process with ethylene glycol ejectors. Moreover, we developed other scenarios using steam ejectors and compressors. Studies were conducted using process simulation in Aspen Plus®, and the efficiency of the proposed process (vacuum fermentation/condensation/distillation) was assessed by energy (pinch analysis) and economic analyses. Replacing compressors with ejectors significantly reduces electricity consumption but increases the demand for other utilities. Of all the processes developed, the plant with only compressors had the lowest total cost (209.8 US\$/ton butanol) followed by the plant with ethylene glycol steam ejectors (233.7 US\$/ton butanol). Both cases were more economical than the conventional process without vacuum (235.3 US\$/ton butanol). The advantage of the new processes is even greater for lower electricity costs and high investment costs. We conclude that ABE fermentation in a vacuum flash type with compressor and/or ethylene glycol ejector has the potential to have a total cost lower than the conventional process without vacuum if there are energetic integrations. In addition to the economic benefits, the plants developed were compact and cause less environmental impact with excessive fertigation of the stillage.

Keywords: Vacuum fermentation; ejector; compressor; butanol; ethylene glycol.

Lista de Figuras

Figura 1. Rota metabólica simplificada da fermentação ABE promovida pelas bactérias do gênero <i>Clostridium</i> .	22
Figura 2. Produção de butanol (fermentação ABE) em uma fermentação a vácuo convencional.	25
Figura 3. Produção de butanol (fermentação ABE) em uma fermentação a vácuo do tipo <i>flash</i> .	25
Figura 4. Linha do tempo com alguns estudos sobre a fermentação a vácuo do grupo de pesquisa.	26
Figura 5. Diagrama de fases do butanol e água à pressão atmosférica gerado no <i>Aspen Plus®</i> pelo modelo UNIQUAQ.	27
Figura 6. Custo operacional para uma planta de fermentação ABE convencional e utilizando a fermentação a vácuo (Assumpção et al., 2018).	29
Figura 7. Representação esquemática de um ejetor típico e suas partes.	31
Figura 8. Perfil de velocidade e pressão dos fluidos em um ejetor.	33
Figura 9. Associação de ejetores em série sem condensador.	34
Figura 10. Associação de ejetores em série com condensador.	34
Figura 11. Ejetor e suas partes. Na concepção de Huang e colaboradores (1999) os fluidos se misturam entre as seções y e m.	35
Figura 12. Escoamento do fluido primário pelo bocal.	37
Figura 13. Escoamento do fluido primário da seção 1 até a y.	38
Figura 14. Escoamento do fluido secundário da câmara de sucção até a seção y.	38
Figura 15. Delimitação das regiões na seção de área constante.	39
Figura 16. Delimitação da seção y.	39
Figura 17. Região de mistura dos fluidos.	40
Figura 18. Escoamento do fluido misturado da seção m até a 3.	41
Figura 19. Escoamento do fluido misturado da seção m até a 3.	41
Figura 20. Componentes utilizados na simulação no <i>Aspen Plus®</i> .	45
Figura 21. Fluxograma do processo estudado no projeto.	48
Figura 22. Fluxograma em blocos no <i>Aspen Plus®</i> .	48
Figura 23. Fluxograma da Unidade 1 simulada no <i>Aspen Plus®</i> .	49
Figura 24. Fluxograma da Unidade 2 simulada no <i>Aspen Plus®</i> .	51

Figura 25. Identificação das seções no ejetor.	52
Figura 26. Bloco fictício de um misturador representando o ejetor no Aspen Plus®.	57
Figura 27. Definição das variáveis importadas e exportadas no <i>Calculator Block</i> no Aspen Plus®.	58
Figura 28. Inserção do código no Aspen Plus®.	58
Figura 29. Código Fortran 77 completo contendo a modelagem dos ejetores implementado no simulador.	59
Figura 30. Fluxograma com 2 estágios de ejetores Aspen Plus®.	61
Figura 31. Fluxograma com 3 estágios de ejetores Aspen Plus®.	61
Figura 32. Sistema de ejetores com 4 estágios Aspen Plus®.	61
Figura 33. Sistema com dois estágios de ejetores e um condensador após primeiro ejetor no Aspen Plus®.	63
Figura 34. Sistema com três estágios de ejetores e um condensador após primeiro ejetor no Aspen Plus®.	63
Figura 35. Sistema com três estágios de ejetores e um condensador após segundo ejetor no Aspen Plus®.	64
Figura 36. Sistema com três estágios de ejetores e um condensador após primeiro e segundo ejetores no Aspen Plus®.	64
Figura 37. Purificação de produtos integrada com a recuperação do solvente.	65
Figura 38. Fluxograma da Unidade 4 simulada no Aspen Plus®.	67
Figura 39. Simulação do processo com compressores no Aspen Plus®.	71
Figura 40. Simulação da destilação convencional no Aspen Plus®.	72
Figura 41. Definição da variação mínima de temperatura e das áreas de integração no Aspen Plus®.	73
Figura 42. Exemplo do cálculo do custo de uma torre de destilação no Aspen Plus®.	78
Figura 43. Exemplo do cálculo do CAPEX total e anualizado no Aspen Plus®.	79
Figura 44. Exemplo do cálculo do OPEX no Aspen Plus®.	81
Figura 45. Curva de equilíbrio Líquido-Vapor para a mistura butanol e água à 50.07 °C.	83
Figura 46. Diâmetro D_3 do ejetor para diferentes condições de vazão e pressão de etileno glicol.	86
Figura 47. Pressão de saída do ejetor para diferentes condições de vazão e pressão de etileno glicol.	86
Figura 48. Curva de pressão de saturação para o etileno glicol.	87

Figura 49. Variação do fator de compressão de cada ejetor FC_{ej} para diferentes números de ejetores.....	88
Figura 50. Sistemas com múltiplo estágios de ejetores sem condensador.	88
Figura 51. Vazão de etileno glicol ao longo dos estágios para um sistema com 4 ejetores. ...	90
Figura 52. Sistemas com múltiplo estágios de ejetores com condensador.....	91
Figura 53. Vazão total de etileno glicol e energia do condensador para os casos A-X-BC e AB-X-C.	92
Figura 54. Vazão de etileno glicol (MP) para diferentes frações de vapor do primeiro condensador (FV1) e do segundo condensador (FV2).	92
Figura 55. Fluxograma da Unidade 3 simulada no Aspen Plus®.	94
Figura 56. Fluxograma do processo proposto neste projeto.....	96
Figura 57. Fluxograma do processo com compressores.....	102
Figura 58. Potencial de economia de utilidades com a integração.....	107
Figura 59. CAPEX total para os casos com ejetor e com compressor.	108
Figura 60. CAPEX de cada tipo de equipamento para os casos com ejetor e com compressor.	109
Figura 61. OPEX discriminado para os casos com ejetor e com compressor.	109
Figura 62. Custo de utilidades para os casos com ejetor e com compressor sem e com integração energética.....	110
Figura 63. Custo total anualizado para os casos com ejetor e com compressor.....	111
Figura 64. Equipamentos que encarem o processo de ejetores.	112
Figura 65. Efeito da variação da fração de vapor do condensador E-301 sobre custos.	113
Figura 66. Efeito da variação da fração de vapor do condensador E-301 sobre a vazão de etileno glicol.	113
Figura 67. Propostas para solucionar problemas na planta de ejetores.	115
Figura 68. Fluxograma do cenário 2.....	116
Figura 69. Fluxograma do cenário 3.....	117
Figura 70. Fluxograma do cenário 4.....	117
Figura 71. Fluxograma do cenário 5.....	118
Figura 72. Fluxograma do cenário 6.....	119
Figura 73. Fluxograma do cenário 7.....	119
Figura 74. Custo de investimento (CAPEX) de todos os cenários.....	121

Figura 75. Potencial de redução de custos operacionais (CAPEX) de todos os cenários obtidos pela integração energética.	122
Figura 76. Custos operacionais (OPEX) de todos os cenários após integração energética...	123
Figura 77. Custo total de todos os processos após integração energética. Para o cenário sem vácuo, foi inserido o erro referente ao intervalo de produtividade de 0.2 a 0.5 g butanol/L.h.	125
Figura 78. Variação do custo de eletricidade.	126
Figura 79. Variação do CAPEX.	127

Lista de Tabelas

Tabela 1. Tecnologias de recuperação para a fermentação ABE.	24
Tabela 2. Propriedades do $\text{CH}_{1,8}\text{O}_{0,5}\text{N}_{0,2}$ inseridas no Aspen Plus®.	46
Tabela 3. Propriedades adicionadas como resposta da simulação.	47
Tabela 4. Rendimento e conversões globais de glicose calculadas para as reações de 1 a 6. .	50
Tabela 5. Utilidades definidas no processo.	73
Tabela 6. Constantes e unidades conforme CAPCOST.	76
Tabela 7. Dados para o cálculo do fator de correção conforme CAPCOST.	77
Tabela 8. Custo de utilidades.	80
Tabela 9. Azeótropos no sistema à pressão de 1 atm.	84
Tabela 10. Resultado das simulações dos sistemas com múltiplo estágios de ejetores sem condensador (Pressão fluido primário = 3.4 atm).	89
Tabela 11. Fator de compressão, razão das áreas e vazão de fluido primário em cada ejetor.	94
Tabela 12. Vazão e pureza dos produtos obtidos.	94
Tabela 13. Correntes do processo para o caso dos ejetores.	97
Tabela 14. Especificações dos equipamentos para o caso dos ejetores.	99
Tabela 15. Correntes do processo para o caso dos compressores.	103
Tabela 16. Especificações dos equipamentos para o caso dos compressores.	105

Sumário

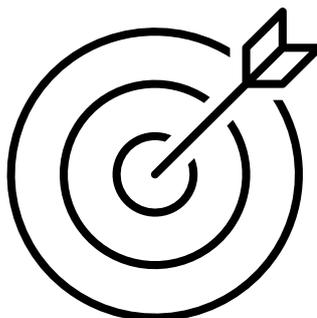
Capítulo 1. Introdução	16
1.1 Contexto	17
1.2 Objetivos	18
Capítulo 2. Revisão Bibliográfica.....	19
2.1 Butanol.....	20
2.2 Fermentação ABE.....	21
2.2.1 Rota metabólica.....	21
2.2.2 Limitações	22
2.3 Fermentação a vácuo	25
2.3.1 Primeiros estudos	26
2.3.2 Análise Energética.....	28
2.3.3 Análise Econômica.....	29
2.3.4 Modificações do processo	30
2.4 Ejetores a vapor	30
2.4.1 Princípio de Funcionamento.....	31
2.4.2 Sistema com múltiplos estágios de ejtores	33
2.4.3 Modelagem de ejtores.....	34
2.4.4 Ejetores a vapor orgânico.....	42
Capítulo 3. Metodologia	44
3.1 Definição de componentes e propriedades no simulador	45
3.1.1 Especificação dos Componentes	45
3.1.2 Definição do modelo termodinâmico.....	46
3.1.3 Definição de outras propriedades	47
3.2 Simulação do processo com ejtores	47
3.2.1 Simulação da Unidade 1 – Fermentação	49
3.2.2 Simulação da Unidade 2 – Absorção	51
3.2.3 Simulação da Unidade 3 – Condensação	51
3.2.4 Simulação da Unidade 4 – Destilação.....	65
3.3 Simulação do processo com compressores.....	71
3.4 Integração Energética.....	73
3.5 Análise Econômica	74
3.5.1 Custos de investimento (CAPEX).....	74
3.5.2 Custos operacionais (OPEX).....	79

Capítulo 4. Resultados e Discussão	82
4.1 Definição de componentes e propriedades no simulador	83
4.2 Simulação do processo com ejetores	84
4.2.1 Simulação da Unidade 1 – Fermentação	84
4.2.2 Simulação da Unidade 2 – Absorção	85
4.2.3 Simulação da Unidade 3 – Condensação	85
4.2.4 Simulação da Unidade 4 – Destilação	94
4.3 Simulação do processo com compressores.....	101
4.4 Integração Energética.....	107
4.5 Análise Econômica	108
4.5.1 Custos de investimento (CAPEX).....	108
4.5.2 Custos operacionais (OPEX).....	109
4.6 Desenvolvimento de novos processos	111
4.6.1 Proposta de novos processos	114
4.6.2 Análise econômica dos novos processos.....	121
Capítulo 5. Considerações Finais	128
5.1 Conclusões	129
5.2 Sugestões de trabalhos futuros	131
Referências	133
Anexo 1	139
Anexo 2	162
Anexo 3	163

CAPÍTULO 1

Introdução

Neste capítulo, introduzimos o tema da dissertação e seus objetivos.



1.1 Contexto

A demanda por químicos de origem verde e biocombustíveis avançados com densidade energética mais próxima à da gasolina tem impulsionado pesquisas focadas na produção de butanol via fermentação ABE (Acetona-Butanol-Etanol). Muitos desses estudos buscam diminuir a alta inibição que o butanol causa nos microrganismos produtores (NGUYEN et al., 2018). Este problema gera baixa eficiência energética do processo devido à corrente de produto ser diluída (~13 g butanol/L), o que resulta, por sua vez, num número elevado de fermentadores, alto consumo de vapor na etapa de destilação (ASSUMPÇÃO et al., 2018) e uma produção excessiva de vinhaça (MARIANO; FILHO, 2012).

Para solucionar o problema da inibição da fermentação pelo butanol, diferentes tecnologias de separação podem ser integradas ao fermentador para recuperar o butanol enquanto este é produzido. Entre estas, destaca-se a fermentação a vácuo devido a sua simplicidade. Na fermentação a vácuo do tipo *flash*, foco deste projeto, o fermentador é conectado a um tanque *flash* a baixa pressão que permite a evaporação dos produtos na temperatura da fermentação. Assim, a separação ocorre sem a necessidade de membranas (que são susceptíveis a entupimento por sólidos) e compressores de gás de arraste. Além disso, essa tecnologia oferece alta taxa de remoção de butanol (até ~15 g/L·h), sendo aproximadamente 10 vezes mais “rápida” do que a tecnologia de remoção por arraste de gás (MARIANO et al., 2011a). Essa característica torna a tecnologia do vácuo especialmente adequada para sistemas com alta carga celular e conseqüente alta produtividade.

Devido às vantagens da fermentação a vácuo, esta tem sido objeto de estudo do grupo de pesquisa ao qual esse projeto está vinculado. Os primeiros estudos do grupo (conceituais e experimentais) demonstraram a viabilidade técnica da recuperação do butanol do caldo fermentativo (MARIANO et al., 2008, 2011a, 2012; MARIANO; FILHO; EZEJI, 2012). Contudo, estudos posteriores demonstram que o sistema de condensação dos vapores gerados durante a ebulição é ainda um entrave para a viabilidade econômica dessa tecnologia (ASSUMPÇÃO et al., 2018; DÍAZ; VON STOSCH; WILLIS, 2019; PEREIRA et al., 2018, 2017). Nestes estudos foi proposto que o vácuo fosse gerado por compressores e que o calor produzido nessa operação e o próprio calor latente de condensação fossem integrados ao processo, fornecendo energia de vaporização ao fermentador e às colunas de destilação. Porém, o gasto com eletricidade dos compressores se mostrou proibitivo. Numa tentativa de diminuir a carga de vapores para os compressores, Dantas (2018) inseriu condensadores entre o fermentador e os compressores. Entretanto, o custo com o refrigerante (água a 10 °C) também

foi excessivo. Condensadores também não se mostraram economicamente viáveis no caso da condensação de vapores de butanol gerados por gás de arraste (*gas stripping*) (PYRGAKIS et al., 2016).

Baseando-se em elementos das tecnologias existentes, contudo, eliminando o uso de compressores para a geração do vácuo, esse projeto de mestrado propõe uma tecnologia onde o vácuo é gerado por um sistema de ejetores que utilize etileno glicol como vapor motriz. A proposta de usar um solvente orgânico como vapor motriz, ao invés do convencional vapor d'água, é de facilitar a recuperação do produto após a condensação. O etileno glicol pode ser usado para “quebrar” o azeótropo etanol-água, assim como é feito em usinas de etanol no Brasil. Dessa maneira, esse projeto de mestrado visa desenvolver um sistema de geração de vácuo e condensação de baixo custo para a fermentação a vácuo.

Os estudos foram realizados via simulação computacional (Aspen Plus® v8.6) e a eficiência do processo proposto (fermentação a vácuo/condensação/destilação) foi avaliada mediante análises energética (análise *pinch*) e econômica.

1.2 Objetivos

Esse trabalho de mestrado tem como objetivo desenvolver um sistema de geração de vácuo e condensação, baseado em ejetores operados com solvente orgânico, para a fermentação a vácuo. Para atingir essa meta, o projeto tem os seguintes objetivos específicos:

1. Desenvolver via simulador computacional o sistema de fermentação a vácuo com ejetores e a purificação dos produtos por destilação;
2. Realizar estudos de integração energética via análise *pinch*;
3. Analisar economicamente o sistema proposto.

CAPÍTULO 2

Revisão Bibliográfica

Neste capítulo, apresentamos uma Revisão Bibliográfica sobre os principais tópicos discutidos neste projeto: Butanol, Fermentação ABE, Fermentação a vácuo e Ejetores a vapor.



2.1 Butanol

O butanol (ou n-butanol) é um álcool de cadeia saturada formado por quatro carbonos (C_4H_9OH). Atualmente, esse químico apresenta diversas aplicações industriais (BASF, 2016; DOW CHEMICALS, 2013; JIN et al., 2011), a saber:

- Solvente para produção de resinas, revestimentos, tintas e corantes;
- Intermediário na síntese de diversos outros químicos de valor elevado, como éteres de glicol, ésteres de acrilato/metacrilato, acetato de n-butilo, amino resinas, n-butilaminas;
- Extrator em indústrias farmacêuticas;
- Agente plastificante;
- Matéria-prima para processos de flotação;
- Aditivo em polidores, produtos de limpeza, fluidos de degelo;
- Componente de freio hidráulico.

Ainda, o butanol tem grande potencial como biocombustível (NDABA; CHIYANZU; MARX, 2015). Em relação ao etanol, o butanol é menos volátil, menos explosivo e apresenta maior ponto de fulgor e menor pressão de vapor, o que torna o seu manuseio mais seguro. Por não ser higroscópico e nem corrosivo, é mais fácil armazená-lo e transportá-lo por meio de dutos. Além disso, possui densidade energética similar à da gasolina, pois sua cadeia carbônica é maior, e pode ser misturado a ela ou ao diesel, em qualquer proporção, sem a necessidade de adaptação do veículo (DÜRRE, 2007; JIN et al., 2011).

Existem duas rotas principais para produzir o butanol: a rota petroquímica e a biológica (LEE et al., 2008). A primeira é a mais empregada e é realizada a partir de derivados do petróleo (NIEMISTÖ, 2014). O processo é feito majoritariamente pela síntese *Oxo*, mas pode ocorrer também pela síntese *Reppe* ou pela hidrogenação de crotonaldeído (LEE et al., 2008). Quando produzido por essa rota, o butanol também é chamado de petrobutanol (JIN et al., 2011).

Na rota biológica, o butanol, ou biobutanol, é produzido via fermentação da biomassa promovida principalmente por bactérias do gênero *Clostridium*, que são estritamente anaeróbicas (LEE et al., 2008; QURESHI; LIU; EZEJI, 2013). As espécies *C. acetobutylicum* e *C. beijerinckii*, em especial, são as que produzem a maior quantidade de butanol (QURESHI; LIU; EZEJI, 2013). Os substratos para a fermentação desses microrganismos podem ser desde monossacarídeos (ex.: glicose e frutose) a polissacarídeos (ex.: hemicelulose e amido) (BANKAR et al., 2013; JONES; WOODS, 1986). Há dois tipos mais comuns de fermentação:

a ABE que produz acetona, butanol e etanol e a IBE que produz isopropanol, butanol e etanol. Entre ambas, a fermentação ABE é o foco deste trabalho.

2.2 Fermentação ABE

A fermentação ABE é um dos processos industriais mais antigos que existem (JIN et al., 2011). Foi descoberta por Louis Pasteur, em 1861, durante seus estudos com bactérias anaeróbicas. Graças aos avanços promovidos por Strange e Chaim Weizmann, no início do século 20, essa rota começou a ser utilizada com o propósito de produzir acetona para a Primeira Guerra Mundial (JONES; WOODS, 1986). Nos anos seguintes, a demanda de butanol aumentou e foram criadas plantas industriais em larga escala em diversos países, tais como Canadá, Estados Unidos, União Soviética, China, Japão e África do Sul (EZEJI et al., 2010; NDABA; CHIYANZU; MARX, 2015). A fermentação ABE se tornou, na época, o segundo maior processo fermentativo industrial do mundo (BANKAR et al., 2013; JIN et al., 2011; LEE et al., 2008). No entanto, a partir da década de 60, com o progresso da indústria petroquímica e com o aumento do preço da matéria-prima, a fermentação ABE perdeu mercado e a última fábrica foi fechada em 1986 na África do Sul (NDABA; CHIYANZU; MARX, 2015). Porém, a crise do petróleo e a recente demanda por bio-solventes fizeram com que usinas de fermentação ABE voltassem a funcionar em alguns lugares, como na China (JIN et al., 2011; MARIANO; FILHO, 2012).

2.2.1 Rota metabólica

O metabolismo das bactérias *Clostridium*, durante a fermentação ABE, é feito em duas fases (Figura 1). Na primeira, a fase acidogênica, as células consomem os açúcares e produzem os ácidos butírico e acético. Essa etapa ocorre durante o crescimento exponencial das bactérias e resulta em uma diminuição do pH do meio devido a formação de ácidos. Na segunda fase, a fase solventogênica, o crescimento celular diminui e os ácidos são assimilados para produzir os solventes acetona, butanol e etanol (HARTMANIS; GATENBECK, 1984; JONES; WOODS, 1986).

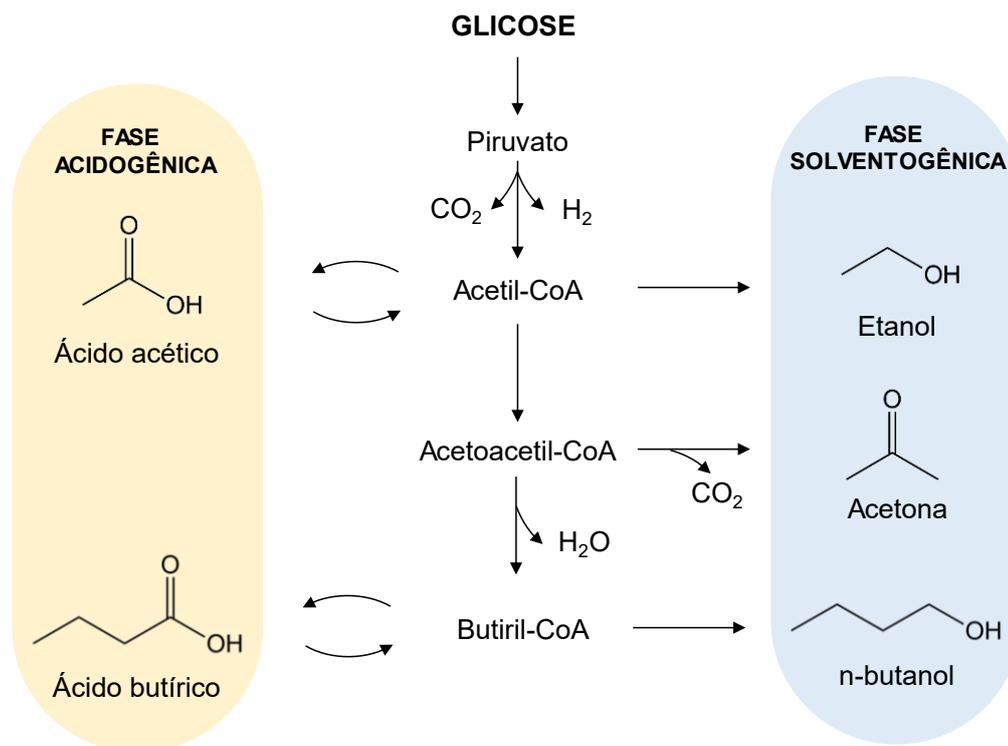


Figura 1. Rota metabólica simplificada da fermentação ABE promovida pelas bactérias do gênero *Clostridium*.

A fermentação ABE é realizada normalmente em reatores do tipo batelada. A proporção típica dos rendimentos em massa de acetona, butanol e etanol é 3:6:1. A temperatura ótima da fermentação, por sua vez, está entre 30 e 40 °C (BANKAR et al., 2013).

2.2.2 Limitações

Uma das maiores limitações da fermentação ABE é a toxicidade do butanol sobre os microrganismos produtores. A quantidade máxima que as bactérias *Clostridium* toleram é de cerca de 13 g/L de butanol (JONES; WOODS, 1986; MARIANO et al., 2008). A partir dessa concentração, esse solvente altera a estrutura da membrana plasmática das células, inibindo-as (BANKAR et al., 2013). Assim, a produtividade desse processo é muito baixa (0.2 a 0.5 g butanol/ L h), resultando em correntes de processo bastante diluídas (ASSUMPÇÃO et al., 2018; MARIANO; FILHO, 2012). Como consequência, a produção industrial é onerosa, pois necessita-se de um número alto de fermentadores e gasta-se muita energia na separação dos produtos por destilação (~25 MJ/kg butanol) (ASSUMPÇÃO et al., 2018; MARIANO et al., 2008, 2011b; MARIANO; FILHO, 2012). Além disso, gera-se muito efluente: aproximadamente 71 litros de vinhaça para cada litro de butanol (MARIANO; FILHO, 2012;

QURESHI et al., 2008). Esse volume alto de vinhaça também aumenta os custos operacionais, uma vez que esse efluente precisa ser tratado ou disposto da maneira adequada. Nas biorrefinarias de etanol do Brasil, por exemplo, parte dessa vinhaça é utilizada para irrigar as plantações de cana-de-açúcar, processo conhecido como fertirrigação (DANTAS, 2018). Todavia, a fertirrigação, quando excessiva, pode resultar na salinização e acidificação do solo, o que afeta a produtividade da cana-de-açúcar (DANTAS et al., 2020; FUESS; GARCIA; ZAIAT, 2018).

Diante desses problemas resultantes da toxicidade do butanol, vários estudos estão sendo desenvolvidos com o propósito de solucioná-los. Existem duas vertentes principais de pesquisa:

- (i) *Desenvolvimento de novos microrganismos*: Por meio de modificação genética, busca-se desenvolver novos microrganismos que tolerem concentrações mais altas de butanol (LEE et al., 2008; MARIANO; FILHO, 2012).
- (ii) *Desenvolvimento de Tecnologias de recuperação integrada*: Diferentes tecnologias de separação podem ser integradas ao processo para retirar os solventes à medida em que são produzidos (BANKAR et al., 2013; LEE et al., 2008; MARIANO; FILHO, 2012; OUTRAM et al., 2017; VANE, 2008). Assim, a concentração de butanol se mantém baixa no meio e não inibe as células. A Tabela 1 apresenta uma breve descrição de algumas tecnologias de recuperação, destacando suas vantagens e limitações.

Tabela 1. Tecnologias de recuperação para a fermentação ABE.

Tecnologia	Descrição	✓ Vantagens	✗ Limitações
Arraste por gás	Um gás é injetado no caldo fermentativo e extrai os produtos (BANKAR et al., 2013; OUTRAM et al., 2017).	<ul style="list-style-type: none"> - Não agride os microrganismos (DANTAS, 2018); - Possibilidade de reciclo dos gases fermentativos (CO₂ e H₂) como o gás de arraste (BANKAR et al., 2013; OUTRAM et al., 2017); - Baixo risco de contaminação ou entupimento (LEE et al., 2008). 	<ul style="list-style-type: none"> - Produção excessiva de espuma (KUJAWSKA et al., 2015); - Biorreatores de grande volume (DANTAS, 2018); - Necessidade de compressores de gás de arraste e alta fluxo de gás (LÓPEZ CONTRERAS et al., 2010; OUTRAM et al., 2017); - Gasto energético elevado (LÓPEZ CONTRERAS et al., 2010; OUTRAM et al., 2017).
Extração líquido-líquido	Adiciona-se ao caldo fermentativo um líquido imiscível em água que extrai seletivamente ABE e deixa os microrganismos e outros compostos no meio (BANKAR et al., 2013).	<ul style="list-style-type: none"> - Baixo consumo energético, principalmente para arranjo de dupla extração (DANTAS, 2018; KURKIJÄRVI; LEHTONEN; LINNEKOSKI, 2014); - Alta seletividade e eficiência (LEE et al., 2008). 	<ul style="list-style-type: none"> - Baixo rendimento (DANTAS, 2018); - Necessidade de um grande volume de extrator (DANTAS, 2018); - Pode gerar emulsão (LEE et al., 2008); - Risco de intoxicação das células pelo extrator (BANKAR et al., 2013); - Custo de investimento e operação elevados (KUJAWSKA et al., 2015; OUTRAM et al., 2017); - Possíveis perdas do líquido extrator (BANKAR et al., 2013); - Acúmulo de células microbianas na interfase do extrator e do caldo de fermentação (BANKAR et al., 2013).
Pervaporação	Uma membrana entre a fase gasosa e a líquida separa seletivamente os produtos ABE (OUTRAM et al., 2017).	<ul style="list-style-type: none"> - Baixa demanda energética (BANKAR et al., 2013; DANTAS, 2018); - Baixa contaminação (BANKAR et al., 2013). 	<ul style="list-style-type: none"> - Entupimento das membranas (DANTAS, 2018); - Redução da seletividade das membranas com o tempo de uso (BANKAR et al., 2013).
Adsorção	Um adsorvente com alta afinidade por ABE retira esses compostos do meio (BANKAR et al., 2013).	<ul style="list-style-type: none"> - Alta seletividade e capacidade (DANTAS, 2018); - Baixa demanda energética (BANKAR et al., 2013; DANTAS, 2018). 	<ul style="list-style-type: none"> - Custo elevado com a dessorção (DANTAS, 2018); - Envenenamento do adsorvente que dificulta sua recuperação (DANTAS, 2018); - Possível incrustação de células e outros compostos que reduzem o rendimento de solventes (BANKAR et al., 2013); - Risco de intoxicação das células pelo adsorvente (NIEMISTÖ, 2014).

Além das tecnologias apresentadas anteriormente, existe a fermentação a vácuo.

2.3 Fermentação a vácuo

Na fermentação a vácuo (Figura 2), o biorreator é operado a uma pressão baixa o suficiente que permite a ebulição dos solventes ABE na temperatura da fermentação ($\sim 37\text{ }^{\circ}\text{C}$). Assim, por meio dessa técnica, é possível manter a concentração de butanol baixa no caldo fermentativo, o que evita a inibição dos microrganismos (MARIANO et al., 2011a).

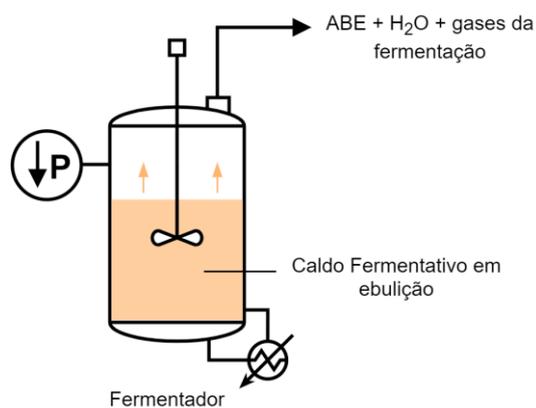


Figura 2. Produção de butanol (fermentação ABE) em uma fermentação a vácuo convencional.

Uma variação da fermentação a vácuo é a fermentação *flash* (Figura 3). O princípio de funcionamento é basicamente o mesmo, porém, neste arranjo, utiliza-se um biorreator operado a pressão atmosférica e um tanque *flash* sob vácuo. Após a fermentação, o caldo vai para o tanque onde ocorre a vaporização dos solventes (DANTAS, 2018). Depois disso, parte do líquido retorna para o fermentador.

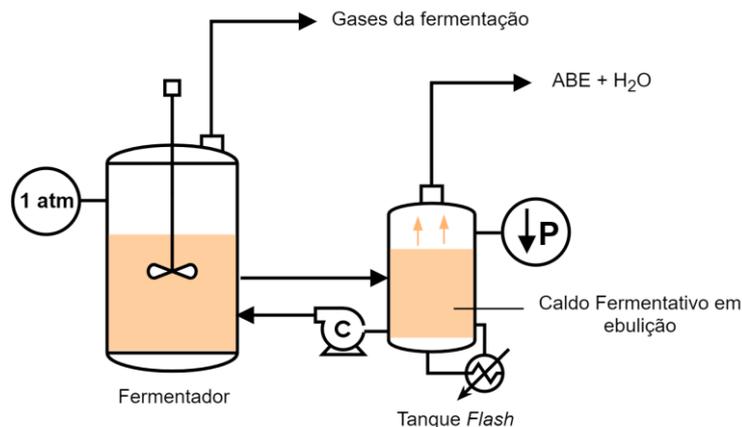


Figura 3. Produção de butanol (fermentação ABE) em uma fermentação a vácuo do tipo *flash*.

Diversos trabalhos na literatura, especialmente do grupo de pesquisa ao qual este projeto está vinculado, avaliaram a utilização da tecnologia de recuperação a vácuo aplicada à fermentação ABE (e IBE). A seguir, são apresentados alguns dos principais estudos (Figura 4).



Figura 4. Linha do tempo com alguns estudos sobre a fermentação a vácuo do grupo de pesquisa.

2.3.1 Primeiros estudos

Antigamente, havia um paradigma no meio científico de que a separação a vácuo era adequada apenas para a recuperação de produtos mais voláteis do que a água, como o etanol e o acetaldeído, conforme afirmado por Roffler et. al (1984). Por isso, essa tecnologia foi estudada inicialmente para recuperar etanol (DANTAS, 2018). Todavia, estudos experimentais e conceituais (MARIANO et al., 2008, 2011a; MARIANO; FILHO; EZEJI, 2012) refutaram esse paradigma ao comprovar a viabilidade técnica da separação a vácuo para o butanol. Essa

inovação tecnológica ganhou destaque no periódico *Biotechnology and Bioengineering* (sessão “spotlight” do vol. 108, n.8, 2011) e na Revista Pesquisa FAPESP (185:55, 2011).

A recuperação a vácuo pode ser aplicada para recuperar butanol, porque a mistura butanol e água formam um heteroazeótropo de mínimo. No diagrama de fases para essas duas substâncias a 1 atm (Figura 5), por exemplo, observa-se que para uma fração de butanol inferior a 0.24 a temperatura de ebulição da mistura é menor que a da água pura (100 °C) e a do butanol puro (118 °C). Assim, é possível extrair o álcool a uma temperatura que não irá agredir as células quando for aplicado o vácuo e a fase vapor recuperada é mais rica em butanol comparada à fase líquida (MARIANO et al., 2008).

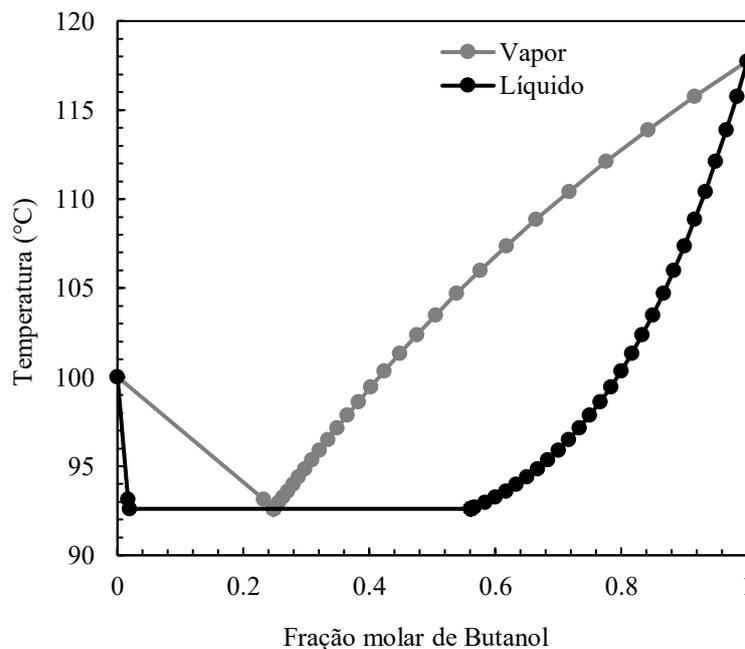


Figura 5. Diagrama de fases do butanol e água à pressão atmosférica gerado no *Aspen Plus®* pelo modelo UNIQUAQ.

Em comparação ao modelo convencional (reator batelada sem recuperação), a separação a vácuo apresenta muitas vantagens (MARIANO et al., 2011a). Essa tecnologia:

- Diminuiu o tempo de fermentação;
- Consome o máximo de glicose;
- Proporciona maior crescimento das células;
- Aumenta a produtividade.

Em relação a outras tecnologias, o uso do vácuo também é vantajoso (MARIANO et al., 2011a), porque:

- Não precisa de membranas, que podem entupir com o tempo e ter redução da eficiência e da seletividade;
- Não precisa de compressores de gás de arraste, que encarecem o processo;
- Não contamina ou agride os microrganismos;
- Apresenta alta taxa de remoção de butanol (~ 15 g/L·h);
- É 10 vezes mais rápida que a remoção de arraste de gás.

Apesar das muitas vantagens, a recuperação a vácuo apresenta pontos que necessitam de melhorias. Um deles é que os ácidos podem ser parcialmente vaporizados junto com os solventes ABE, conforme observado em estudos experimentais (MARIANO et al., 2011a). A remoção dos ácidos do caldo fermentativo não é desejada, porque esses compostos são intermediários na produção dos solventes orgânicos na fase solventogênica, como mostrado previamente. Assim, ao removê-los, os rendimentos das reações são prejudicados (OUTRAM et al., 2017).

2.3.2 Análise Energética

Mariano et. al (2011b) avaliou o requerimento energético da recuperação a vácuo do butanol desde a etapa da fermentação ABE, do tipo flash, até a destilação. O processo foi simulado no Aspen Plus® para diferentes condições. Ao todo 7 cenários foram avaliados, considerando a concentração de glicose na alimentação do processo, o volume do fermentador e o tipo de cepa dos microrganismos fermentadores. Para gerar o vácuo, foram utilizados dois compressores sequenciais. Diferentes estratégias foram feitas com o propósito de aproveitar a energia no processo, como a recompressão de vapor que fornece energia ao tanque *flash* e outras integrações na etapa de destilação.

O estudo mostrou que, com a fermentação a vácuo do tipo *flash*, é possível utilizar uma solução de alimentação mais concentrada de glicose. No processo, há uma conversão alta de glicose em ABE o que resulta em um aumento de produtividade e um caldo de fermentação mais concentrado. Ainda, pequenas elevações da concentração de butanol nesse caldo resultam na redução da demanda energética na destilaria. Dos cenários analisados, aquele que utilizou 150 g/L de glicose e um fermentador de 500 m³ foi o que apresentou os melhores resultados para uma cepa selvagem (*C. acetobutylicum* ATCC824). Neste cenário, observou-se uma baixa concentração de butanol no fermentador (6.9 g/L), uma redução da energia global de 39% comparado ao processo convencional e uma menor produção de vinhaça (de 72 para 29 L

vinhaça/L butanol). Apesar disso, no processo proposto há uma demanda grande de energia elétrica (6 MJ/kg de butanol) devido aos compressores.

2.3.3 Análise Econômica

Pereira et al. (2018) e Assunção et al. (2018) avaliaram economicamente o uso do vácuo para recuperar o butanol na fermentação ABE em escala industrial. Pereira (2018), em especial, estudou a fermentação *flash* e Assunção et al. (2018), a fermentação a vácuo. Em ambos os estudos o vácuo foi gerado por meio de compressores. Foi constatado que a tecnologia do vácuo permite um número de fermentadores muito inferior ao processo convencional, por causa da maior produtividade. Ainda, as colunas de destilação demandam menos energia para separar os produtos e, conseqüentemente, menos vapor. Logo, a etapa de purificação é mais econômica comparada ao processo convencional sem recuperação a vácuo. Ainda, há uma redução do custo com tratamento de águas residuais. Apesar de todas essas economias, a demanda de energia elétrica dos compressores torna o processo mais caro que a fermentação convencional (Figura 6).

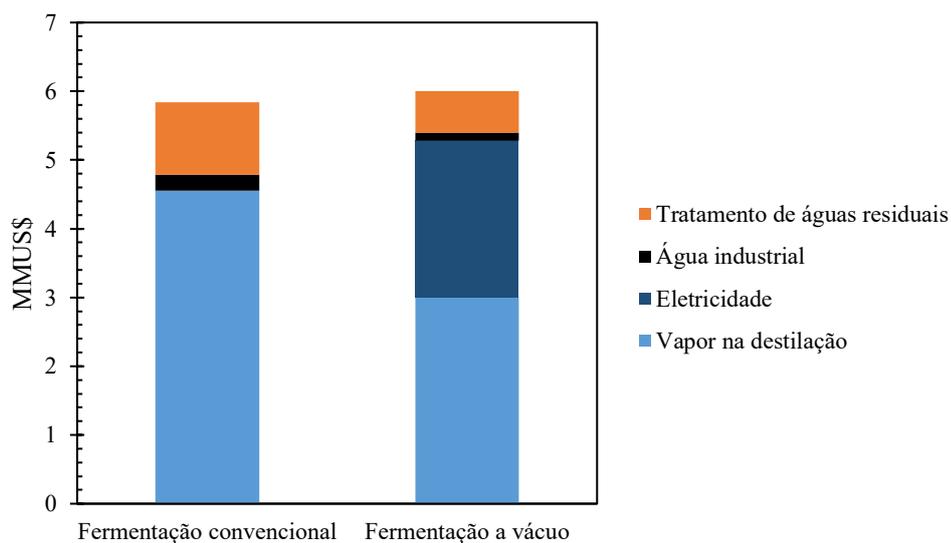


Figura 6. Custo operacional para uma planta de fermentação ABE convencional e utilizando a fermentação a vácuo (Assunção et al., 2018).

2.3.4 Modificações do processo

Dantas (2018), por sua vez, analisou o processo de fermentação IBE (isopropanol, butanol e etanol) com a recuperação a vácuo do tipo *flash*. Foi proposto utilizar um condensador logo após o tanque flash, resfriado com água fria (10°C), com o objetivo de diminuir a demanda elétrica dos compressores e, assim, reduzir custos. Nesta configuração, um grande volume de vapor contendo os produtos é condensado antes de ir para o compressor. Com a menor carga de vapor, a potência requerida do compressor é menor, o que reduz muito o requerimento de energia elétrica. Além disso, apenas um compressor é suficiente para realizar a compressão, o que também reduz custos de investimento. É interessante destacar também que neste estudo foi desenvolvido um sistema de destilação extrativa para separar os produtos da fermentação IBE. Utilizou-se o etileno glicol como solvente, que é responsável por separar o azeótropo etanol-água. A destilação extrativa com etileno glicol é muito utilizada atualmente na produção do etanol anidro (HAN; CHEN, 2018). Apesar das vantagens com as modificações implementadas, o custo com água fria foi muito alto, tornando o processo caro.

Diante disso, novas modificações no processo ainda precisam ser feitas com o objetivo de tentar torná-lo mais econômico. Uma possibilidade é utilizar um ejetor no lugar do compressor para gerar o vácuo.

2.4 Ejetores a vapor

Ejetores a vapor são amplamente utilizados na indústria para geração de vácuo, dentre outras funções. Esses equipamentos apresentam uma estrutura e um modo de operação muito simples. São formados por (Figura 7):

- Um bocal convergente-divergente, por onde entra vapor à alta pressão (fluido primário);
- Uma câmara de sucção, por onde entra o fluido à baixa pressão (fluido secundário);
- Uma seção de área constante, onde ocorre a mistura dos fluidos e
- Um difusor, por onde a mistura dos fluidos sai do equipamento.

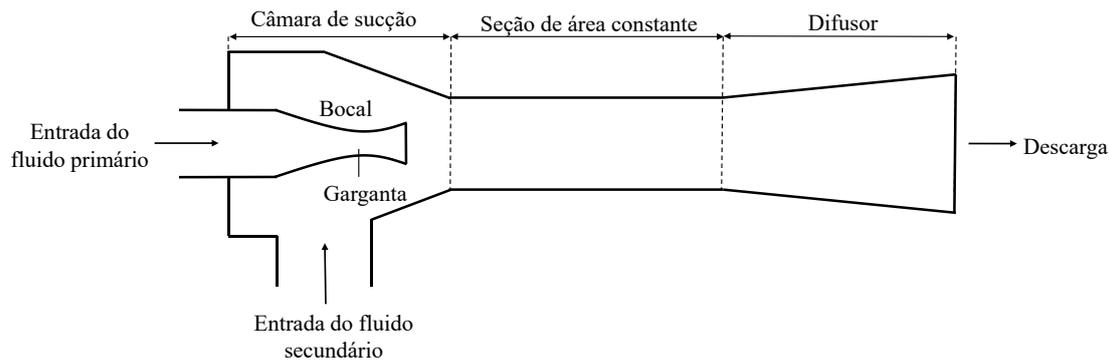


Figura 7. Representação esquemática de um ejetor típico e suas partes.

Mesmo pequenos, os ejetores são capazes de processar um grande volume de fluido e de gerar vácuo a pressões muito baixas. Ainda, não possuem partes móveis e não precisam de um motor elétrico para funcionar, diferente dos compressores (KENT, 2018). Por causa disso, esses equipamentos apresentam um custo pequeno de investimento e de manutenção (BIRGENHELER et al., 1993; MA; BAO; ROSKILLY, 2017).

2.4.1 Princípio de Funcionamento

Para entender melhor o princípio de funcionamento de um ejetor, é importante compreender o escoamento de um fluido compressível em um duto convergente-divergente. Quando um fluido compressível abaixo da velocidade do som (ou subsônico) atravessa um duto convergente, sua pressão diminui e sua velocidade aumenta. Quando o duto é divergente, a pressão do fluido aumenta e sua velocidade diminui. Esse comportamento é o oposto quando a velocidade do fluido está acima da velocidade do som (ou supersônico). Assim, vejamos o perfil de pressão e velocidade dos fluidos ao longo de um ejetor (Figura 8):

- O fluido primário entra no ejetor no ponto 1 com uma baixa velocidade (subsônica) e uma alta pressão.
- O fluido secundário entra no ejetor no ponto 3 com uma baixa velocidade (subsônica) e uma baixa pressão.
- Do ponto 2 ao 4, o fluido primário escoava através de um duto convergente. Por ser um fluido subsônico, sua velocidade aumenta e sua pressão diminui.
- O ponto 4 está localizado na garganta do bocal (local de menor diâmetro). Quando o fluido primário passa neste ponto, sua velocidade atinge a velocidade do som. Depois

do ponto 4, o fluido deixa de ser subsônico e passa a ser supersônico (IGLESIAS, 2012; POWER, 1994).

- Do ponto 4 ao 5, o fluido primário escoava através de um duto divergente. Por ser um fluido supersônico, sua velocidade continua aumentando e sua pressão também diminui.
- No ponto 5, a pressão estática do fluido primário é menor que a do fluido secundário, o que induz a sucção do segundo (Iglesias).
- Logo após o ponto 5, os fluidos não se misturam. O fluido primário se expande formando um duto convergente virtual para o fluido secundário. Assim, à medida que o fluido secundário percorre o ejetor, sua velocidade vai aumentando até atingir a velocidade do som. Quando esse momento é alcançado, ocorre uma condição chamada bloqueio do escoamento secundário, a partir da qual começa a mistura dos fluidos. Essa mistura pode acontecer na câmara de sucção ou na seção de área constante (IGLESIAS, 2012).
- A pressão da mistura dos fluidos depende tanto das pressões dos fluidos quanto da pressão externa ao ejetor. Essa pressão externa, no geral, é maior que a da mistura e gera uma onda de choque no ejetor (ponto 6). Devido a esse choque, a velocidade da mistura diminui repentinamente e o fluido deixa de ser supersônico e vira subsônico. A pressão, por sua vez, também aumenta de modo súbito (HUANG et al., 1999; IGLESIAS, 2012; POWER, 1994).
- A mistura chega ao difusor no ponto 7. Como o fluido está subsônico e o difusor é um duto divergente, a velocidade do fluido diminui e sua pressão aumenta à medida que escoava pelo difusor.
- A mistura sai do ejetor no ponto 8.

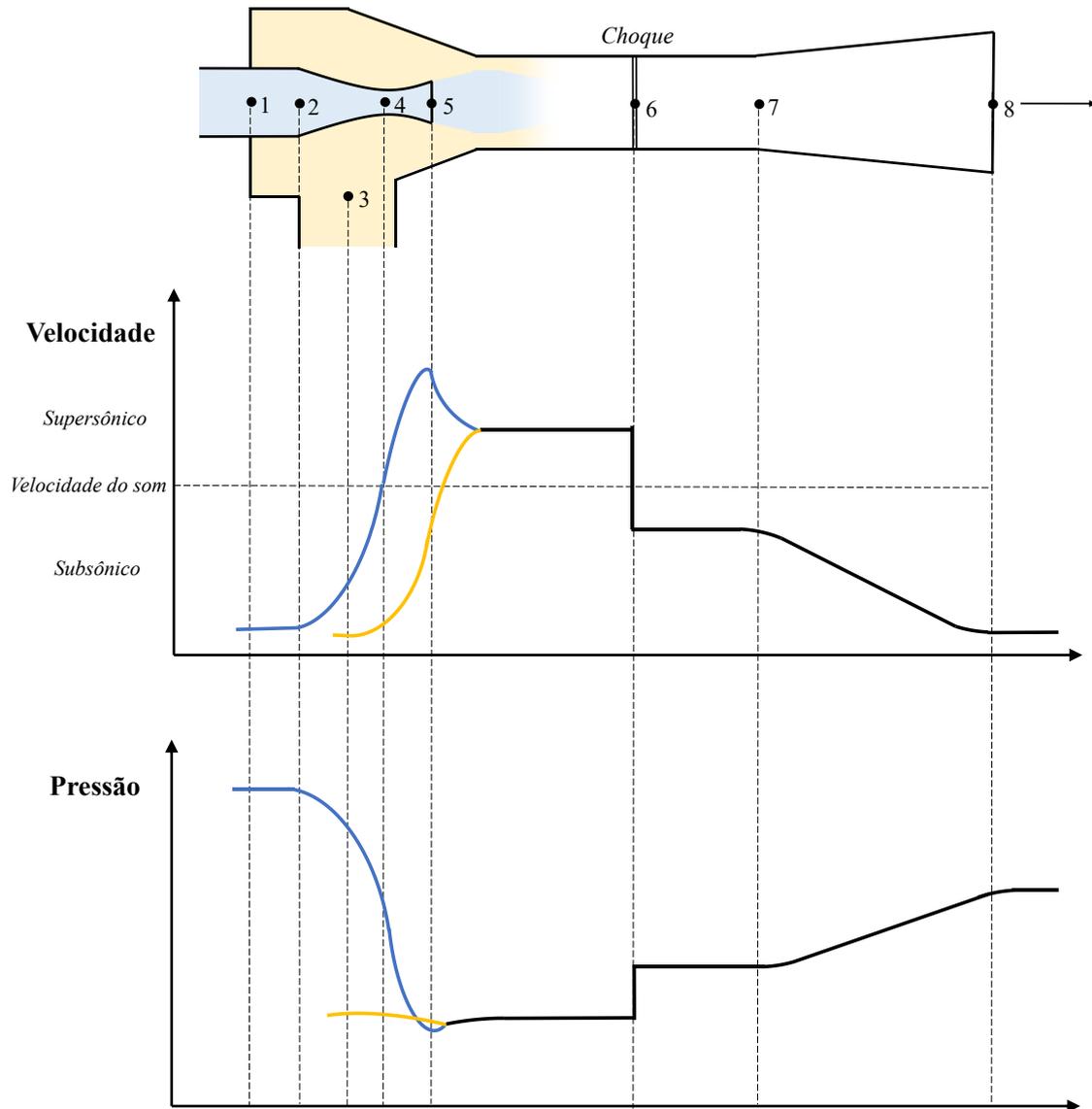


Figura 8. Perfil de velocidade e pressão dos fluidos em um ejetor.

2.4.2 Sistema com múltiplos estágios de ejetores

Apenas um ejetor pode não ser suficiente para se atingir a pressão desejada em um processo. Assim, para resolver esse problema, é comum a utilização de múltiplos estágios de ejetores. Na associação em série de ejetores, a corrente de saída de um ejetor se torna o fluido secundário do próximo ejetor (Figura 9). Idealmente, é desejado que a variação de pressão em cada estágio seja a mesma (TURTON et al., 2018).

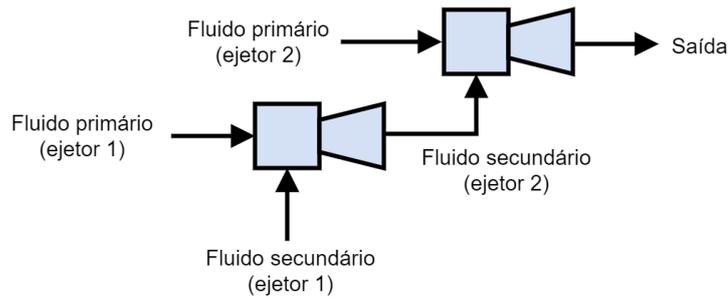


Figura 9. Associação de ejetores em série sem condensador.

Na configuração mostrada na Figura 9, a vazão de fluido secundário aumenta à medida que o número de estágios aumenta. Com consequência, os últimos ejetores podem precisar de uma vazão alta de fluido primário para funcionar. Por isso, muitas vezes é necessário adicionar condensadores entre os ejetores para reduzir a carga de vapor que chega nos próximos ejetores (Figura 10). A utilização de condensadores reduz custos operacionais relacionados ao fluido primário, porém aumenta custos de utilidade e de equipamentos, por causa do trocador. Apenas por uma análise econômica é possível saber qual configuração é a mais econômica (TURTON et al., 2018).

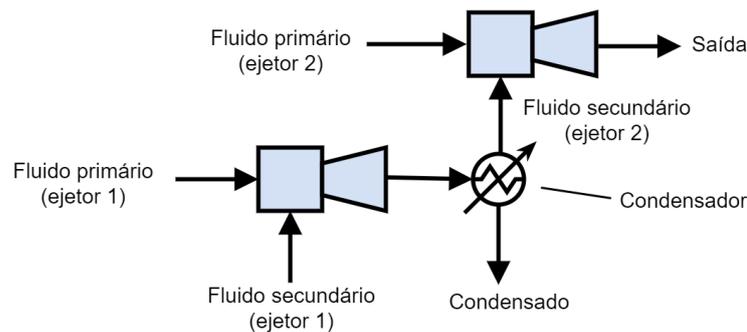


Figura 10. Associação de ejetores em série com condensador.

2.4.3 Modelagem de ejetores

Na literatura, existem vários estudos de modelagem de ejetores. Entre os modelos, os unidimensionais (ou 1-D) são muito utilizados (IGLESIAS, 2012). A modelagem 1-D se fundamenta no escoamento unidimensional de um fluido gasoso compressível ao longo de bocais divergentes-convergentes. Os modelos 1-D, mesmo sendo simples comparados a outros,

forneem resultados consistentes e razoáveis dentro suas limitações (LIAO, 2008). Entre os modelos 1-D, o modelo de Huang et al. (1999) se destaca.

Huang et al. (1999)

Na concepção de Huang et al. (1999), os fluidos primário e secundário correspondem a uma mesma substância, são gases ideais e se misturam na seção de área constante do ejetor a uma pressão constante (Figura 11). Além disso, a metodologia considera que o ejetor opera no modo crítico que é o de melhor performance do ejetor e inclui eficiências isentrópicas (η) e coeficientes de perdas no processo (ϕ).

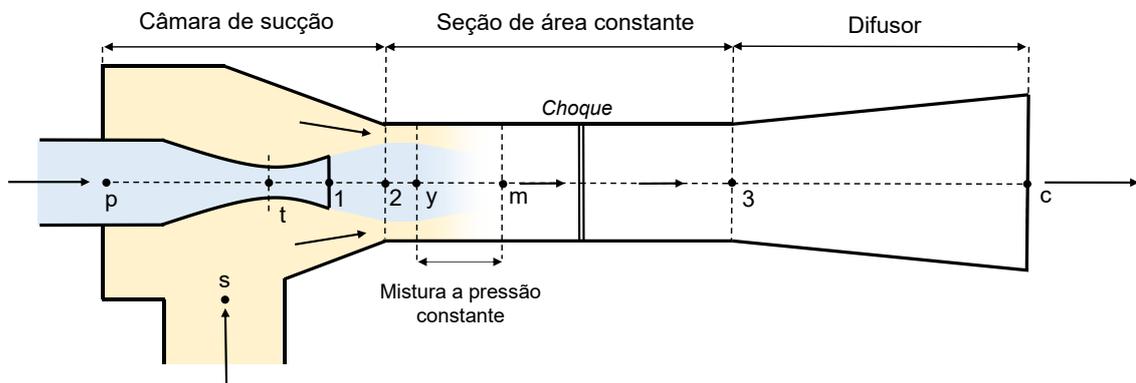


Figura 11. Ejetor e suas partes. Na concepção de Huang e colaboradores (1999) os fluidos se misturam entre as seções y e m .

O modelo foi desenvolvido com base nas seguintes considerações:

1. O fluido é um gás ideal, com C_p e γ constantes;
2. O fluxo dentro do ejetor é constante e unidimensional;
3. A energia nas entradas dos fluidos e na saída do difusor são negligenciadas;
4. Para simplificar a derivação do modelo 1-D, relações isentrópicas foram usadas como uma aproximação. Todavia, para incluir a não idealidade do processo, os efeitos de fricção e mistura foram considerados por meio de alguns coeficientes introduzido nas relações. Esses coeficientes estão relacionados à eficiência isentrópica e precisam ser determinados experimentalmente;
5. Mesmo após saindo do bocal, o fluido primário não se mistura com o secundário até chegar na seção y (Figura 11) que está dentro da seção de área constante do ejetor;

6. Os fluidos começam a se misturar a partir da seção y a uma pressão uniforme ($P_{py} = P_{sy}$), antes do choque;
7. Para o fluido secundário, existe uma garganta hipotética na seção y ($M_{sy} = 1$);
8. A parede do ejetor é adiabática.

As Equações de 1 a 21 descrevem o modelo de Huang et al. (1999).

Nomenclatura

A	Área (m^2)
a	Velocidade do som (m/s)
C_p	Capacidade térmica a pressão constante ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
C_v	Capacidade térmica a volume constante ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
D	Diâmetro (m)
M	Número de Mach
m	vazão mássica (kg/s)
MM	Massa molar ($kg\ kmol^{-1}$)
n	Eficiência isentrópica
P	Pressão (Pa)
R	Constante universal dos gases específica ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
R_g	Constante universal dos gases ($J\ kmol^{-1}\ K^{-1}$)
T	Temperatura (K)
V	Velocidade do gás (m/s)
γ	Coefficiente de expansão adiabática ($=C_p/C_v$)
ϕ	Coefficiente de perda

Subscritos

1	Saída do bocal
2	Início da seção de área constante no ejetor
3	Saída da seção de área constante
c	Saída do ejetor
m	Fluido após mistura
p	Fluido primário

- py Fluido primário na seção y
- s Fluido secundário
- sy Fluido secundário na seção y
- t Garganta do bocal
- y Localização do início da mistura dos fluidos

Fluido primário através do bocal (Figura 12)

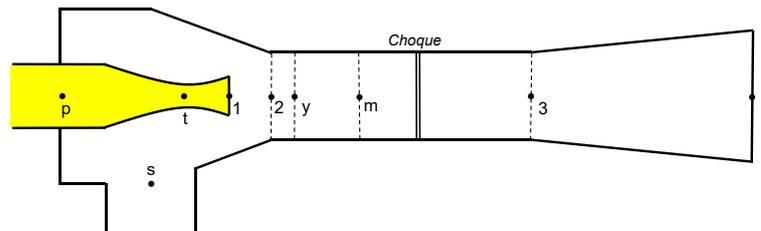


Figura 12. Escoamento do fluido primário pelo bocal.

Vazão mássica do fluido primário:

$$\dot{m}_p = A_t P_p \sqrt{\frac{\gamma_p}{T_p R_p} \left(\frac{2}{\gamma_p + 1} \right)^{\frac{\gamma_p + 1}{\gamma_p - 1}} n_p} \quad (1)$$

Área da saída do bocal e da garganta do ejetor:

$$\frac{A_{p1}}{A_t} = \frac{1}{M_{p1}} \left[\frac{2}{\gamma_p + 1} \left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{p1}^2 \right) \right]^{\frac{\gamma_p + 1}{2(\gamma_p - 1)}} \quad (2)$$

Pressão do fluido primário na saída do bocal:

$$\frac{P_p}{P_{p1}} = \left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{p1}^2 \right)^{\frac{\gamma_p}{\gamma_p - 1}} \quad (3)$$

Fluido primário da seção 1 até a seção y (Figura 13)

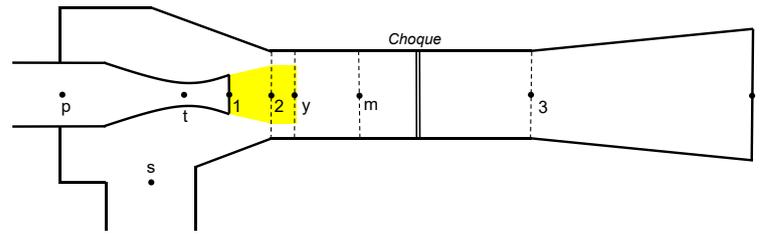


Figura 13. Escoamento do fluido primário da seção 1 até a y.

Áreas das seções 1 e y:

$$\frac{A_{py}}{A_{p1}} = \frac{\frac{\varphi_p}{M_{py}} \left[\frac{2}{\gamma_p + 1} \left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{py}^2 \right) \right]^{\frac{\gamma_p + 1}{2(\gamma_p - 1)}}}{\frac{1}{M_{p1}} \left[\frac{2}{\gamma_p + 1} \left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{p1}^2 \right) \right]^{\frac{\gamma_p + 1}{2(\gamma_p - 1)}}} \quad (4)$$

Pressão do fluido primário nas seções 1 e y:

$$\frac{P_{py}}{P_{p1}} = \frac{\left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{p1}^2 \right)^{\frac{\gamma_p}{\gamma_p - 1}}}{\left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{py}^2 \right)^{\frac{\gamma_p}{\gamma_p - 1}}} \quad (5)$$

Fluido secundário da câmara de sucção até seção y (Figura 14)

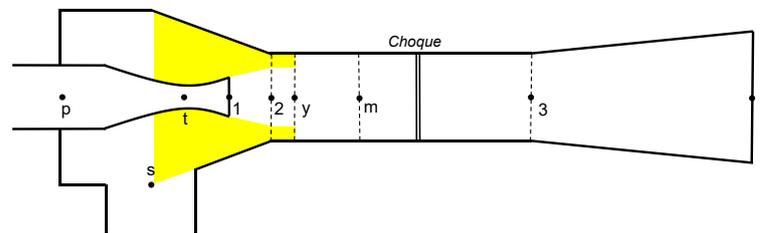


Figura 14. Escoamento do fluido secundário da câmara de sucção até a seção y.

Vazão mássica do fluido secundário:

$$\dot{m}_s = A_{sy} P_s \sqrt{\frac{\gamma_s}{T_s R_s} \left(\frac{2}{\gamma_s + 1} \right)^{\frac{\gamma_s + 1}{\gamma_s - 1}} n_s} \quad (6)$$

Pressão do fluido secundário na entrada da seção de área constante:

$$\frac{P_s}{P_{sy}} = \left(1 + \frac{\gamma_s - 1}{2} M_{sy}^2 \right)^{\frac{\gamma_s}{\gamma_s - 1}} \quad (7)$$

Área da seção constante do ejetor (Figura 15)

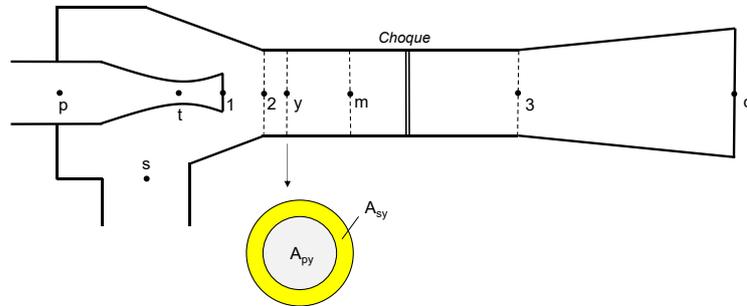


Figura 15. Delimitação das regiões na seção de área constante.

$$A_3 = A_{py} + A_{sy} \quad (8)$$

Temperaturas e número de Mach na seção y (Figura 16)

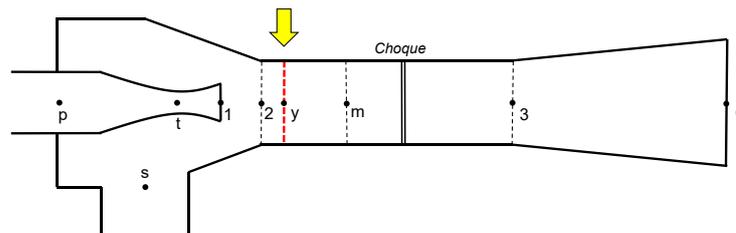


Figura 16. Delimitação da seção y.

Temperatura do fluido primário em y:

$$\frac{T_p}{T_{py}} = 1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{py}^2 \quad (9)$$

Temperatura do fluido secundário em y:

$$\frac{T_s}{T_{sy}} = 1 + \frac{\gamma_s - 1}{2} M_{sy}^2 \quad (10)$$

Mistura dos fluidos a partir da seção y até a m, antes do choque (Figura 17)

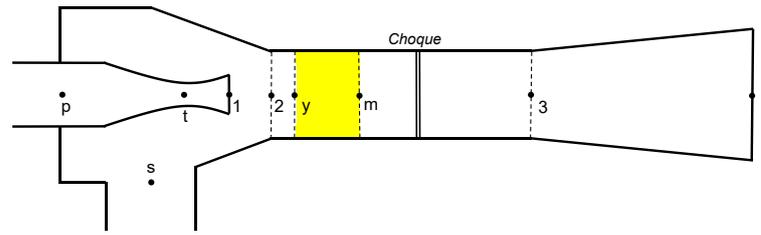


Figura 17. Região de mistura dos fluidos.

Balanço de momento:

$$\dot{\varphi}_m (\dot{m}_p V_{py} + \dot{m}_s V_{sy}) = (\dot{m}_p + \dot{m}_s) V_m \quad (11)$$

Balanço de energia:

$$\dot{m}_p \left(C_{pp} T_{py} + \frac{V_{py}^2}{2} \right) + \dot{m}_s \left(C_{ps} T_{sy} + \frac{V_{sy}^2}{2} \right) = (\dot{m}_p + \dot{m}_s) \left(C_{pm} T_m + \frac{V_m^2}{2} \right) \quad (12)$$

Velocidade do fluido primário:

$$V_{py} = M_{py} a_{py} \quad (13)$$

$$a_{py} = \sqrt{\gamma_p R_p T_{py}} \quad (14)$$

Velocidade do fluido secundário:

$$V_{sy} = M_{sy} a_{sy} \quad (15)$$

$$a_{sy} = \sqrt{\gamma_s R_s T_{sy}} \quad (16)$$

Número de Mach:

$$M_m = \frac{V_m}{a_m} \quad (17)$$

$$a_m = \sqrt{\gamma_m R_m T_m} \quad (18)$$

Fluido misturado através do choque da seção m até 3 (Figura 18)

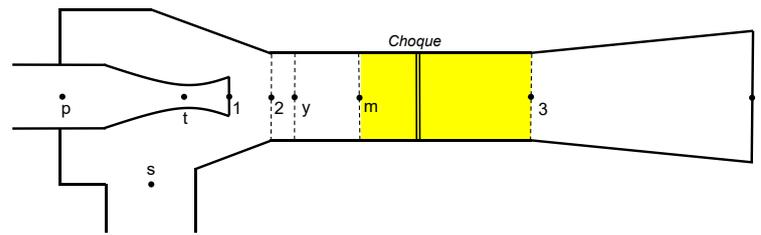


Figura 18. Escoamento do fluido misturado da seção m até a 3.

Pressão:

$$\frac{P_3}{P_m} = \frac{1 + \gamma_m M_m^2}{1 + \gamma_m M_3^2} \quad (19)$$

Número de Mach:

$$M_3^2 = \frac{M_m^2 + \frac{2}{\gamma_m - 1}}{\frac{2M_m^2 \gamma_m}{\gamma_m - 1} - 1} \quad (20)$$

Fluido misturado através do difusor até a saída do ejetor (Figura 19)

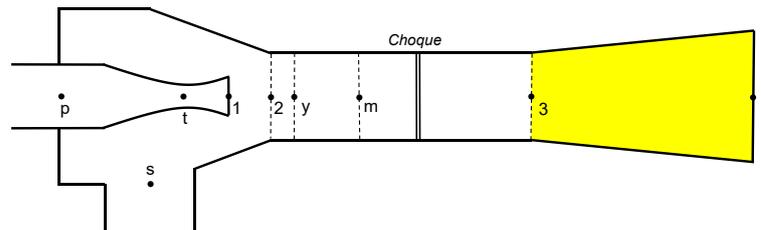


Figura 19. Escoamento do fluido misturado da seção m até a 3.

$$\frac{P_c}{P_3} = \left(1 + \frac{\gamma_m - 1}{2} M_3^2\right)^{\frac{\gamma_m}{\gamma_m - 1}} \quad (21)$$

O modelo apresentado anteriormente é descrito por muitas equações e parâmetros. Diante disso, Zhu et al. (2008) desenvolveram uma modelagem ainda mais simples para representar os ejetores com base no trabalho de Huang et al. (1999).

Zhu et al. (2008)

O modelo desenvolvido por Zhu et al. (2008) é descrito pela seguinte equação:

$$\omega = k_1 \alpha^m \left[1 - k_2 \alpha^{\frac{-\gamma-1}{4\gamma}} \left(\alpha^{\frac{1-\gamma}{\gamma}} - 1 \right)^{-\frac{1}{4}} \right] \quad (22)$$

Em que:

$\omega = m_s/m_p$ (razão entre as vazões mássicas, kg s^{-1} , dos fluidos secundário e primário);

$\alpha = P_s/P_p$ (razão entre as pressões dos fluidos secundário e primário);

$\gamma = C_p/C_v$ (coeficiente de expansão adiabática do fluido primário);

C_p é a capacidade térmica a pressão constante, $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$;

C_v é a capacidade térmica a volume constante, $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$;

k_1 , k_2 e m são parâmetros determinados experimentalmente.

Esse modelo foi desenvolvido originalmente para controle e otimização de ejetores e conseguiu se ajustar bem a dados experimentais. Entretanto, uma desvantagem desse e de outros modelos simplificados é a utilização de parâmetros experimentais. No trabalho de Zhu et al. (2008), os parâmetros ($k_1 = 8,1802$; $k_2 = 0,1471$; $m = 0,7392$) foram determinados para ejetores cujo fluido primário era o gás refrigerante R141b. Esses fatores limitam muito a aplicação da metodologia, uma vez que os fluidos primários podem ser diversos.

2.4.4 Ejetores a vapor orgânico

Normalmente, o vapor de água é utilizado como fluido primário em sistemas de ejetores. Todavia, existem processos em que a entrada de água não é desejada. Assim, nesses casos, é comum substituir o vapor de água por vapores orgânicos, como o etileno glicol, o ciclohexano, o metanol e até mesmo o butanol (CHEM, 2017; GRAHAM, 2021).

Vapores de etileno glicol, em especial, são aplicados industrialmente na produção de poliéster, a exemplo do polietileno de tereftalato (PET). Nessas fábricas, o etileno glicol funciona como fluido primário do ejetor, que é responsável por gerar vácuo nos reatores de policondensação. Além de ser empregado nos ejetores, esse composto atua como solvente no próprio processo. Essa integração permite a redução de custos operacionais. Ainda, há uma

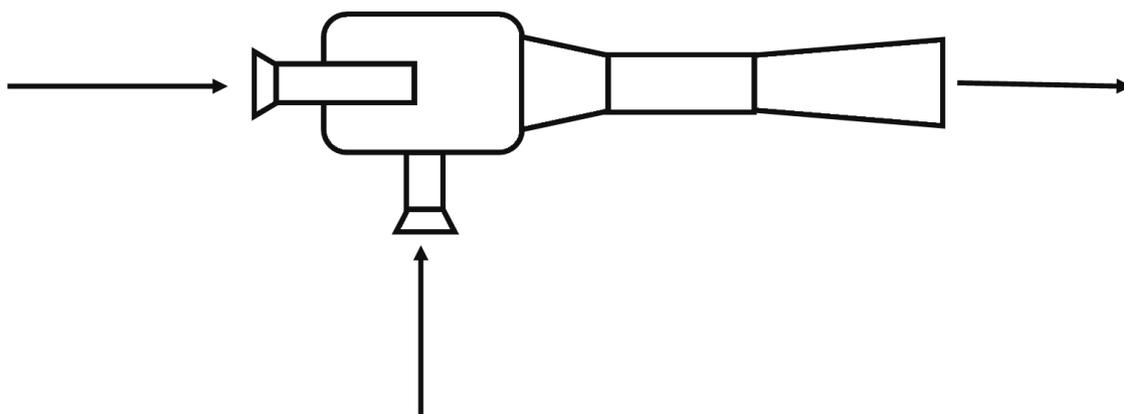
diminuição de contaminação e corrosão causados pela presença de água (CHEM, 2017; KORTING, 2021). Como o etileno glicol apresenta um alto ponto de ebulição, é comum que esses sistemas possuam condensadores entre os ejetores para reduzir a demanda desse fluido (CHEM, 2017)

Com base nesse raciocínio, ejetores operados com etileno glicol poderiam ser utilizados para gerar o vácuo na fermentação ABE, onde a entrada adicional de água não é desejada. Ainda, esse solvente poderia ser reaproveitado no processo na separação dos produtos na destilação extrativa, como será descrito no capítulo a seguir.

CAPÍTULO 3

Metodologia

Neste capítulo, explicamos cada etapa da metodologia. O texto é dividido nas seguintes seções: Definição de componentes e propriedades no simulador; Simulação do processo com ejetores; Simulação do processo com compressores; Integração energética e Análise econômica.



3.1 Definição de componentes e propriedades no simulador

Inicialmente, especificamos os componentes e as propriedades necessárias para o funcionamento do simulador.

3.1.1 Especificação dos Componentes

Todos os componentes envolvidos na simulação foram inseridos no Aspen Plus®. A maior parte das substâncias já estavam presentes no banco de dados do simulador e por isso estão definidas como tipo convencional (Figura 20). Todavia, foi necessário adicionar um componente hipotético $\text{CH}_{1,8}\text{O}_{0,5}\text{N}_{0,2}$, chamado de *Zymo*, para representar o crescimento dos microrganismos na etapa de fermentação (Wooley e Putsche, 1996). Por se referir aos microrganismos, foi especificado que $\text{CH}_{1,8}\text{O}_{0,5}\text{N}_{0,2}$ seria um sólido.

	Component ID	Type	Component name	Alias
▶	GLUCOSE	Conventional	DEXTROSE	C6H12O6
▶	H2O	Conventional	WATER	H2O
▶	CO2	Conventional	CARBON-DIOXIDE	CO2
▶	H2	Conventional	HYDROGEN	H2
▶	ACETONA	Conventional	ACETONE	C3H6O-1
▶	BUTANOL	Conventional	N-BUTANOL	C4H10O-1
▶	ETANOL	Conventional	ETHANOL	C2H6O-2
▶	AC-BUT	Conventional	N-BUTYRIC-ACID	C4H8O2-1
▶	AC-ACET	Conventional	ACETIC-ACID	C2H4O2-1
▶	NH3	Conventional	AMMONIA	H3N
▶	ZYMO	Solid		
▶	ETHYL-01	Conventional	ETHYLENE-GLYCOL	C2H6O2
▶				

Figura 20. Componentes utilizados na simulação no Aspen Plus®.

Algumas das propriedades do $\text{CH}_{1,8}\text{O}_{0,5}\text{N}_{0,2}$ também foram fornecidas ao simulador em *User Defined* (Tabela 2). Essas informações são importantes para que o Aspen Plus® consiga realizar os balanços de massa e de energia.

Tabela 2. Propriedades do $\text{CH}_{1,8}\text{O}_{0,5}\text{N}_{0,2}$ inseridas no Aspen Plus®.

Propriedades	Valores	Código no Aspen Plus®
Massa molar (g/mol)	24,63	MW
Entalpia de formação do sólido (J/kmol)	$-1,305 \times 10^8$	DHSFRM
Densidade (g/cm ³)	1,5	RHOM

Fonte: Wooley e Putsche, 1996.

3.1.2 Definição do modelo termodinâmico

Definimos que o método termodinâmico global da simulação era o UNIQU-HOC que é uma combinação de diversos modelos. O UNIQU-HOC considera:

- O modelo UNIQUAC de coeficientes de atividade para a fase líquida;
- A equação de estado de Hayden-O'Connell para a fase vapor;
- O modelo de Rackett para o cálculo do volume molar de líquido;
- A Lei de Henry para componentes supercríticos.

Este método é recomendado para sistemas contendo compostos orgânicos que podem se associar na fase vapor formando dímeros, como é o caso do ácido acético que é um dos produtos da fermentação. Essa associação interfere no equilíbrio de fases e na entalpia da mistura e por isso é importante que seja considerada. Além disso, o mesmo método já foi utilizado e validado em trabalhos anteriores do grupo de pesquisa, o que motivou a escolha (MARIANO et al., 2011b).

O equilíbrio de fases entre o butanol e a água precisa ser bem representado na simulação para gerar uma maior confiabilidade dos resultados. Os parâmetros binários do modelo UNIQUAC para butanol/água fornecidos pelo Aspen Plus® se adequam bem a dados experimentais de equilíbrio líquido-vapor a uma pressão de 1 atm. Todavia, para as condições operacionais do projeto (baixa pressão e baixa concentração de butanol), o modelo não é tão preciso, principalmente na fase líquida (MARIANO et al., 2011b). Assim, os valores desses parâmetros foram substituídos no simulador por dados da literatura (Fischer e Gmehling, 1994) que se ajustam melhor às condições do estudo. Os parâmetros no formato DECHEMA são: $A_{IJ} = 506,31$; $A_{JI} = 128,55$; $RI = 0,92$; $RJ = 3,4543$; $QI = 1,4$; $QJ = 3,052$ (em que a água é o componente I e o butanol, o componente J). Os parâmetros binários que não foram fornecidos pelo banco de dados do Aspen Plus® foram estimados utilizando a metodologia UNIFAC. Nas

especificações do modelo, também consideramos que o CO₂ e o H₂ seriam componentes de Henry por estarem bastante diluídos no líquido ao longo do processo.

3.1.3 Definição de outras propriedades

Em *Properties Sets*, especificamos como respostas das simulações algumas propriedades que foram muito importantes em outras etapas do projeto, em especial na modelagem dos ejetores (Tabela 3).

Tabela 3. Propriedades adicionadas como resposta da simulação.

Propriedades	Código no Aspen Plus®	Unidade
Concentração mássica de um componente em uma mistura	MASSCONC	g/cm ³
Razão de capacidade térmica	CPCVMX	-
Massa molar de uma mistura	MWMX	kg/kmol
Capacidade térmica a pressão constante para uma mistura	CPMX	J/(kg K)

3.2 Simulação do processo com ejetores

Após a definição dos componentes e propriedades, a próxima etapa foi a simulação da planta com ejetores. O processo estudado neste trabalho é constituído de quatro Unidades (Figura 21). Na Unidade 1, acontece a fermentação a vácuo que irá produzir ABE e gases de fermentação (CO₂ e H₂). Na Unidade 2, os gases são lavados com água em uma coluna de absorção para recuperar produtos residuais. A Unidade 3 é responsável por gerar o vácuo utilizando ejetores com etileno glicol e condensar os vapores contendo o produto. A Unidade 4, por fim, separa os produtos pela destilação.

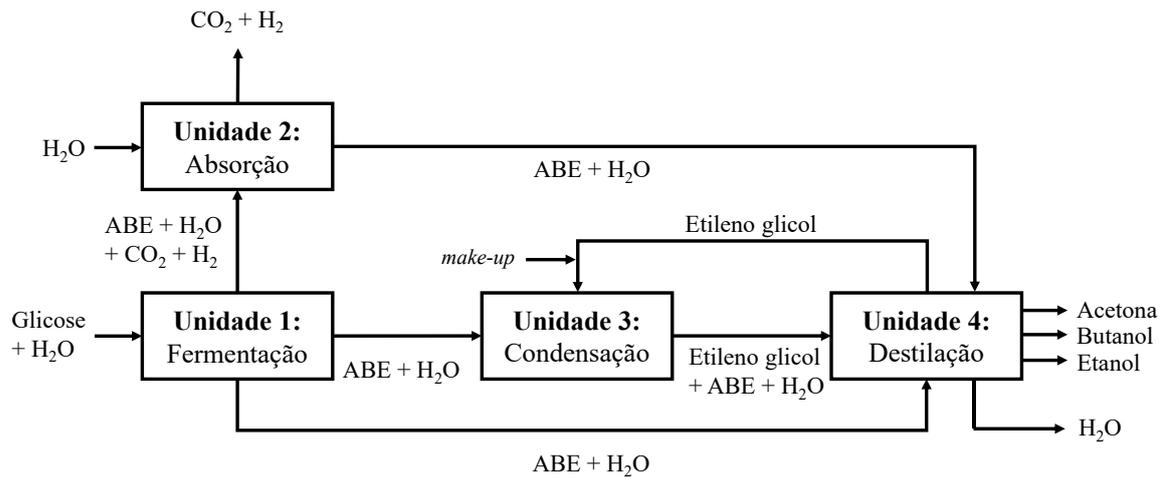


Figura 21. Fluxograma do processo estudado no projeto.

As Unidades foram desenvolvidas em blocos separados no simulador utilizando a ferramenta *Hierarchy* (Figura 22). Essa ferramenta permite com que o fluxograma fique mais organizado e facilita a desativação ou ativação de cada uma das Unidades quando necessário.

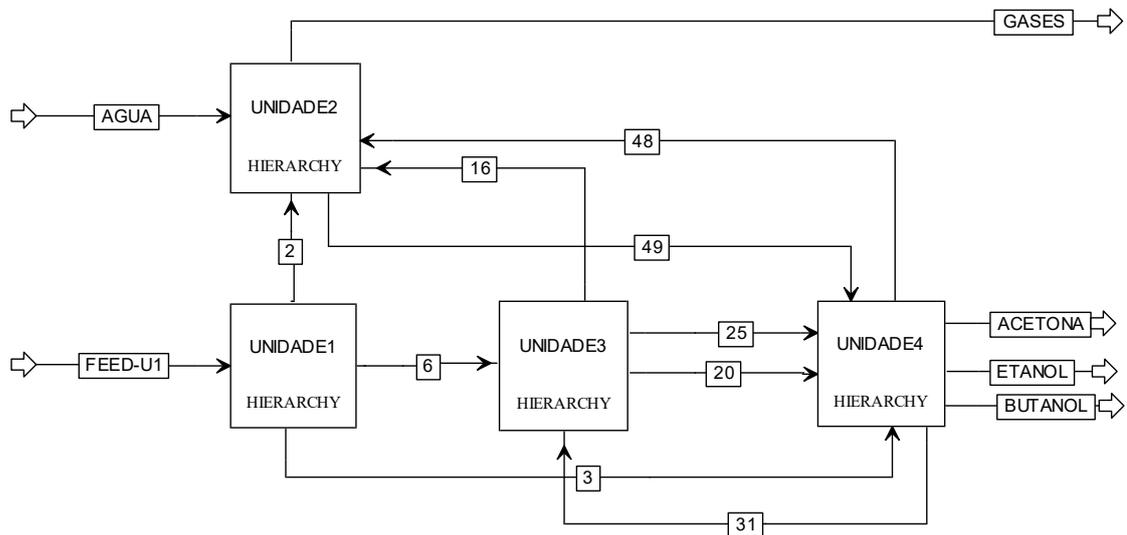


Figura 22. Fluxograma em blocos no Aspen Plus®.

A seguir, detalhamos a metodologia empregada em cada Unidade.

3.2.1 Simulação da Unidade 1 – Fermentação

A Unidade 1 foi baseada nos trabalhos de Mariano et al. (2011b). Estes autores simularam a fermentação *flash* para o sistema ABE considerando diferentes cenários. Neste sentido, a configuração da Unidade 1 do presente trabalho e seus parâmetros de entrada foram especificados de acordo com o cenário 2 desta literatura, que apresentou uma boa performance. O fluxograma utilizado na simulação está mostrado na Figura 23:

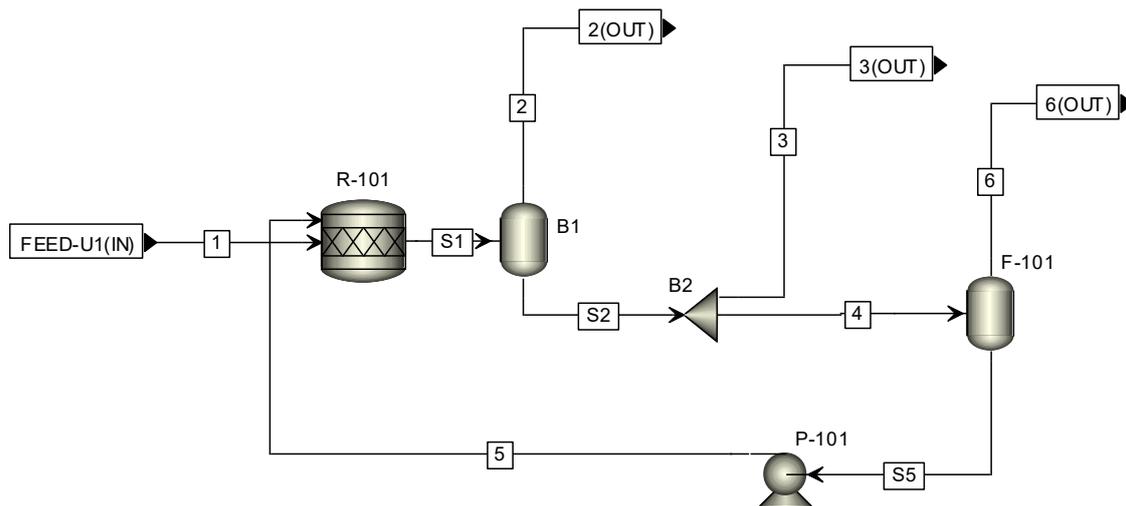


Figura 23. Fluxograma da Unidade 1 simulada no Aspen Plus®.

Condições de alimentação

A corrente de alimentação (corrente 1) foi definida como uma solução aquosa de glicose (150 g/L) a 37°C, 1 atm e vazão de 50 m³/h. Essa solução também apresenta certo teor de NH₃ (0,1 g/L) que é requerido nas reações da etapa de fermentação.

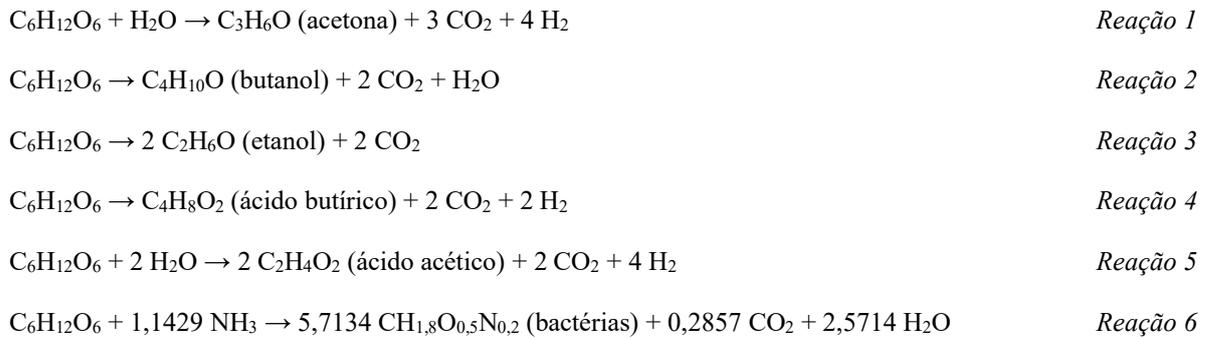
Fermentador (R-101)

Para simular o fermentador no Aspen Plus®, foram necessários dois tipos de equipamentos: um reator (R-101) junto com um tanque flash (B1). Na prática, esse tanque é fictício, pois serve apenas para simular a saída de gases da fermentação que ocorre no reator.

A cinética das reações de fermentação é desconhecida, enquanto a estequiometria e a conversão são conhecidas. Logo, com base nessas restrições, o reator mais apropriado é o

RStoic. Para simular o tanque flash, utilizamos o bloco *Flash2*. Definimos também que o reator e o tanque *flash* fictício estão a 1 atm e 37°C. Esta temperatura está dentro do intervalo ótimo para a fermentação ABE.

As reações de 1 a 6 foram inseridas no reator *RStoic*. A reação 6 representa o crescimento dos microrganismos por meio da formação do composto hipotético $\text{CH}_{1,8}\text{O}_{0,5}\text{N}_{0,2}$ já mencionado previamente.



As conversões de glicose para as reações de 1 a 5 foram estimadas conforme os resultados de rendimento fornecidos por Mariano et al. (2011b) (Tabela 4), mantendo uma proporção de 3:6:1 (acetona/butanol/etanol). Consideramos que o excedente de glicose seria consumido na reação 6. Além disso, foi especificado no simulador que as reações ocorrem em paralelo.

Tabela 4. Rendimento e conversões globais de glicose calculadas para as reações de 1 a 6.

Reação	Rendimento (g/ g glicose)	Conversão
(1)	0.100	0.3102
(2)	0.200	0.4861
(3)	0.033	0.0655
(4)	0,031	0.0632
(5)	0,033	0.0501
(6)	0,019	0.0249

Tanque Flash (F-101)

Definimos que 92% em massa da corrente líquida que sai do reator vai para o tanque *flash* F-101. Ainda, definimos que o tanque opera a 37 °C e a porcentagem de vaporização é de 7 % em base molar. A corrente líquida que sai desse tanque é bombeada a 1 atm para o reator.

3.2.2 Simulação da Unidade 2 – Absorção

A Unidade 2 deste trabalho também foi baseada em Mariano et al. (2011b). Nesta etapa, os gases da fermentação são lavados com água que irá absorver ABE residual. O fluxograma do processo está indicado na Figura 24:

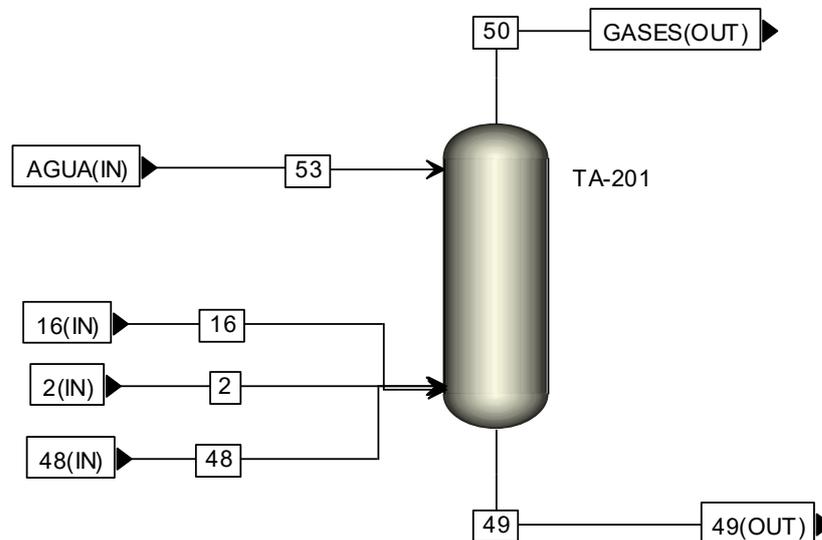


Figura 24. Fluxograma da Unidade 2 simulada no Aspen Plus®.

Torre de Absorção (TA-201)

Para simular a torre de absorção, utilizamos o bloco *RadFrac* sem condensador e refeedor. A torre foi especificada com 10 estágios em equilíbrio termodinâmico. Uma corrente de água a 25°C e 1 atm (corrente 53) alimenta o estágio 1 da torre a uma vazão de 8 m³/h. As correntes com gases da fermentação (correntes 2, 16 e 48), contendo ABE residual, provém das outras Unidades e alimentam a torre no último estágio. Após lavar os gases, a água contendo ABE segue para a Unidade 4 para os produtos serem separados.

3.2.3 Simulação da Unidade 3 – Condensação

Diferente das Unidades 1 e 2, a Unidade 3, formada pelos ejetores, não tinha uma configuração pré-estabelecida. O sistema precisou ser desenvolvido com o propósito de gerar o vácuo na Unidade 1 e condensar os produtos para a Unidade 4. Outro desafio foi simular o

ejetor. O Aspen Plus® não possui um bloco de ejetores em sua biblioteca de equipamentos. Todavia, este simulador tem uma ferramenta chamada *Calculator Block* que permite criar um bloco de equipamento customizado por meio da implementação de um código em linguagem *Fortran 77* ou até mesmo utilizando o *Excel®*. Para tanto, é necessário inserir no simulador um modelo matemático que represente o ejetor. Assim, parte da pesquisa foi dedicada a entender o comportamento desse equipamento e definir um modelo que fosse adequado para a simulação.

Modelagem dos ejetores

Nesta dissertação, avaliamos os modelos propostos por Zhu et al. (2008) e por Huang et al. (1999), conforme relatado no Anexo 1. Observamos que, para uma etapa inicial de projeto, o modelo de Huang et al. (1999) consegue representar bem o funcionamento de ejetores em diferentes condições. Além disso, fornece todos os parâmetros de processo necessário para a simulação e para uma estimativa do custo de investimento do equipamento. Assim, optamos por escolher essa modelagem. Algumas considerações e simplificações matemáticas foram realizadas a partir das equações originais desse modelo. Isso foi feito com o objetivo de fazer distinção entre as propriedades do fluido primário e secundário e facilitar a implementação das equações no simulador (Anexo 1).

Assim, as principais equações do modelo modificado são apresentadas a seguir (Equações 23 a 48). Os subscritos das equações foram escritos conforme a Figura 25.

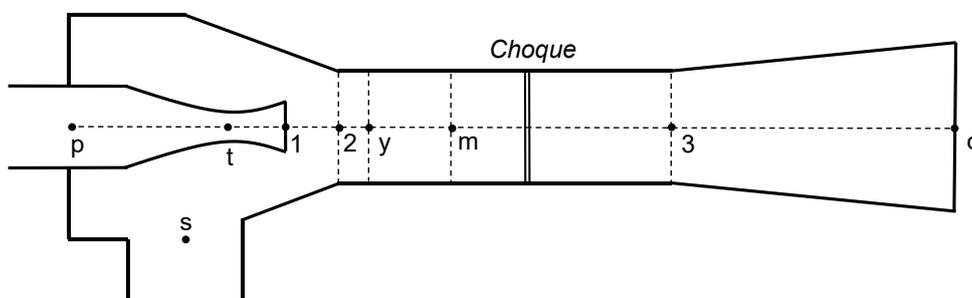


Figura 25. Identificação das seções no ejetor.

Nomenclatura

A	Área (m ²)
C _p	Capacidade térmica a pressão constante (J kg ⁻¹ K ⁻¹)
C _v	Capacidade térmica a volume constante (J kg ⁻¹ K ⁻¹)
D	Diâmetro (m)
M	Número de Mach
m	vazão mássica (kg/s)
MM	Massa molar (kg kmol ⁻¹)
n	Eficiência isentrópica
P	Pressão (Pa)
R	Constante universal dos gases específica (J kg ⁻¹ K ⁻¹)
R _g	Constante universal dos gases (J kmol ⁻¹ K ⁻¹)
T	Temperatura (K)
V	Velocidade do gás (m/s)
γ	Coefficiente de expansão adiabática (=C _p /C _v)
φ	Coefficiente de perda

Subscritos

1	Saída do bocal
2	Início da seção de área constante no ejetor
3	Saída da seção de área constante
c	Saída do ejetor
m	Fluido após mistura
p	Fluido primário
py	Fluido primário na seção y
s	Fluido secundário
sy	Fluido secundário na seção y
t	Garganta do bocal
y	Localização do início da mistura dos fluidos

Área (A_t) e diâmetro (D_t) da garganta do ejetor:

$$A_t = \frac{\dot{m}_p}{P_p \sqrt{\frac{\gamma_p}{T_p R_p} \left(\frac{2}{\gamma_p + 1} \right)^{\frac{\gamma_p + 1}{\gamma_p - 1}} n_p}} \quad (23)$$

$$D_t = 2 \sqrt{\frac{A_t}{\pi}} \quad (24)$$

Em que:

$$R_p = \frac{R_g}{MM_p} \quad (25)$$

n_p = eficiência isentrópica para o fluido primário no bocal.

Área (A_3) e diâmetro (D_3) da seção reta do ejetor:

$$A_3 = A_t \left(\frac{\omega}{\alpha \sqrt{\frac{MM_s T_p n_s}{MM_p T_s n_p} k_3}} + \varphi_p k_1 \alpha^{\frac{-\gamma_p - 1}{2\gamma_p}} \left[k_2 \alpha^{\frac{1 - \gamma_p}{\gamma_p}} - 1 \right]^{-\frac{1}{2}} \right) \quad (26)$$

$$D_3 = 2 \sqrt{\frac{A_3}{\pi}} \quad (27)$$

Em que:

$$k_1 = \left(\frac{2}{\gamma_p + 1} \right)^{\frac{(\gamma_p + 1)}{2(\gamma_p - 1)}} \left(\frac{1 + \gamma_s}{2} \right)^{\frac{(\gamma_p + 1) \gamma_s}{2(\gamma_s - 1) \gamma_p}} \left(\frac{2}{\gamma_p - 1} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (28)$$

$$k_2 = \left(\frac{1 + \gamma_s}{2} \right)^{\frac{(\gamma_p - 1) \gamma_s}{(\gamma_s - 1) \gamma_p}} \quad (29)$$

$$k_3 = \left(\frac{2}{\gamma_s + 1} \right)^{\frac{(\gamma_s + 1)}{2(\gamma_s - 1)}} \left(\frac{2}{\gamma_p + 1} \right)^{-\frac{(\gamma_p + 1)}{2(\gamma_p - 1)}} \quad (30)$$

n_s = eficiência isentrópica para o fluido secundário na alimentação.

φ_p = coeficiente de perda entre as seções 1 a y.

Número de Mach do fluido primário na seção y (M_{py}):

$$M_{py} = \left\{ \left(\frac{2}{\gamma_p - 1} \right) \left[\alpha^{\frac{1-\gamma_p}{\gamma_p}} \left(\frac{1 + \gamma_s}{2} \right)^{\frac{(\gamma_p-1)\gamma_s}{(\gamma_s-1)\gamma_p}} - 1 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (31)$$

Temperatura dos fluidos primário (T_{py}) e secundário (T_{sy}) na seção y :

$$T_{py} = \frac{T_p}{1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{py}^2} \quad (32)$$

$$T_{sy} = \frac{2T_s}{1 + \gamma_s} \quad (33)$$

Velocidades dos fluidos primário (V_{py}) e secundário (V_{sy}) na seção y :

$$V_{py} = M_{py} \sqrt{\gamma_p R_p T_{py}} \quad (34)$$

$$V_{sy} = \sqrt{\gamma_s R_s T_{sy}} \quad (35)$$

Em que:

$$R_s = \frac{R_g}{MM_s} \quad (36)$$

Velocidade do fluido misturado na seção m antes do choque (V_m):

$$V_m = \frac{\varphi_m (V_{py} + \omega V_{sy})}{(1 + \omega)} \quad (37)$$

Em que:

φ_m = coeficiente de perda por fricção.

Propriedades do fluido misturado na seção m antes do choque:

$$C_{pm} = \frac{C_{pp} + \omega C_{ps}}{(1 + \omega)} \quad (38)$$

$$\gamma_m = \frac{\gamma_p + \omega \gamma_s}{(1 + \omega)} \quad (39)$$

Temperatura do fluido misturado na seção m antes do choque (T_m):

$$T_m = \frac{\left(C_{pp} T_{py} + \frac{V_{py}^2}{2} \right) + \omega \left(C_{ps} T_{sy} + \frac{V_{sy}^2}{2} \right)}{(1 + \omega) C_{pm}} - \frac{V_m^2}{2 C_{pm}} \quad (40)$$

Número de Mach do fluido misturado na seção m antes do choque (M_m):

$$M_m = \frac{V_m}{\sqrt{\gamma_m R_m T_m}} \quad (41)$$

Em que:

$$R_m = \frac{R_g}{M M_m} \quad (42)$$

Pressão do fluido misturado na seção m antes do choque (P_m):

$$P_m = \frac{P_s}{\left(\frac{1 + \gamma_s}{2} \right)^{\frac{\gamma_s}{\gamma_s - 1}}} \quad (43)$$

Número de Mach do fluido misturado na seção 3 depois do choque (M_3):

$$M_3 = \sqrt{\left(\frac{M_m^2 + \frac{2}{\gamma_m - 1}}{\frac{2 M_m^2 \gamma_m}{\gamma_m - 1} - 1} \right)} \quad (44)$$

Pressão do fluido misturado na seção 3 depois do choque (P_3):

$$P_3 = P_m \left(\frac{1 + \gamma_m M_m^2}{1 + \gamma_m M_3^2} \right) \quad (45)$$

Temperatura do fluido misturado na seção 3 depois do choque (T_3):

$$T_3 = T_m \left(\frac{P_3 M_3}{P_m M_m} \right)^2 \quad (46)$$

Temperatura do fluido misturado na saída do ejetor (T_c):

$$T_c = T_3 \left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_3^2 \right) \quad (47)$$

Pressão do fluido misturado na saída do ejetor (P_c):

$$P_c = P_3 \left(1 + \frac{\gamma_m - 1}{2} M_3^2 \right)^{\frac{\gamma_m}{\gamma_m - 1}} \quad (48)$$

Consideramos que $n_p = 0.95$, $n_s = 0.80$, $\phi_p = 0.85$ e $\phi_m = 0.91$, conforme a análise mostrada no Anexo 1.

Implementação do modelo no Aspen Plus®

Após sua definição, o modelo foi implementado no Aspen Plus®. Inserimos no simulador um bloco fictício de um misturador para representar o ejetor (Figura 26).

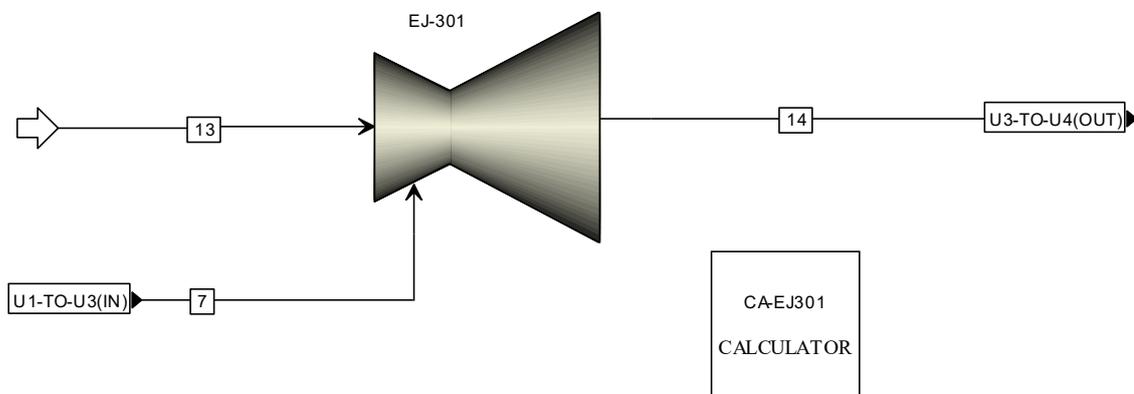


Figura 26. Bloco fictício de um misturador representando o ejetor no Aspen Plus®.

A corrente gasosa 7, que vem do tanque flash F-101 da Unidade 1, corresponde ao fluido secundário a uma vazão de 22.235 ton/h e pressão de 0.0639 atm. A corrente 13, por sua vez, corresponde ao fluido primário constituído de vapor de etileno glicol saturado.

Ferramenta Calculator Block

Para inserir o modelo no simulador, foi utilizado o *Calculator Block*. Nesta ferramenta, definimos as variáveis importadas (ou de entrada) e exportadas (ou de saída) do modelo (Figura 27). Ao todo, foram adicionadas 41 variáveis, cujas especificações completas podem ser encontradas no Anexo 2.

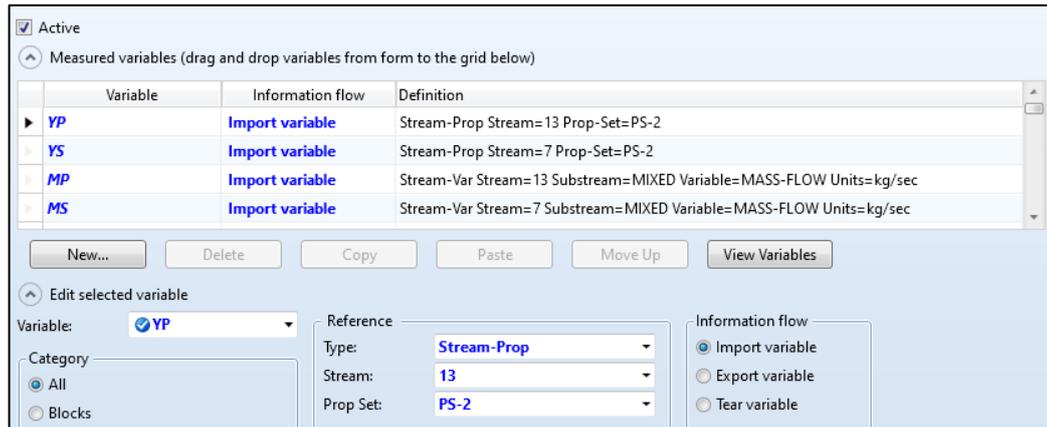


Figura 27. Definição das variáveis importadas e exportadas no *Calculator Block* no *Aspen Plus*®.

O código executável e as declarações em Fortran 77 também foram inseridos no *Calculator Block* (Figura 28). O código completo se encontra na Figura 29. Foi definido que a sequência de execução da ferramenta acontecesse conforme as variáveis importadas e exportadas.

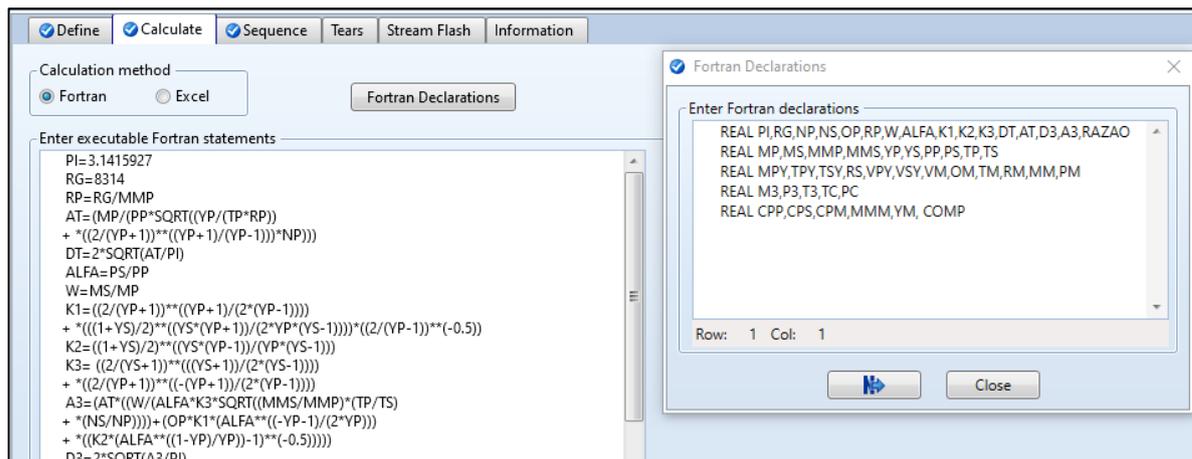


Figura 28. Inserção do código no *Aspen Plus*®.

Fortran declarations

```

REAL PI, RG, NP, NS, OP, RP, W, ALFA, K1, K2, K3, DT, AT, D3, A3, RAZAO
REAL MP, MS, MMP, MMS, YP, YS, PP, PS, TP, TS
REAL MPY, TPY, TSY, RS, VPY, VSY, VM, OM, TM, RM, MM, PM
REAL M3, P3, T3, TC, PC
REAL CPP, CPS, CPM, MMM, YM, COMP

```

Executable Fortran statements

```

PI=3.1415927
RG=8314
RP=RG/MMP
AT=(MP/(PP*SQRT((YP/(TP*RP))
+*((2/(YP+1))*((YP+1)/(YP-1))*NP)))
DT=2*SQRT(AT/PI)
ALFA=PS/PP
W=MS/MP
K1=((2/(YP+1))*((YP+1)/(2*(YP-1))))
+*((1+YS)/2)*((YS*(YP+1))/(2*YP*(YS-1)))*((2/(YP-1))*(-0.5))
K2=((1+YS)/2)*((YS*(YP-1))/(YP*(YS-1)))
K3=((2/(YS+1))*((YS+1)/(2*(YS-1))))
+*((2/(YP+1))*((-YP+1)/(2*(YP-1))))
A3=(AT*(W/(ALFA*K3*SQRT((MMS/MMP)*(TP/TS)
+*(NS/NP))))+(OP*K1*(ALFA**((-YP-1)/(2*YP)))
+*((K2*(ALFA**((1-YP)/YP))-1)**(-0.5))))
D3=2*SQRT(A3/PI)
RAZAO=A3/AT
MPY=((2/(YP-1))*((ALFA**((1-YP)/YP))
+*((1+YS)/2)*((YS*(YP-1))/(YP*(YS-1))))-1)**(0.5)
TPY=TP/(1+((YP-1)/2)*(MPY**2))
TSY=(2*TS)/(1+YS)
RS=RG/MMS
VPY=MPY*SQRT(YP*RP*TPY)
VSY=SQRT(YS*RS*TSY)
VM=(OM*(VPY+W*VSY))/(1+W)
CPM=(CPP+W*CPS)/((1+W))
YM=(YP+W*YS)/((1+W))
TM=((2*CPP*TPY+(VPY**2))+W*(2*CPS*TSY+(VSY**2))-(1+W)
+*(VM**2))/(2*(1+W)*CPM)
RM=RG/MMM
MM=VM/(SQRT(YM*RM*TM))
PM=PS/((1+YS)/2)*((YS/((YS-1)))
M3=SQRT(((MM**2)+(2/(YM-1)))/((2*(MM**2)*YM)/(YM-1))-1))
P3=PM*((1+YM*(MM**2))/(1+YM*(M3**2)))
T3=TM*((P3*M3)/(PM*MM))**2
TC=T3*(1+((YP-1)/2)*(M3**2))
PC=P3*(1+((YM-1)/2)*(M3**2))*((YM/((YM-1)))
COMP = PC/PS

```

Figura 29. Código Fortran 77 completo contendo a modelagem dos ejetores implementado no simulador.

Com a modelagem implementada no simulador, testamos algumas configurações de ejetores, a saber:

- Sistema com 1 ejetor;
- Sistema com múltiplo estágios de ejetores sem condensador;
- Sistema com múltiplo estágios de ejetores com condensador.

Em cada caso, analisamos se o sistema proposto era capaz de gerar o vácuo de 0.0639 atm e ter uma pressão de saída de 1 atm. Considerando essas condições, é possível calcular o fator de compressão (FC) do sistema, conforme a equação abaixo:

$$FC = \frac{P_c}{P_s} = \frac{1}{0.069} = 15.65 \quad (49)$$

Em que:

P_c é a pressão de saída do último ejetor.

P_s a pressão de entrada do fluido secundário do primeiro ejetor.

Logo, o sistema precisa ter um fator de compressão de no mínimo 15.65.

Sistema com 1 ejetor

O primeiro sistema testado foi com apenas 1 ejetor, como mostrado na Figura 26. Inicialmente, definimos que o vapor de etileno glicol seria alimentado com pressão de 10 atm e vazão de 44.5 ton/h, que é o dobro da vazão do fluido secundário. Esses parâmetros foram variados por meio de análises de sensibilidade com o objetivo de compreender a influência dos mesmos sobre o funcionamento do ejetor.

Sistema com múltiplo estágios de ejetores sem condensador

Testamos também um sistema com múltiplos estágios de ejetores sem condensador. Avaliamos sistemas com 2, 3 e 4 estágios de ejetores (Figuras 30, 31 e 32). Para cada ejetor, foi necessário especificar um *Calculator Block* diferente, seguindo o código já apresentado.

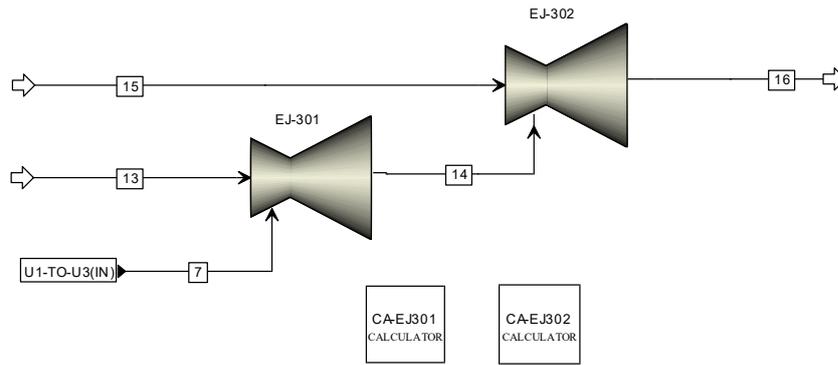


Figura 30. Fluxograma com 2 estágios de ejetores Aspen Plus®.

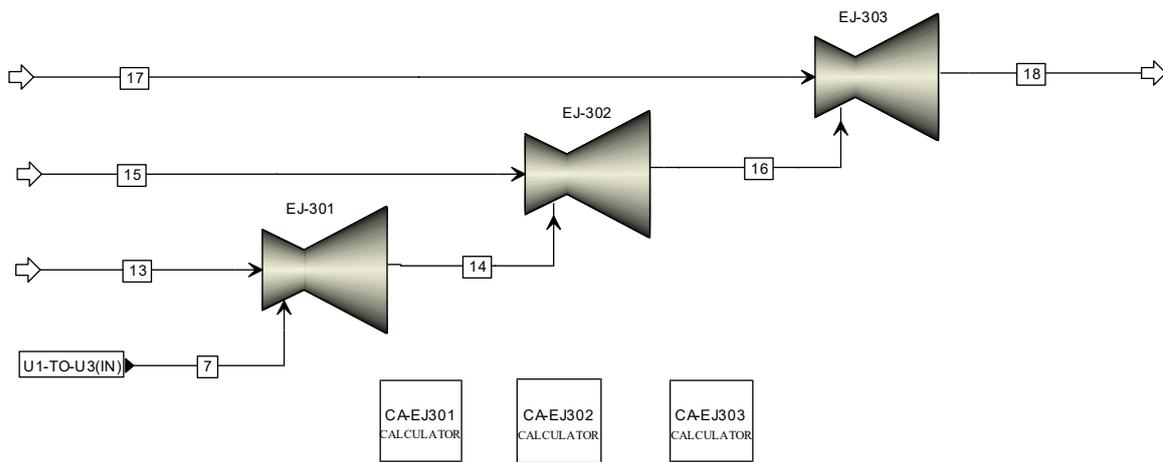


Figura 31. Fluxograma com 3 estágios de ejetores Aspen Plus®.

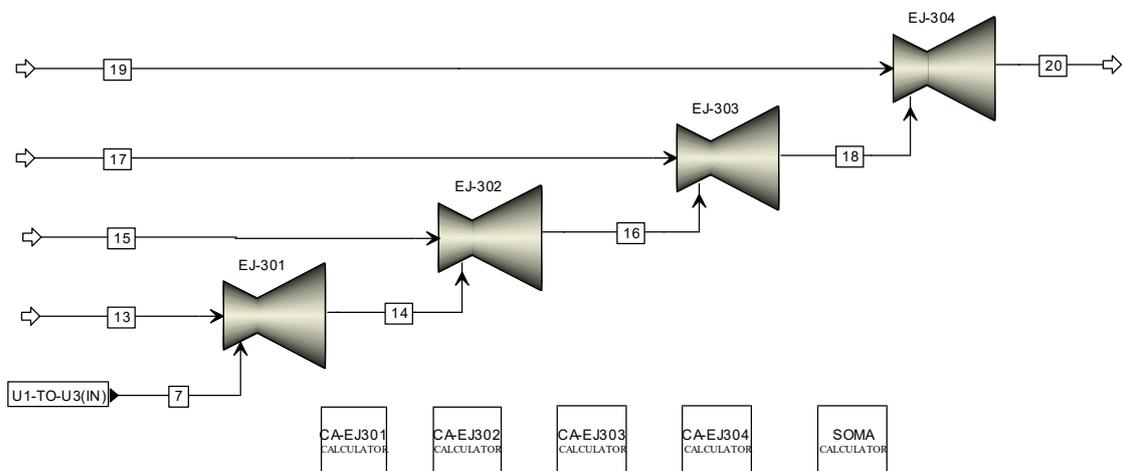


Figura 32. Sistema de ejetores com 4 estágios Aspen Plus®.

Para um sistema com n estágios de ejetores, o fator de compressão de cada ejetor (i) é dado por:

$$FC_i = \frac{P_{ci}}{P_{c(i-1)}} \quad (50)$$

Em que:

P_{ci} é a pressão de saída do ejetor.

$P_{c(i-1)}$ a pressão de saída do ejetor anterior.

O fator de compressão total do sistema (FC), por sua vez, é igual ao produto do fator de compressão de cada equipamento (FC_i):

$$FC = \frac{P_{c1}}{P_s} \times \frac{P_{c2}}{P_{c1}} \times \frac{P_{c3}}{P_{c2}} \times \dots \times \frac{P_{ci}}{P_{c(i-1)}} \times \dots \times \frac{P_{cn}}{P_{c(n-1)}} = \frac{P_c}{P_s} \quad (51)$$

$$FC = FC_1 \times FC_2 \times FC_3 \times \dots \times FC_i \times \dots \times FC_n \quad (52)$$

Idealmente, é desejado que FC_i dos ejetores sejam os mesmos (TURTON et al., 2018).

Assim:

$$FC_i = FC_{ej} \quad (53)$$

Substituindo (53) em (52):

$$FC = FC_{ej}^n \quad (54)$$

$$FC_{ej} = \sqrt[n]{FC} \quad (55)$$

Sabendo que $FC = 15.65$, então:

$$FC_{ej} = \sqrt[n]{15.65} \quad (56)$$

Pela equação 56, é possível calcular o fator de compressão individual de cada ejetor. Esses fatores foram calculados para os diferentes números de estágios de ejetores avaliados. Para

atingir o fator de compressão desejado no Aspen Plus®, utilizamos a ferramenta *Design Spec*. Para tanto, fixamos o valor de FC_{ej} e variamos as vazões de fluido primário.

Sistema com múltiplo estágios de ejetores com condensador

Por fim, avaliamos o acréscimo de condensadores entre os ejetores. Foram testadas quatro possíveis configurações no Aspen Plus®:

- i. Sistema com 2 ejetores e 1 condensador após o primeiro ejetor (Figura 33).

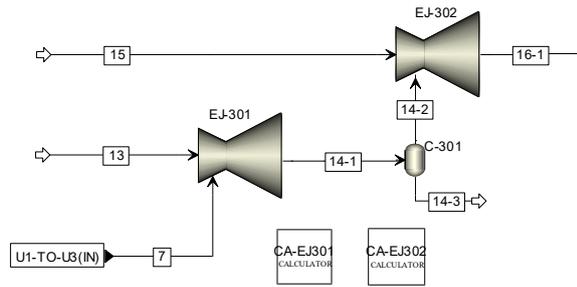


Figura 33. Sistema com dois estágios de ejetores e um condensador após primeiro ejetor no Aspen Plus®.

- ii. Sistema com 3 ejetores e 1 condensador após o primeiro ejetor (Figura 34).

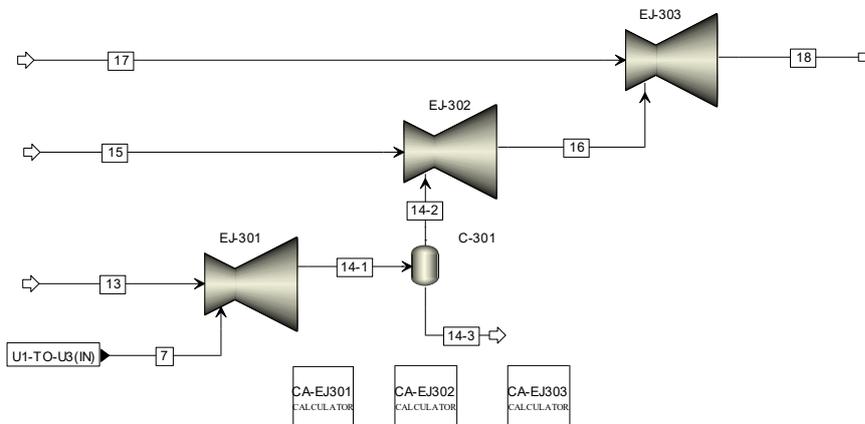


Figura 34. Sistema com três estágios de ejetores e um condensador após primeiro ejetor no Aspen Plus®.

iii. Sistema com 3 ejetores e 1 condensador após o segundo ejetor (Figura 35):

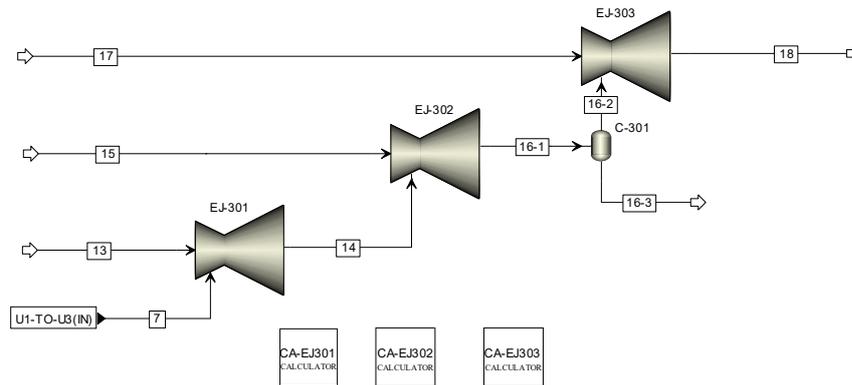


Figura 35. Sistema com três estágios de ejetores e um condensador após segundo ejetor no Aspen Plus®.

iv. Sistema com 3 ejetores e 1 condensador após o primeiro e segundo ejetor (Figura 36):

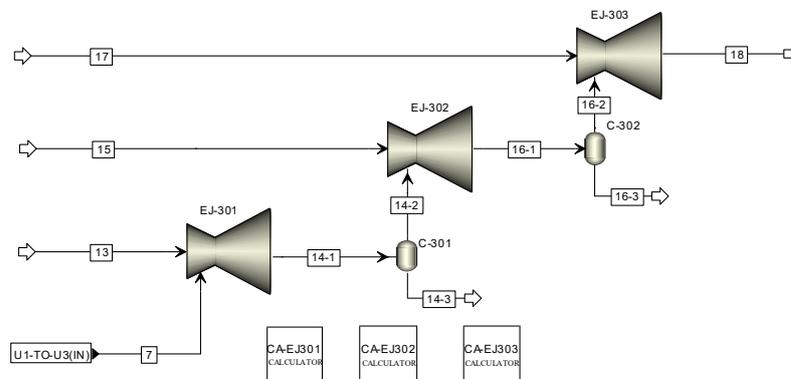


Figura 36. Sistema com três estágios de ejetores e um condensador após primeiro e segundo ejetores no Aspen Plus®.

Os condensadores foram simulados como se fossem tanques *flash* para representar a separação das fases. As frações de vapor dos condensadores foram variadas em cada caso, com o objetivo de compreender o comportamento do sistema.

Após analisar todos os cenários, escolhemos um para dar prosseguimento ao projeto. Além de observar o fator de compressão mínimo, avaliamos também o consumo de fluido primário. Era desejado que o sistema proposto tivesse uma baixa vazão de etileno glicol, uma vez que é caro vaporizar esse fluido.

3.2.4 Simulação da Unidade 4 – Destilação

A proposta da Unidade 4 de purificação (Figura 37) baseia-se na combinação do sistema de destilação extrativa desenvolvido por Dantas (2018) para a recuperação de isopropanol, butanol e acetona com o sistema convencional de desidratação de butanol (MARIANO et al., 2011b). A primeira coluna da Unidade 4 é alimentada com a corrente pobre em ABE formada pelo caldo do fermentador (corrente 1, Figura 37). O produto da base da coluna, a vinhaça, contém água e ácidos orgânicos (acético e butírico). O produto do topo, rico em ABE, é misturado com a corrente de etileno glicol e ABE vinda do sistema de ejetores (corrente 2, Figura 37). A corrente formada pela mistura alimenta a coluna de destilação extrativa onde é “quebrado” o azeótropo etanol-água. Os componentes do topo, etanol e acetona, são separados em uma coluna de destilação. A corrente da base da coluna de desidratação alimenta a coluna de recuperação do solvente. No topo desta coluna são obtidos butanol e água, que são separados em um sistema de duas colunas conectadas a um decantador. Por fim, a corrente de solvente (etileno glicol) é vaporizada e enviada ao sistema de ejetores.

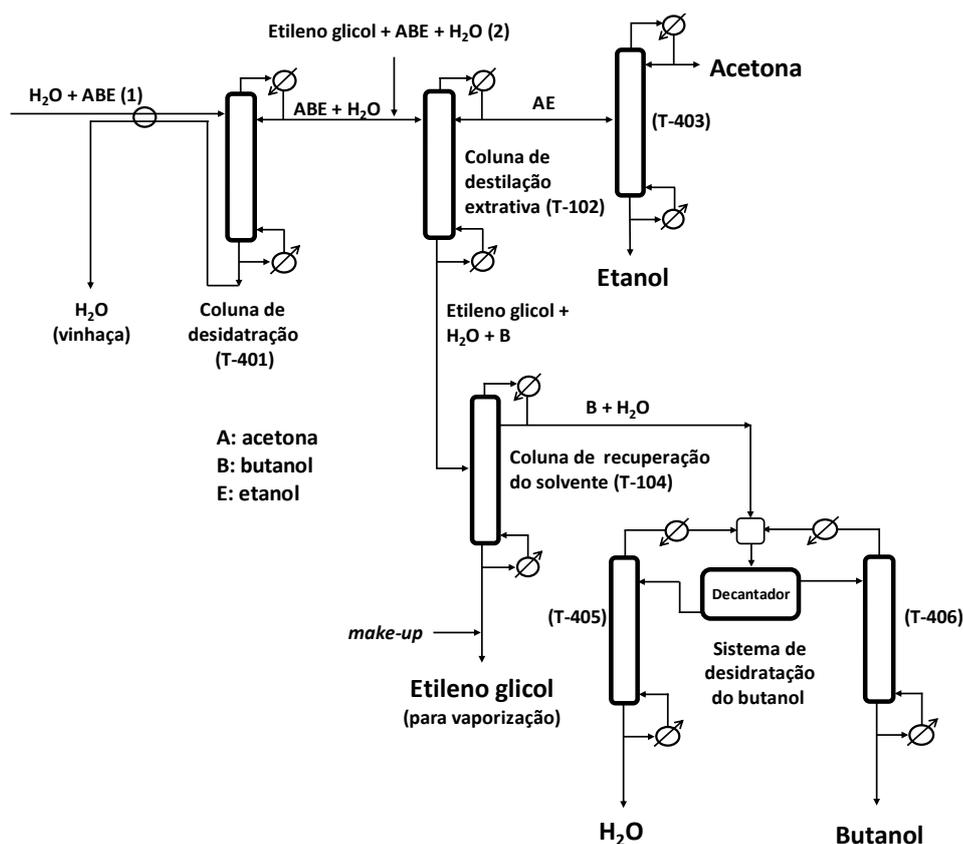


Figura 37. Purificação de produtos integrada com a recuperação do solvente.

As colunas de destilação foram simuladas usando o modelo rigoroso *Radfrac* do Aspen Plus® (Figura 38). Em todos os casos, considerou-se equilíbrio nos estágios. As especificações das colunas (número de pratos, razão de refluxo, vazão de destilado, prato de alimentação, pressão) foram definidas inicialmente com base nos trabalhos de Dantas (2018) e Mariano et al. (2011a). Em seguida, os valores foram ajustados com o propósito de obter as concentrações desejadas de produto (Conc. Acetona > 98%, Conc. Butanol > 99%, Conc. Etanol > 90% massa/massa) e um menor consumo energético. A seguir, explicamos mais detalhadamente sobre cada torre.

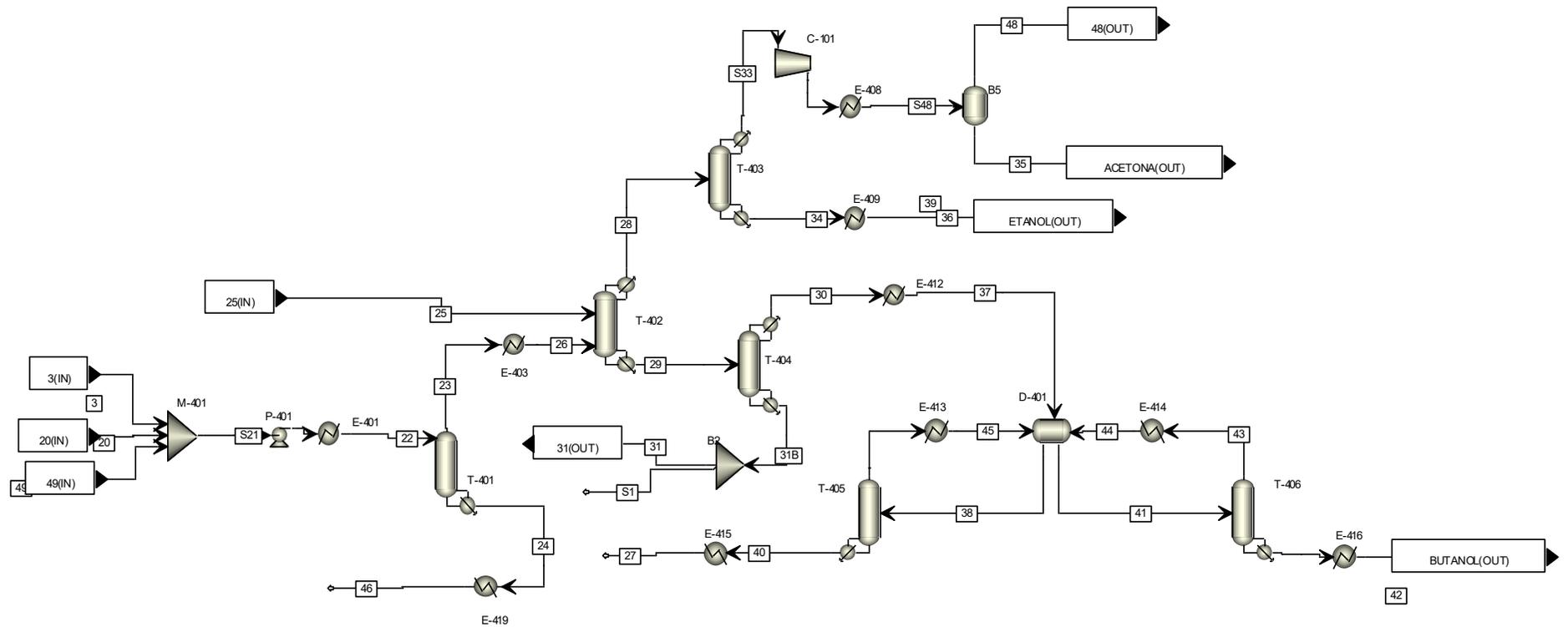


Figura 38. Fluxograma da Unidade 4 simulada no Aspen Plus®.

Torre de separação da vinhaça (T-401)

- Essa torre irá separar grande parte da água misturada com os produtos vindos das Unidades 1 e 4.
- A corrente de alimentação foi aquecida a 70°C com o propósito de economizar energia no refeedor.
- A torre possui 45 estágios (44 pratos), não tem condensador e é alimentada no estágio 1. O refeedor é o do tipo *Kettle*.
- Para encontrar a vazão de destilado, utilizamos a ferramenta *Design Specifications*. Foi definida que a corrente de fundo teria 1 kg/h de etanol. Esse valor é inferior ao que normalmente é encontrado na vinhaça (0.02 % massa).
- A torre opera a 1.5 atm e utiliza vapor de baixa pressão no refeedor (5 bar, 160°C).

Torre da destilação extrativa (T-402)

- A torre de destilação extrativa possui 30 estágios (28 pratos). A corrente contendo etileno glicol vinda dos ejetores alimenta a coluna no estágio 8, enquanto a corrente vinda da torre T-101 alimenta o estágio 15. Essa configuração resultou em uma melhor separação de acetona e etanol.
- A corrente de topo vinda da torre T-101 é parcialmente condensada a uma temperatura de 90°C para melhorar a separação na coluna.
- A coluna apresenta condensador parcial e refeedor do tipo *Kettle*. Definimos uma razão de refluxo de 3 (em massa) e a vazão de destilado foi calculada pelo *Design Specifications*. Especificamos que a corrente de topo teria 249.5 kg/h de etanol e variamos a vazão de destilado para alcançar esse valor.
- A torre opera a 1 atm e utiliza vapor de baixa pressão no refeedor (5 bar, 160°C).

Torre de separação da acetona e do etanol (T-403)

- A torre possui 30 estágios (28 pratos) e é alimentada no estágio 20.
- A corrente de alimentação vinda da coluna T-402 foi mantida na fase vapor, o que economiza energia no refeedor que opera com vapor de baixa pressão (5 bar, 160°C).
- A coluna apresenta condensador parcial e refeedor do tipo *Kettle*. Definimos uma razão de refluxo de 8 (em massa) e a vazão de destilado foi calculada pelo *Design*

Specifications. Especificamos que a corrente de fundo teria 249 kg/h de etanol e variamos a vazão de destilado para alcançar esse valor.

- A torre opera melhor a uma pressão de 0.7 atm (DANTAS, 2018). Por isso, adicionamos um compressor para gerar o vácuo na coluna.
- A corrente de topo foi condensada a 25°C para remover o CO₂ presente na mistura e para separar a acetona. O gás foi direcionado para a Unidade 2 para ser lavado.
- A corrente de fundo foi resfriada a 40°C.

Torre de recuperação de etileno glicol (T-404)

- A torre de recuperação de etileno glicol apresenta 30 estágios (28 pratos) e é alimentada no estágio 15.
- A coluna apresenta condensador parcial e refeedor do tipo *Kettle*. Definimos uma razão refluxo de 0.1 (em massa) e a vazão de destilado foi calculada pelo *Design Specifications*. Especificamos que a corrente de topo teria 5 kg/h de etileno glicol e variamos a vazão de destilado para alcançar esse valor.
- A torre opera a 1 atm e utiliza vapor de alta pressão no refeedor (41 bar, 254°C).
- A corrente de fundo irá alimentar o sistema de ejetores na Unidade 3. É importante destacar que essa corrente não pode ter água para o reciclo funcionar.
- A corrente de topo da coluna é condensada completamente e direcionada ao decantador, cuja pressão de saída é 1 atm.

Torres de separação de água (T-405) e de butanol (T-406)

- Ambas as torres possuem 10 estágios (9 pratos), não apresentam condensador e são alimentadas no estágio 1. Os refeedores são do tipo *Kettle*.
- A corrente rica em água que vem do decantador alimenta a coluna T-405, enquanto a corrente rica em butanol, a coluna T-406.
- A vazão de destilado das colunas T-405 e T-406 foram definidas como 980 kg/h e 1147 kg/h, respectivamente.
- As correntes de topo de ambas as colunas são condensadas à 75°C e voltam ao decantador.
- As correntes de fundo de ambas as colunas foram resfriadas a 40°C.

Os diâmetros de todas as colunas da Unidade 4, incluindo a coluna de absorção na Unidade 2, foram estimados pelo método *Tray Sizing* do Aspen Plus®. Definimos que os pratos eram do tipo *Sieve*. A altura (H) de cada coluna foi estimada pela equação 57. Consideramos um espaçamento entre pratos de 0.61 metros e um excesso na altura de 20%.

$$H = N \cdot 0.61 \cdot 1,2 \quad (57)$$

Em que:

H: Altura da torre (m).

N: Número de pratos da torre (condensador e refeedor não são incluídos).

A área de troca térmica dos trocadores da Unidade 4, assim como das outras Unidades, foi calculada pelo método da média logarítmica das diferenças de temperatura:

$$A = \frac{Q}{U \cdot \Delta T_{ML}} \quad (58)$$

$$\Delta T_{ML} = \frac{(T_{H,in} - T_{C,out}) - (T_{H,out} - T_{C,in})}{\ln \left(\frac{T_{H,in} - T_{C,out}}{T_{H,out} - T_{C,in}} \right)} \quad (59)$$

Em que:

A: Área de troca térmica (m²).

U: Coeficiente de troca térmica (W m⁻² °C⁻¹).

ΔT_{ML} : média logarítmica das diferenças de temperatura (°C).

$T_{H,in}$: Temperatura de entrada da corrente quente (°C).

$T_{H,out}$: Temperatura de saída da corrente quente (°C).

$T_{C,in}$: Temperatura de entrada da corrente fria (°C).

$T_{C,out}$: Temperatura de saída da corrente fria (°C).

3.3 Simulação do processo com compressores

Também simulamos o caso em que o vácuo é gerado por meio de compressores para compará-lo com o sistema de ejetores desenvolvido nesse trabalho. A configuração deste novo processo é bastante similar aos trabalhos de Mariano et al. (2011a), porém foram utilizados três compressores em série com os respectivos fatores de compressão: 2.97; 2.84 e 2.78 (Figura 39).

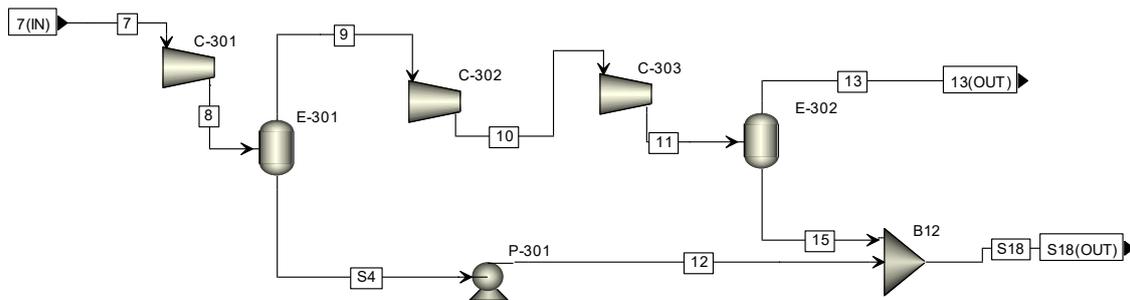


Figura 39. Simulação do processo com compressores no Aspen Plus®.

Além disso, optamos por remover as integrações já definidas nos estudos prévios. Isso foi feito para equiparar os processos e analisar o custo mínimo de utilidades conforme a análise *pinch*.

A fermentação a vácuo com compressores não necessita de etileno glicol, logo foi empregada apenas a destilação convencional (Figura 40) na Unidade 4 conforme descrita por Mariano et al. (2011b). As Unidades 1 e 2 mantiveram-se exatamente iguais em ambos os processos.

3.4 Integração Energética

Após simular a planta de fermentação ABE a vácuo utilizando ejetores e compressores, realizamos a integração energética de ambos os processos. A integração foi feita por meio do *Aspen Energy Analyzer* que utiliza o método de análise *pinch* (LINNHOFF et al., 1982). Essa ferramenta mostra a energia requerida de utilidades quentes e frias e os valores mínimos alcançados pela integração. Para realizar a análise, definimos inicialmente as utilidades no processo (Tabela 5).

Tabela 5. Utilidades definidas no processo.

Utilidade	T _{in} (°C)	T _{out} (°C)*
Utilidade Quente		
LP - Vapor de baixa pressão (5 bar)	160	159
MP - Vapor de média pressão (10 bar)	184	183
HP - Vapor de alta pressão (41 bar)	254	253
Utilidade Fria		
Água	30	40
Água fria	10	15

*Os vapores são condensados na saída.

Definimos também uma variação mínima de temperatura de 10°C e que a integração incluiria todas as quatro Unidades (Figura 41).

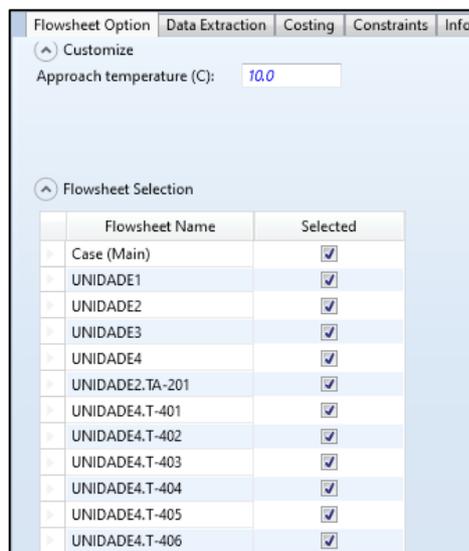


Figura 41. Definição da variação mínima de temperatura e das áreas de integração no Aspen Plus®.

3.5 Análise Econômica

Após a integração energética, realizamos a análise econômica das duas plantas desenvolvidas previamente. Ambos os processos propostos possuem a mesma alimentação e a mesma produção. Logo, para saber qual processo é o mais econômico, calculamos os custos de investimento (CAPEX) e os custos operacionais (OPEX).

3.5.1 Custos de investimento (CAPEX)

O CAPEX foi calculado por meio da técnica do custo do módulo do equipamento descrita por Turton et al. (2018), a saber:

$$C_{BM} = C_p^\circ F_{BM} \quad (60)$$

Em que:

C_{BM} : Custo estimado do equipamento instalado (US\$).

C_p° : Preço de compra do equipamento (US\$).

F_{BM} : Fator de correção. Esse fator considera o tipo de material, a pressão de operação e os custos diretos e indiretos da instalação do equipamento.

O custo calculado pela equação 60 foi também corrigido conforme o *Chemical Engineering Plant Cost Index* (CEPCI) que considera o efeito do tempo sobre os preços (Equação 61). Definimos como CEPCI atual o valor referente ao ano de 2019 (CEPCI 2019 = 607.5).

$$C_{p,atual}^\circ = C_{p,original}^\circ \left(\frac{CEPCI_{atual}}{CEPCI_{original}} \right) \quad (61)$$

Em que:

$C_{p,atual}^\circ$: Custo atual.

$C_{p,original}^\circ$: Custo original.

$CEPCI_{atual}$: Índice de custo atual.

$CEPCI_{original}$: Índice de custo original.

O preço de compra dos equipamentos (C_p°) foi calculado por meio de diferentes metodologias, conforme descrito a seguir:

Custo de compra de equipamentos (C_p°)

Custo fermentador

O custo do fermentador foi calculado pelo ajuste de escala (ou Regra dos seis décimos). Utilizamos como referência o relatório técnico do *National Renewable Energy Laboratory* (DAVIS et al., 2018).

$$C_p^\circ = C_{p,Ref}^\circ \left(\frac{V}{V_{Ref}} \right)^R \quad (62)$$

Em que:

$C_{p,Ref}^\circ = US\$ 844000$: Custo conforme a referência.

V : Volume do fermentador no processo (m^3).

$V_{Ref} = 3785 m^3$: Volume do fermentador conforme a referência.

$R = 1$: Exponente de escala conforme a referência.

O ano de referência dos dados é de 2009, em que $CEPCI 2009 = 521$.

Custo ejetor

O custo do ejetor foi estimado conforme um banco de dados de custo de equipamentos (MATCHE, 2014). O preço deste equipamento irá depender do diâmetro da seção de área constante do ejetor (D):

- Ejetor pequeno ($2.5 < D < 10.2$ cm):

$$C_p^\circ = 330.71D - 150 \quad (63)$$

- Ejetor grande ($10.2 < D < 27.9$ cm):

$$C_p^\circ = 297.62D + 317.86 \quad (64)$$

O ano de referência dos dados é de 2014, em que $CEPCI\ 2014 = 576$.

Custo de outros equipamentos

O custo de outros equipamentos (tanque, decantador, compressor, bomba, trocador de calor, torre) foram calculados conforme a correlação CAPCOST (TURTON et al., 2018).

$$\log_{10} C_p^\circ = K_1 + K_2 \log_{10}(A) + K_3 [\log_{10}(A)]^2 \quad (65)$$

Em que:

K_1, K_2, K_3 : Constantes empíricas.

A : Capacidade do equipamento.

Os valores das constantes, bem como a unidade referente a capacidade do equipamento, são apresentados na Tabela 6.

Tabela 6. Constantes e unidades conforme CAPCOST.

Equipamentos	Tipo	A	K_1	K_2	K_3
Tanque/Decantador	Vaso horizontal	Volume (m ³)	3.5565	0.3776	0.0905
Compressor	Centrífuga	Potência (kW)	2.2891	1.3604	-0.1027
Bomba	Centrífuga	Potência (kW)	3.3892	0.0536	0.1538
Trocador de Calor	Tubo U	Área (m ²)	4.3247	-0.303	0.1634
	Refervedor Kettle	Área (m ²)	4.4646	-0.5277	0.3955
Torre	Vaso vertical	Volume (m ³)	3.4974	0.4485	0.1074
	Pratos	Número pratos	2.9949	0.4465	0.3961

O ano de referência dos dados é de 2001, em que $CEPCI\ 2001 = 394$.

Fator de Correção (F_{BM})

O valor do fator de correção da equação 60 é apresentado na Tabela 7. Para alguns equipamentos, esse fator foi calculado conforme as equações abaixo.

$$F_{BM} = B_1 + B_2 F_P F_M \tag{66}$$

Em que:

B_1, B_2 : Constantes empíricas.

F_P : Fator de correção da pressão.

F_M : Fator de correção do material.

$$\log_{10} F_P = C_1 + C_2 \log_{10}(P) + C_3 [\log_{10}(P)]^2 \tag{67}$$

Em que:

C_1, C_2, C_3 : Constantes empíricas.

P : Pressão (bar).

Consideramos que todos os equipamentos seriam de aço carbono, a não ser o reator que é feito de aço INOX (segundo a referência utilizada). Os valores das constantes empíricas das equações 66 e 67 são apresentados na Tabela 7.

Tabela 7. Dados para o cálculo do fator de correção conforme CAPCOST.

Equipamentos	Tipo	F_{BM}	B_1	B_2	C_1	C_2	C_3	F_P	F_M
Tanque/Decantador	Vaso horizontal	Eq. x	1.49	1.52	-	-	-	1.25	1
Compressor	Centrífuga	2.7	-	-	-	-	-	-	-
Bomba	Centrífuga	Eq. x	1.89	1.35	-0.3935	0.3957	-0.00226	Eq. y	1.6
Trocador de Calor	Tubo U	Eq. x	1.63	1.66	0.03881	-0.11272	0.08183	Eq. y	1
	Refervedor Kettle	Eq. x	1.63	1.66	0.03881	-0.11272	0.08183	Eq. y	1
Torre	Vaso vertical	Eq. x	2.25	1.82	-	-	-	1.25	1
	Pratos	1	-	-	-	-	-	-	-
Reator	Fermentador	1.5	-	-	-	-	-	-	-
Ejetor	Vapor	4.3	-	-	-	-	-	-	-

Assim, o CAPEX total pode ser calculado pelo somatório do custo de todos os equipamentos instalados:

$$CAPEX = \sum C_{BM} \quad (68)$$

CAPEX anualizado

Calculamos também o CAPEX anualizado para compará-lo diretamente ao OPEX. Consideramos uma taxa (i) de 10% ao ano e que o tempo de operação (n) seria de 20 anos.

$$CAPEX_{anualizado} = CAPEX \left[\frac{i(1+i)^n}{(1+i)^n - 1} \right] \quad (69)$$

Todos os cálculos foram programados em linguagem Fortran 77 diretamente no Aspen Plus® (Figuras 42 e 43).

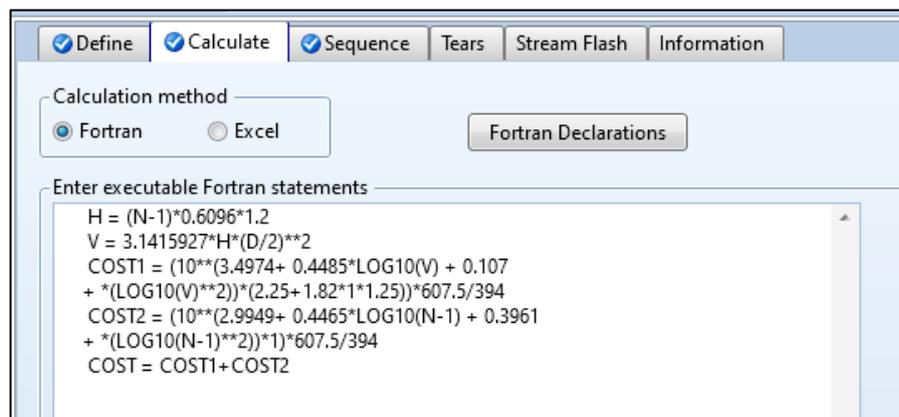


Figura 42. Exemplo do cálculo do custo de uma torre de destilação no Aspen Plus®.

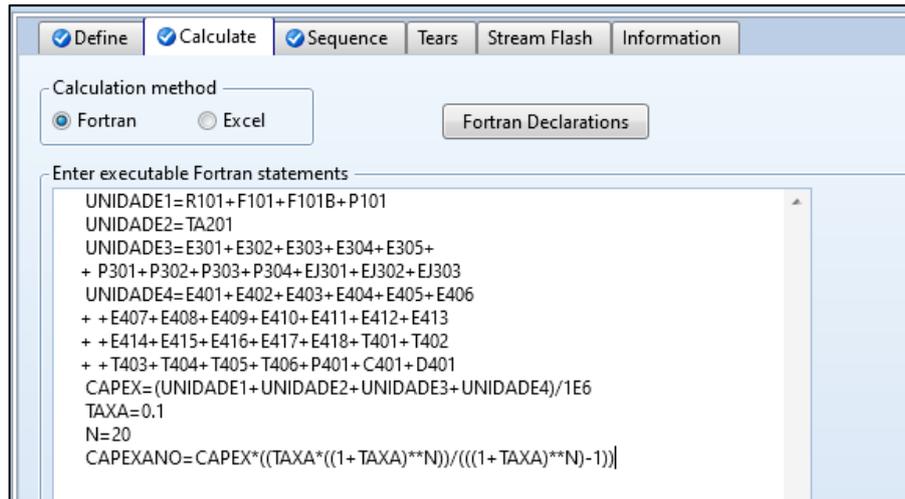


Figura 43. Exemplo do cálculo do CAPEX total e anualizado no Aspen Plus®.

3.5.2 Custos operacionais (OPEX)

As plantas com ejetor e compressor desenvolvidas neste trabalho apresentam custos operacionais em comum. Logo, para calcular o OPEX consideramos apenas os custos diferentes, a saber:

- Custo de utilidades (C_{UT});
- Custo de manutenção e reparos (C_M);
- Custo de disposição de efluentes (C_{DE}).

Cada um desses custos é descrito a seguir.

Custo de utilidades (C_{UT})

O custo das utilidades dos processos é apresentado na Tabela 8.

Tabela 8. Custo de utilidades.

Utilidade	Custo	Referência
Utilidade Quente		
LP -Vapor de baixa pressão (5 bar) com crédito de eletricidade	2.03 US\$/GJ	TURTON et al., 2018
MP -Vapor de baixa pressão (10 bar) com crédito de eletricidade	2.78 US\$/GJ	TURTON et al., 2018
HP - Vapor de alta pressão (41 bar)	5.66 US\$/GJ	TURTON et al., 2018
Utilidade Fria		
Água (30 °C)	0.378 US\$/GJ	TURTON et al., 2018
Água fria (10 °C)	4.103 US\$/GJ	TURTON et al., 2018
Eletricidade	0.0674 US\$/kWh	TURTON et al., 2018
Etileno Glicol	0.836 US\$/kg	Dantas, 2018

Assim, o custo total com utilidade é calculado por:

$$C_{UT} (MMUS\$/ano) = [C_{UQ} + C_{UF} + C_E + C_{EG}] \cdot 24 \cdot n \quad (70)$$

Em que:

C_{UQ} : Custo total com utilidades quentes (MMUS\$/h).

C_{UF} : Custo total com utilidades frias (MMUS\$/h).

C_E : Custo total com eletricidade (MMUS\$/h).

C_{EG} : Custo total com etileno glicol (MMUS\$/h). Esse custo foi determinado com base na corrente de *make-up*.

n : Dias de operação da planta em um ano (consideramos 350 dias/ano).

Custo de manutenção e reparos (C_M)

O custo de manutenção e reparos dos equipamentos depende do CAPEX e é dado por:

$$C_M (MMUS\$/ano) = 0.06 \cdot \text{CAPEX} \quad (71)$$

Custo de disposição de efluente (C_{DE})

Consideramos que o efluente de ambos os processos é a vinhaça, que será utilizada totalmente na fertirrigação. A fertirrigação de cada 1 m^3 de efluente custa 0.70 US\$ (RABELO et al., 2015). Logo:

$$C_{DE} \text{ (MMUS\$/ano)} = 0.7 \cdot V \cdot 24 \cdot n / 10^6 \quad (72)$$

Em que:

V : Volume de efluente (m^3/h).

n : Dias de operação da planta em um ano (consideramos 350 dias/ano).

Deste modo, o OPEX é calculado por:

$$OPEX = C_{UT} + C_M + C_{DE} \quad (73)$$

Assim como feito para o CAPEX, os cálculos foram programados em linguagem Fortran 77 diretamente no Aspen Plus® (Figura 44).

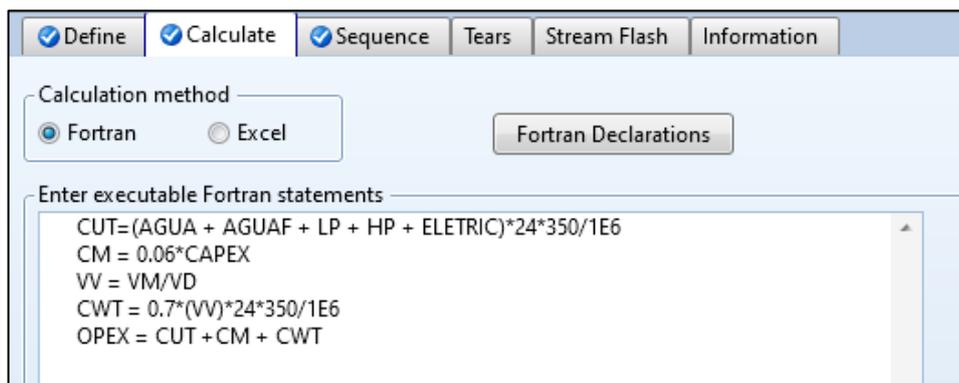


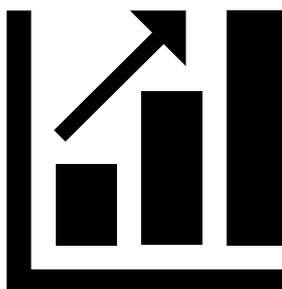
Figura 44. Exemplo do cálculo do OPEX no Aspen Plus®.

O custo total anual dos processos é a soma do OPEX e do CAPEX anualizado.

CAPÍTULO 4

Resultados e Discussão

Neste capítulo, apresentamos e discutimos os resultados obtidos neste projeto. O texto é dividido nas seguintes seções: Definição de componentes e propriedades no simulador; Simulação do processo com ejetores; Simulação do processo com compressores; Integração energética; Análise econômica e Desenvolvimento de novos processos.



4.1 Definição de componentes e propriedades no simulador

Após a inserção de todos os componentes, do modelo termodinâmico e de alguns parâmetros, o Aspen Plus® processou todos os dados sem erros. Isso indica que o simulador estava apto para a simulação do processo. Ainda, a modificação dos parâmetros binários da mistura butanol/água melhorou o ajuste da curva de equilíbrio-líquido na fase líquida a baixas concentrações de butanol (Figura 45). Esse resultado já era esperado, conforme trabalhos anteriores, e melhora a qualidade da simulação, tornando-a mais próxima à realidade (MARIANO et al., 2011b).

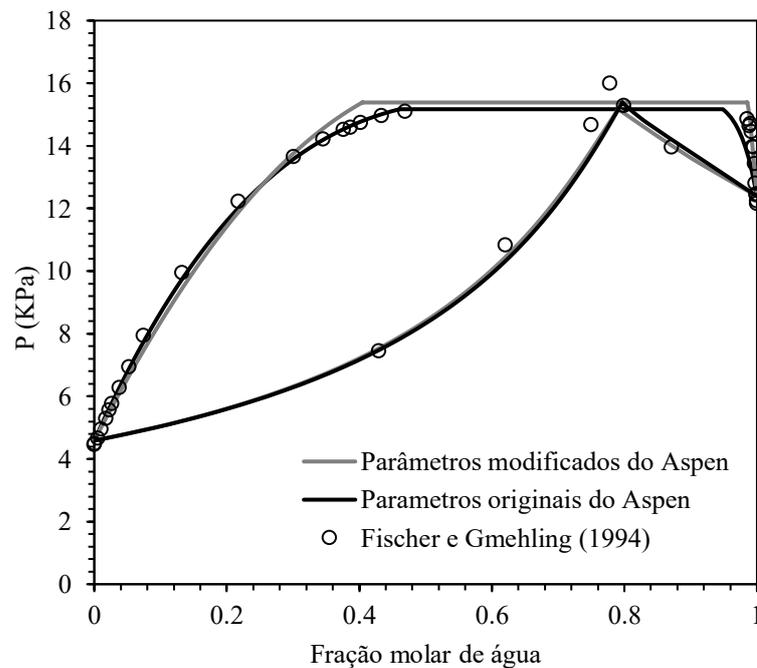


Figura 45. Curva de equilíbrio Líquido-Vapor para a mistura butanol e água à 50.07 °C.

É interessante destacar também que o butanol e a água, em especial, formam um azeótropo heterogêneo formado por duas fases líquidas e uma vapor, como é possível ver pelo patamar no diagrama de fases (Figura 45). Outros azeótropos também foram identificados no sistema (Tabela 9) por meio da ferramenta *Azeotrope Search* (Busca de azeótropos). A presença de azeótropos influencia diretamente o projeto da destilaria, por isso é muito importante compreender o comportamento dos componentes em mistura.

Tabela 9. Azeótropos no sistema à pressão de 1 atm.

Tipo de azeótropo	Temperatura (°C)	Componentes	Composição (base mássica)
Heterogêneo (líquido-líquido-vapor)	92.59	Água	0.4247
		Butanol	0.5753
Homogêneo (líquido-vapor)	78.14	Água	0.0451
		Etanol	0.9549
Homogêneo (líquido-vapor)	122.71	Butanol	0.5569
		Ácido Acético	0.4431

4.2 Simulação do processo com ejetores

Os resultados da simulação de cada Unidade são apresentados a seguir.

4.2.1 Simulação da Unidade 1 – Fermentação

A simulação da Unidade 1 convergiu sem erros. O reator produz ao todo 2.50 ton/h de ABE, sendo 0.75 ton/h de acetona, 1.50 ton/h de butanol e 0.25 ton/h de etanol, o que equivale à proporção típica de 3:6:1. Essa produção corresponde a um rendimento de 0.33 g ABE/g glicose e produtividade de 3 g butanol/(L.h), que são similares aos relatados por MARIANO et al. (2011b). Além dos produtos principais, são gerados gases de fermentação, contendo 97 % de CO₂ e 3 % H₂ em massa, a uma vazão de 4.29 ton/h que é 1.66 vezes maior que a de ABE. Estes valores também estão coerentes com a literatura (ZVERLOV et al., 2006). No processo, mais de 95 % dos gases de fermentação saem no reator. Essa corrente carrega uma pequena quantidade de ABE, o que justifica a implementação da Unidade 2 para recuperar esses produtos. O vácuo gerado no tanque *flash* F-101 (0.0639 atm) é capaz de vaporizar 22.23 ton/h da mistura, necessitando de 13.69 MW. Esses valores estão muito próximos à referência base utilizada nesta simulação. Com essas condições operacionais de *flash* e reciclo é possível reduzir a concentração do butanol no reator, diminuindo sua inibição, e aumentar o rendimento e produtividade do processo.

4.2.2 Simulação da Unidade 2 – Absorção

A simulação da Unidade 2 convergiu sem erros. A água conseguiu absorver 94 % do ABE residual (92 kg/h), evidenciando a eficácia da lavagem. Há uma perda de 6 kg/h de acetona na corrente de topo, que é desprezível comparada ao total (0.8 % m/m). Ainda, na corrente de topo, as quantidades de H₂ (3 % m/m) e de acetona (0.1 % m/m) são muito pequenas. O restante da mistura é composto por CO₂ e água, que juntos correspondem a 96.9 % m/m.

4.2.3 Simulação da Unidade 3 – Condensação

A implementação do código com a modelagem dos ejetores funcionou corretamente no simulador. Todos os cálculos foram confrontados com valores obtidos por outros *softwares*, como o Excel® e o Octave, e se mostraram condizentes entre si. Deste modo, conseguimos simular um ejetor no Aspen Plus®.

Sistema com 1 ejetor

Na simulação do sistema com 1 ejetor, avaliamos o comportamento do diâmetro da seção de área constante do ejetor (D_3) e da pressão de saída em diferentes condições de pressão e vazão de fluido primário. Quanto maior a vazão de etileno glicol, maior é o diâmetro do ejetor e, quanto maior pressão, menor o diâmetro (Figura 46). Mesmo em condições de alta pressão e baixa vazão, o diâmetro do ejetor é muito grande, maior que 0.9 m. Normalmente, esse diâmetro varia de 0.02 a 0.30 m (MATCHÉ, 2014). Logo, isso indica que seria necessário associar ejetores em paralelo neste caso.

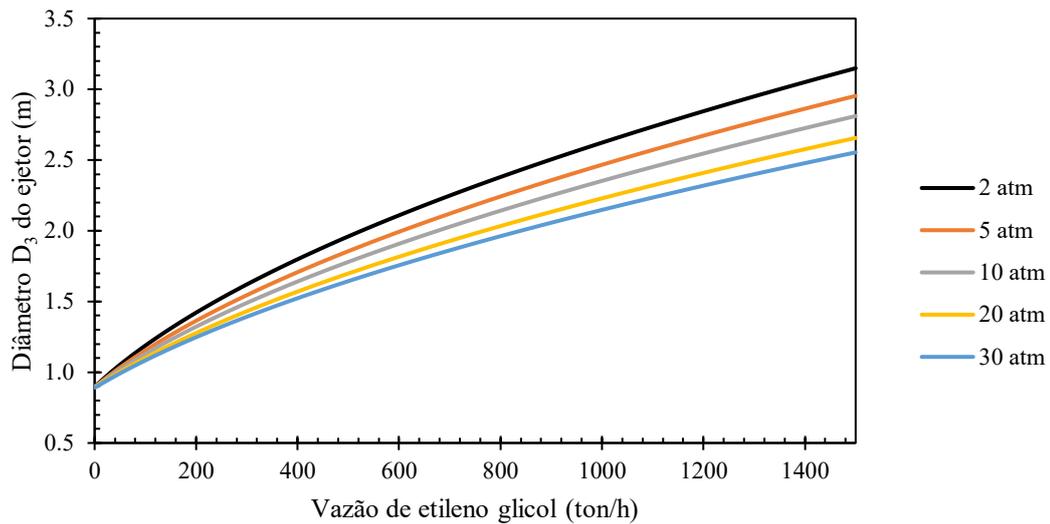


Figura 46. Diâmetro D₃ do ejetor para diferentes condições de vazão e pressão de etileno glicol.

Por outro lado, quanto maior a vazão de etileno glicol e sua pressão, maior é a pressão de saída do ejetor (Figura 49). Todavia, mesmo com uma pressão e vazão de etileno muito altas, não é possível alcançar a pressão de saída de 1 atm. Isso indica que apenas um ejetor não é suficiente para gerar o vácuo requerido. Assim, é necessário um sistema com múltiplos ejetores.

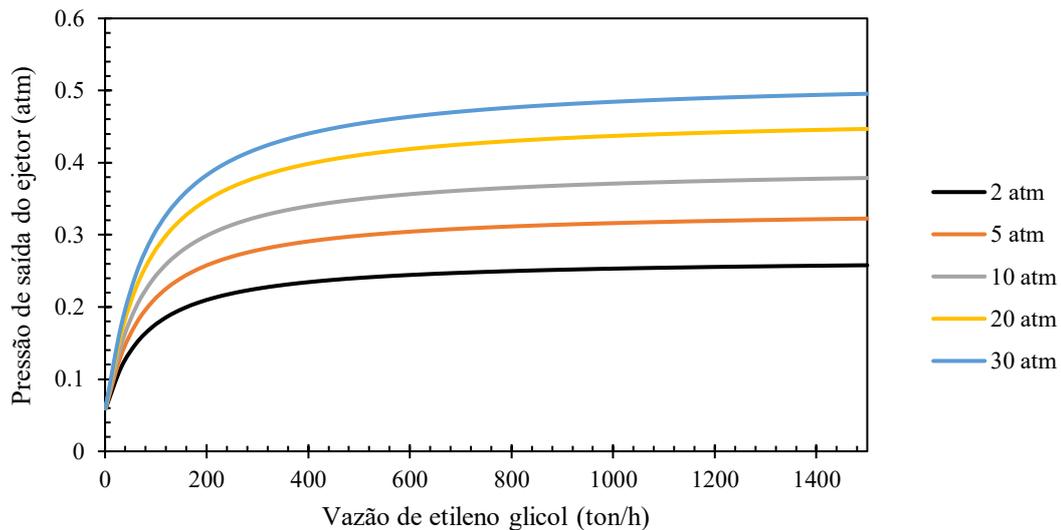


Figura 47. Pressão de saída do ejetor para diferentes condições de vazão e pressão de etileno glicol.

Também é possível observar pela Figura 47 que para uma mesma pressão de saída do ejetor, a vazão de etileno requerida é menor quando se utiliza uma pressão maior de fluido

primário. Logo, uma pressão mais alta de etileno glicol é desejada. Todavia, para escolher qual a melhor pressão, é preciso avaliar como esse fluido será vaporizado.

Neste trabalho, consideramos que o etileno glicol, a 1 atm, é vaporizado em um trocador de calor, cuja energia é fornecida por uma utilidade quente. Assim, é necessário que essa utilidade esteja a uma temperatura maior que a temperatura de ebulição do etileno glicol na pressão atmosférica (198°C). Consideramos ainda que a utilidade quente poderia ser vapor de água a baixa pressão (5 atm), média pressão (10 atm) ou alta pressão (41 atm). Com base na curva de pressão de saturação do etileno glicol (Figura 48), obtida pelo Aspen Plus®, nota-se que apenas o vapor a alta pressão poderia fornecer energia suficiente para vaporizar o etileno glicol para uma pressão acima da atmosférica. Com base nessa análise, definimos que o vapor saturado de etileno glicol que alimenta os ejetores estaria a 3.4 atm que é o limite da temperatura do vapor de alta pressão.

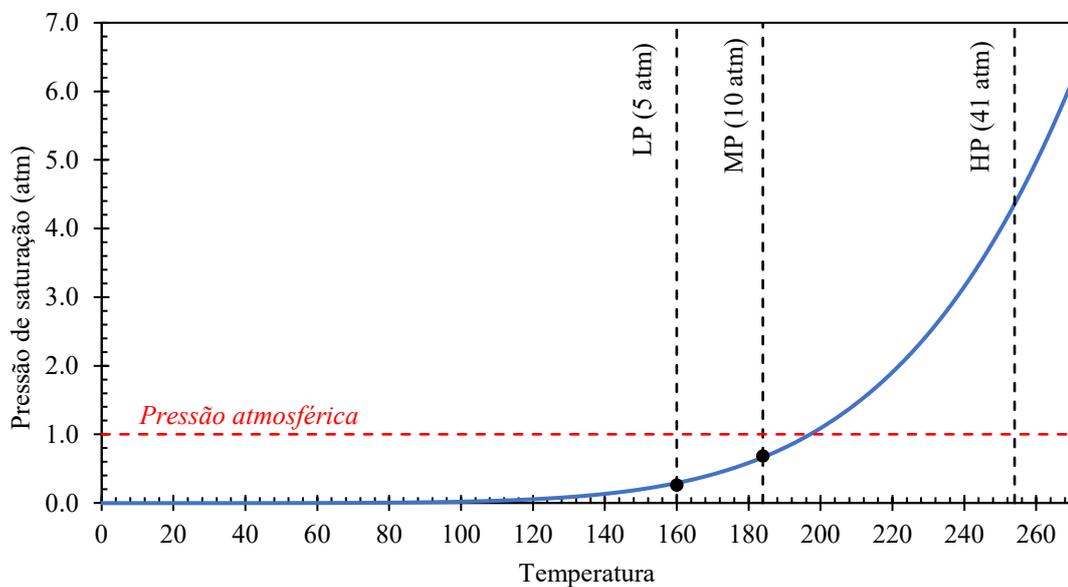


Figura 48. Curva de pressão de saturação para o etileno glicol.

Definida a pressão do fluido primário, avaliamos o sistema com múltiplos estágios de ejetores sem e com condensador.

Sistema com múltiplos estágios de ejetores sem condensador

Antes de realizar a simulação, calculamos o fator de compressão de cada ejetor (FC_{ej}) para diferentes sistemas com múltiplos estágios, conforme a Equação 56. Quando se utiliza mais de um ejetor, há uma redução acentuada em FC_{ej} (Figura 49). Como consequência, a

vazão requerida de fluido primário (ou pressão) são menores. Além disso, a partir de 5 ejetores, o valor de FC_{ej} varia pouco. Esse comportamento evidencia que provavelmente não é vantajoso implementar um sistema com muitos estágios de ejetores.

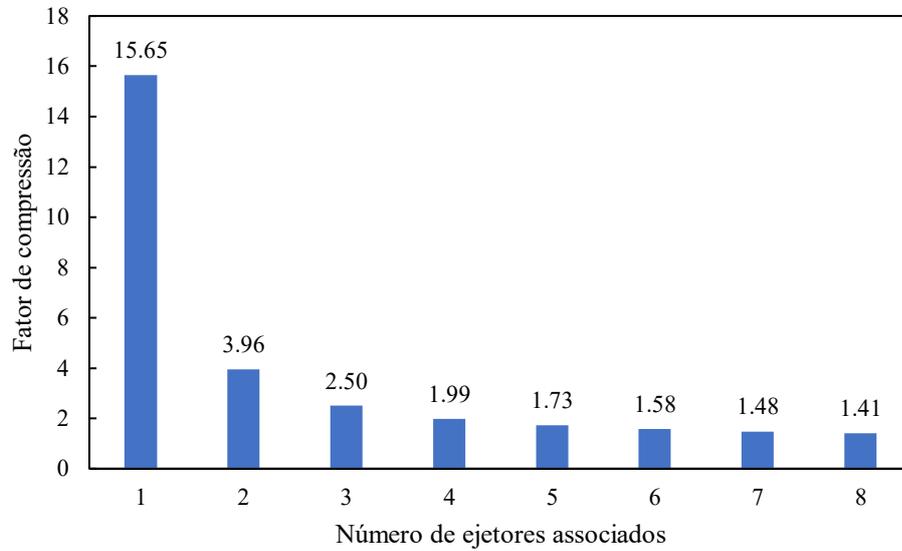


Figura 49. Variação do fator de compressão de cada ejetor FC_{ej} para diferentes números de ejetores.

Neste trabalho, testamos as configurações AB, ABC e ABCD (Figura 50). Inicialmente, os fatores de compressão de cada ejetor foram mantidos iguais entre si, como recomendado por TURTON et al. (2018).

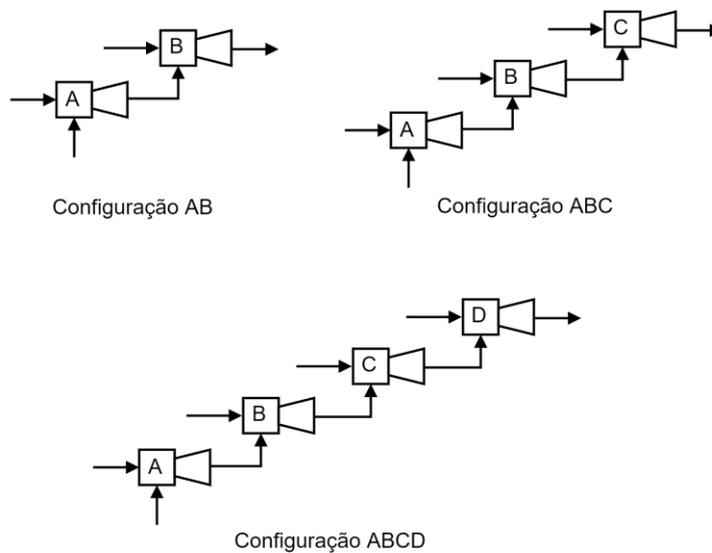


Figura 50. Sistemas com múltiplo estágios de ejetores sem condensador.

O sistema com 2 ejetores (AB) não conseguiu alcançar a pressão de saída requerida, mesmo com uma vazão muito alta de etileno glicol (maior que 10000 ton/h). A pressão de saída dessa configuração tende a 0.85 atm (Tabela 10). Os sistemas com 3 (ABC) e 4 ejetores (ABCD) foram capazes de atingir a pressão de saída desejada. Porém, uma vazão muito alta de solvente é requerida para os dois casos. A configuração ABC precisa de 1825 ton/h de etileno glicol e a ABCD, 1160 ton/h. Por mais que o sistema funcione teoricamente, essa demanda muito elevada resultaria em um encarecimento acentuado do processo, pois seria necessária uma maior energia para vaporizar o fluido. Ainda, esse volume exacerbado de etileno glicol aumentaria o custo das colunas de destilação na Unidade 4 e poderia atrapalhar o funcionamento delas.

Tabela 10. Resultado das simulações dos sistemas com múltiplo estágios de ejetores sem condensador (Pressão fluido primário = 3.4 atm).

Nº de Ejetores	Fator de compressão	Ejetor	Vazão de etileno glicol (ton/h)	Pc (atm)	D _t (m)	D ₃ (m)
2	3.96	1º	282	0.25	0.35	1.55
		2º	10000	0.85	2.10	4.43
		Total	10282			
3	2.5	1º	56	0.16	0.16	1.06
		2º	196	0.40	0.29	1.20
		3º	1573	1.00	0.83	1.77
		Total	1825			
4	2	1º	33	0.13	0.12	0.99
		2º	73	0.26	0.18	1.05
		3º	199	0.51	0.30	1.12
		4º	856	1.02	0.61	1.41
		Total	1160			

Observa-se que quanto mais estágios de ejetores são adicionados ao sistema, menor é a vazão global requerida de etileno glicol para se alcançar o vácuo (Tabela 10). Além disso, para uma dada configuração, a vazão de fluido primário de cada ejetor aumenta muito ao longo dos estágios (Figura 51). Isso acontece, pois a vazão de fluido secundário a cada estágio é a soma das vazões dos fluidos primário e secundário do estágio anterior. Assim, o aumento de fluido secundário resulta no aumento de fluido primário. Em relação aos diâmetros dos ejetores (Tabela 10), também há uma redução com o acréscimo de mais estágios. Todavia, os diâmetros continuam muito grandes do que os convencionais (0.02 a 0.30 m).

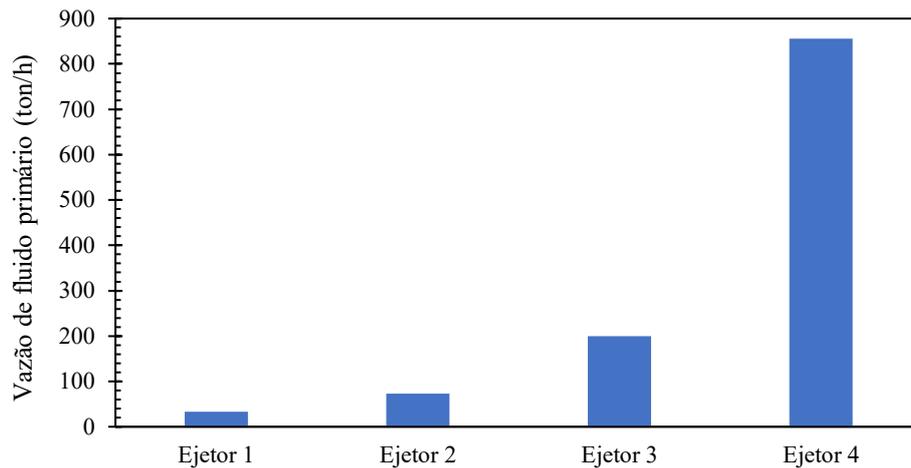


Figura 51. Vazão de etileno glicol ao longo dos estágios para um sistema com 4 ejetores.

Decidimos testar também outros fatores de compressão para os sistemas para avaliar se existiria um caso que consumisse menos etileno glicol e que alcançasse a pressão final de 1 atm. Para tanto, foi feita uma análise de sensibilidade variando este fator. Todavia, observamos que o caso com fatores de compressão iguais resultou na menor demanda de etileno glicol, como já esperado.

Sistema com múltiplo estágios de ejetores com condensador

Para o sistema com múltiplos ejetores e condensadores, foram simuladas quatro configurações: A-X-B; A-X-BC; AB-X-C e A-X-B-X-C (Figura 52). Inicialmente, os fatores de compressão de cada ejetor foram mantidos iguais entre si (FC = 3.96 para dois ejetores e FC = 2.5 para três ejetores, conforme Figura 49).

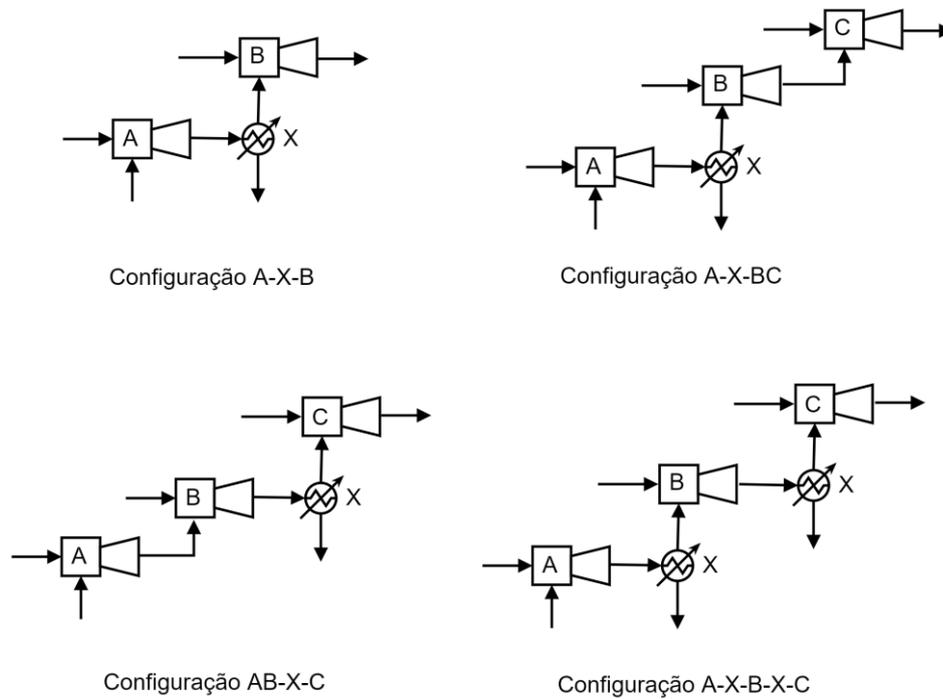


Figura 52. Sistemas com múltiplo estágios de ejetores com condensador.

A configuração A-X-C não conseguiu alcançar a pressão de saída de 1 atm, mesmo com o condensador a baixas temperaturas e vazões elevadas de fluido primário. As configurações A-X-BC e AB-X-C, por sua vez, chegaram à pressão desejada com diferentes condições do condensador (Figura 53). A quantidade de etileno glicol requerida para esses casos foi menor que a da configuração ABC para todas as condições testadas. Isso acontece, pois ao condensar parcialmente o vapor, a vazão de fluido secundário em cada ejetor será menor e, conseqüentemente, o ejetor precisará de menos fluido primário.

Em relação a configuração ABCD, os sistemas A-X-BC e AB-X-C consomem menos fluido primário para frações de vapor inferiores a 0.68 e 0.60 (base molar), respectivamente. Na configuração A-X-BC, o consumo de etileno glicol e a energia absoluta do condensador são sempre menores comparados à configuração AB-X-C (Figura 53). Outro aspecto interessante é que na configuração AB-X-C a corrente que alimenta o condensador apresenta uma temperatura maior que no caso A-X-BC, o que facilita sua integração energética.

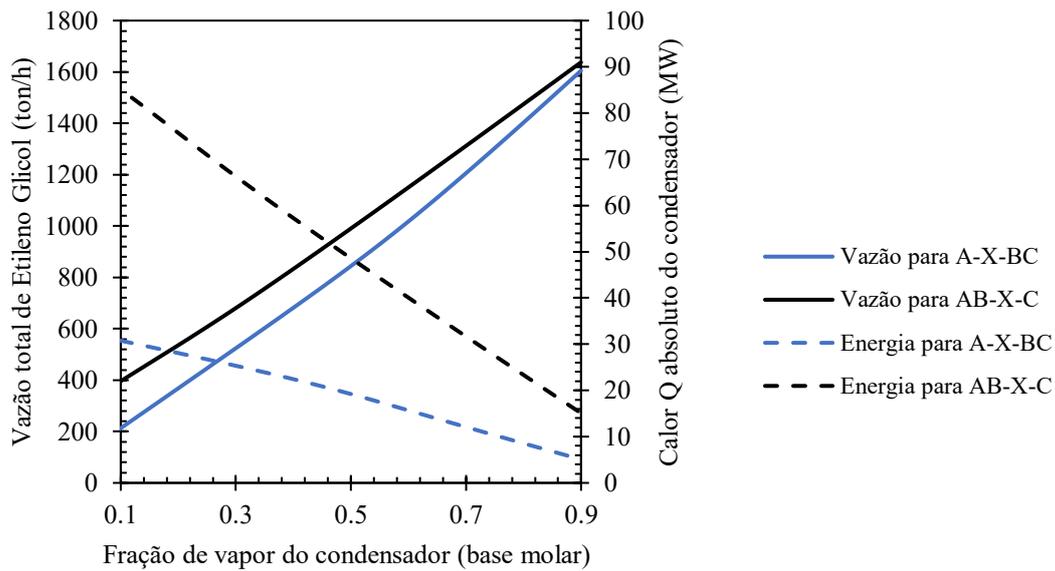


Figura 53. Vazão total de etileno glicol e energia do condensador para os casos A-X-BC e AB-X-C.

Na configuração A-X-B-X-C, a redução do consumo de etileno glicol foi ainda maior (Figura 54). Para condensadores com fração de vapor de 10%, por exemplo, o consumo de etileno glicol foi de 92 ton/h, que é consideravelmente inferior que os casos A-X-BC (200 ton/h) e AB-X-C (400 ton/h).

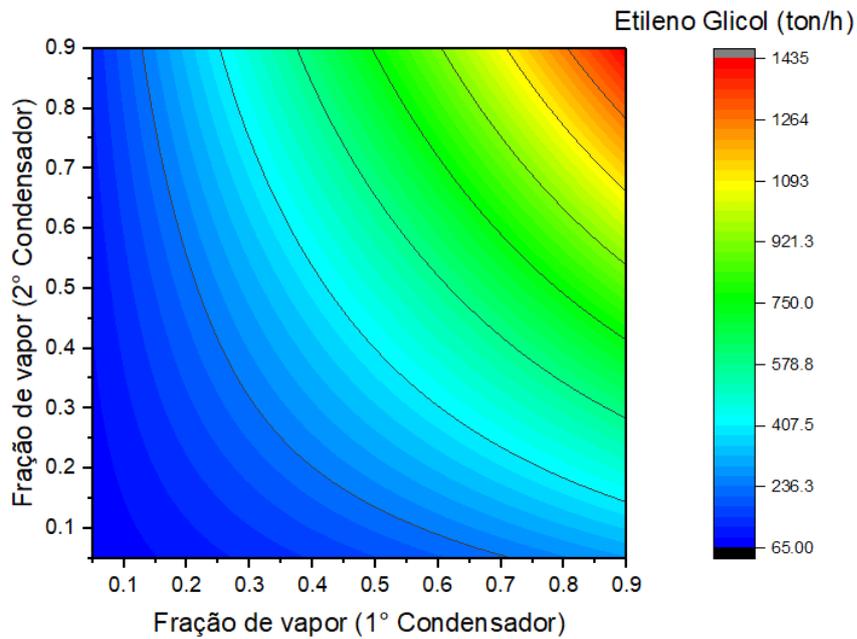


Figura 54. Vazão de etileno glicol (MP) para diferentes frações de vapor do primeiro condensador (FV1) e do segundo condensador (FV2).

Após analisar todas as configurações propostas, decidimos escolher inicialmente a configuração A-X-B-X-C para a Unidade 3, pois esta resultou em uma demanda menor de etileno glicol. De fato, a utilização de condensadores é comum em processos industriais que utilizam o etileno glicol como fluido primário (CHEM, 2017). Definimos também que os condensadores iriam operar a 40°C, pois assim seria possível resfriá-los com água a 30°C. Além disso, testamos outros fatores de compressão para cada ejetor na configuração escolhida. Todavia, diferente dos casos sem condensador, encontramos valores de FC diferentes que satisfizeram a condição de pressão de saída igual a 1 atm. Assim, escolhemos fatores de compressão que resultaram em uma baixa vazão requerida de etileno glicol. É importante destacar que apesar da economia com fluido primário, a utilização de um sistema de condensação também possui um custo associado com equipamento e utilidade. Todos esses aspectos foram considerados na análise econômica.

Durante o desenvolvimento do projeto, observamos uma necessidade de ter um condensador após o tanque *flash* (Unidade 1) e antes dos ejetores para condensar parcialmente a água que vem da fermentação. Sem esse trocador, a coluna de recuperação de etileno na Unidade 4 gastaria muita energia por causa do grande volume de água que chega até ela, o que encareceria bastante o processo. Assim, adicionamos um condensador com fração de vapor de 0.10 (33°C) antes do primeiro ejetor. Neste equipamento, o condensado é direcionado para a coluna de desidratação, enquanto o vapor é encaminhado para os ejetores. Além de reduzir a quantidade de água que vai para coluna de recuperação de etileno glicol, esse condensador permite um consumo ainda menor do fluido primário. Uma desvantagem é que esse equipamento precisa ser resfriado com água fria (10° C) e sua energia não pode ser reaproveitada no processo.

Assim, após todas as considerações feitas, a configuração final da Unidade 3 é apresentada na Figura 55. Os valores de fator de compressão, diâmetros e a vazão de fluido primário para cada ejetor são mostradas na Tabela 11.

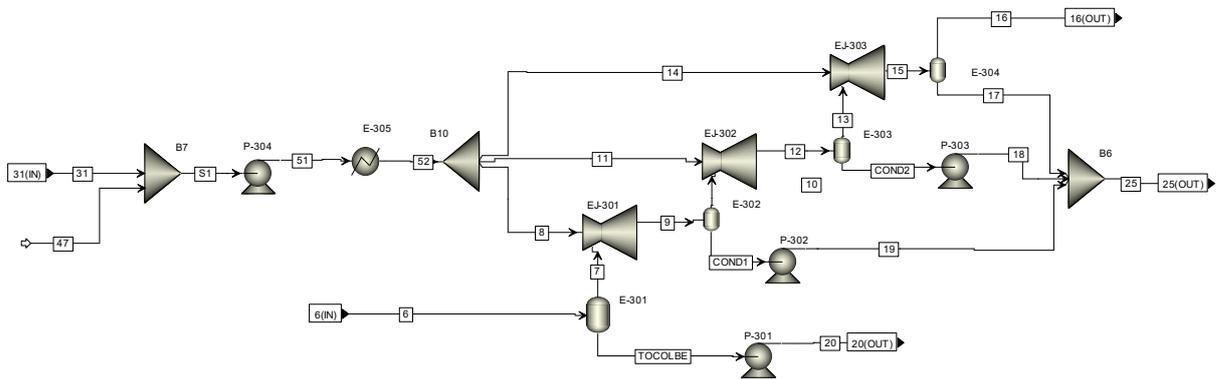


Figura 55. Fluxograma da Unidade 3 simulada no Aspen Plus®.

Tabela 11. Fator de compressão, razão das áreas e vazão de fluido primário em cada ejetor.

Ejetor	EJ-301	EJ-302	EJ-303
Fator de compressão (FC)	2.0	3.3	2.5
Diâmetro garganta (cm)	4	4	3
Diâmetro da seção reta (cm)	34	14	6
Vazão de fluido primário (ton/h)	3.6	3.8	2.5

4.2.4 Simulação da Unidade 4 – Destilação

A simulação da Unidade 4 convergiu sem erros. A quantidade de etileno glicol vinda dos ejetores (10 ton/h) foi suficiente para separar o azeótropo etanol-água na coluna T-402. Todos os produtos foram separados com uma pureza alta (Tabela 12).

Tabela 12. Vazão e pureza dos produtos obtidos.

Produto	Vazão (kg/h)	Pureza (%m/m)
Acetona	752	0.99
Butanol	1512	0.99
Etanol	270	0.92

Ao todo são produzidas 28.4 L vinhaça/L butanol (ou 53 m³/h) no processo desenvolvido. Esse valor está coerente com os trabalhos de Mariano et al. (2011b). No processo sem vácuo, o volume de vinhaça é aproximadamente 70 L vinhaça/L butanol. Isso mostra que de fato a tecnologia do vácuo reduz a produção de efluente, o que impacta positivamente nos custos operacionais.

Após todas as avanços descritos neste trabalho, foi possível desenvolver um sistema de vácuo e condensação, baseado em ejetores a vapor de etileno glicol, para recuperar ABE de caldos fermentativos (Figura 56). Os dados do processo são apresentados nas Tabelas 13 e 14.

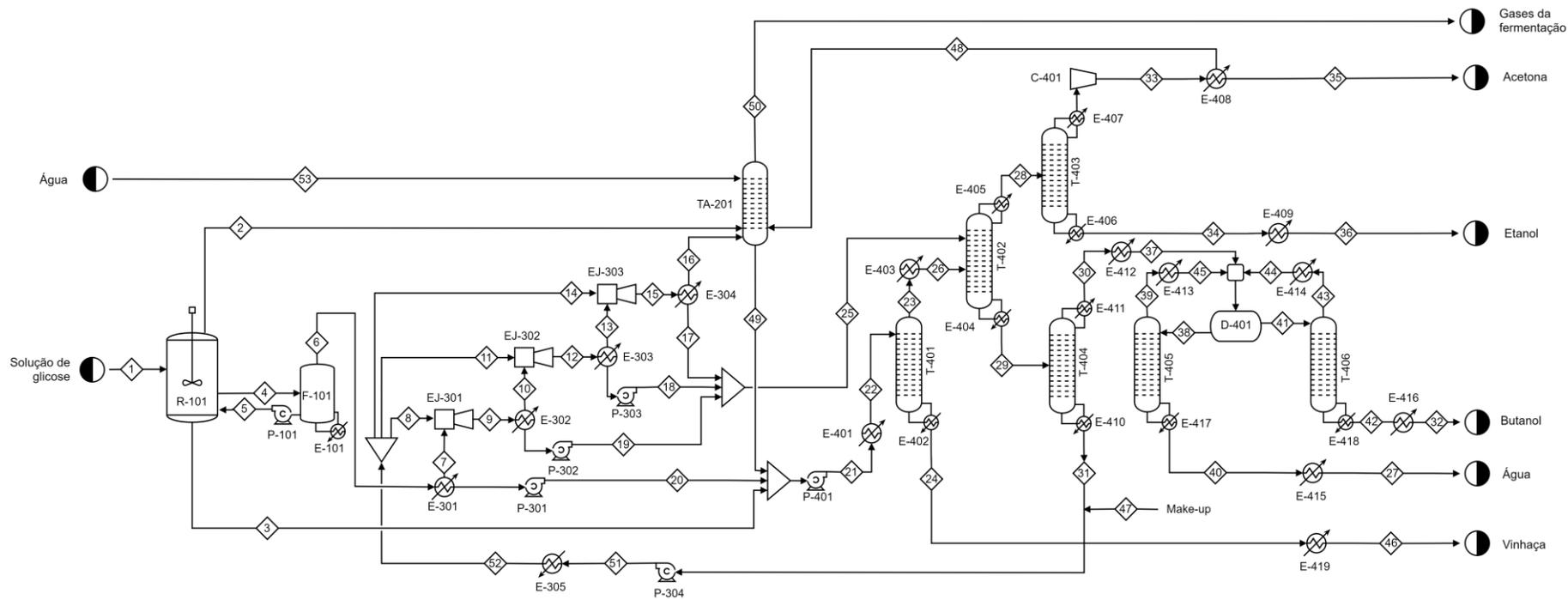


Figura 56. Fluxograma do processo proposto neste projeto.

Tabela 13. Correntes do processo para o caso dos ejetores.

Número da corrente	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Temperatura (°C)	37.0	37.0	37.0	37.0	37.0	37.0	33.0	243.2	138.7	40.0	243.2	219.1	40.0	243.2	230.5
Pressão (atm)	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.064	0.064	3.400	0.128	0.128	3.400	0.429	0.429	3.400	1.080
Fração de Vapor	0	1	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Vazão Total (ton/h)	53.5	4.3	26.8	293.7	271.4	22.2	3.2	3.6	6.9	0.6	3.8	4.4	0.3	2.5	2.8
Vazão Componente (kg/h)															
Glicose	7500	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Água	46000	187	26144	286400	266626	19774	1597	0	1597	86	0	86	1	0	1
Dióxido de carbono	0	3951	17	186	0	186	186	0	186	185	0	185	183	0	183
Gás hidrogênio	0	131	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Acetona	0	29	74	807	159	648	529	0	529	281	0	281	85	0	85
Butanol	0	30	185	2024	739	1285	809	0	809	32	0	32	0	0	0
Etanol	0	3	41	447	240	207	99	0	99	18	0	18	1	0	1
Ácido Butírico	0	1	158	1732	1658	73	3	7	10	0	7	7	0	5	5
Ácido Acético	0	1	188	2063	2001	62	2	2	4	0	2	2	0	2	2
Amônia	20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bactérias	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno glicol	0	0	0	0	0	0	0	3638	3638	1	3822	3823	0	2540	2540

Número da corrente	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
Temperatura (°C)	40.0	40.0	40.1	40.1	33.0	35.4	70.0	105.4	111.8	42.1	90.0	40.0	61.9	113.3	97.5
Pressão (atm)	1.080	1.080	1.000	1.000	1.000	1.500	1.500	1.500	1.500	1.000	1.500	1.000	1.000	1.000	1.000
Fração de Vapor	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	1
Vazão Total (ton/h)	0.2	2.6	4.2	6.3	19.0	53.9	53.9	2.3	51.6	13.1	2.3	2.8	1.1	14.3	4.3
Vazão Componente (kg/h)															
Glicose	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Água	0	1	85	1511	18177	52361	52361	1226	51134	1597	1226	2799	21	2802	2802
Dióxido de carbono	180	4	2	0	0	22	22	22	0	6	22	0	29	0	0
Gás hidrogênio	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Acetona	17	68	196	249	118	245	245	245	0	512	245	0	757	0	0
Butanol	0	0	32	777	476	691	691	691	0	809	691	0	0	1500	1500
Etanol	0	1	17	81	108	152	152	151	1	99	151	0	249	1	1
Ácido Butírico	0	5	7	10	70	229	229	4	225	22	4	2	0	27	7
Ácido Acético	0	2	2	4	60	249	249	3	245	8	3	3	0	11	5
Amônia	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bactérias	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno glicol	0	2540	3822	3637	0	0	0	0	0	10000	0	4	0	10000	5

Continuação Tabela 13. Correntes do processo para o caso dos ejetores.

Número da corrente	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45
Temperatura (°C)	197.0	40.0	62.6	69.4	25.0	40.0	91.1	87.3	95.9	100.0	87.3	116.8	91.8	70.0	70.0
Pressão (atm)	1.000	1.000	1.000	0.700	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Fração de Vapor	0	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0
Vazão Total (ton/h)	10.0	1.5	0.8	0.3	0.8	0.3	4.3	3.8	1.0	2.8	2.7	1.5	1.1	1.1	1.0
Vazão Componente (kg/h)															
Glicose	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Água	0	3	0	21	0	21	2802	3399	600	2799	472	3	469	469	600
Dióxido de carbono	0	0	29	0	7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Gás hidrogênio	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Acetona	0	0	757	0	744	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Butanol	0	1500	0	0	0	0	1500	316	316	0	2105	1500	605	605	316
Etanol	0	1	0	249	0	249	1	63	63	0	73	1	73	73	63
Ácido Butírico	19	6	0	0	0	0	7	2	0	2	6	6	0	0	0
Ácido Acético	6	2	0	0	0	0	5	3	0	3	2	2	0	0	0
Amônia	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bactérias	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno glicol	9990	1	0	0	0	0	5	4	0	4	1	1	0	0	0

Número da corrente	46	47	48	49	50	51	52	53
Temperatura (°C)	40.0	197.0	25.0	35.5	25.9	197.2	243.2	25.0
Pressão (atm)	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	3.400	3.400	1.000
Fração de Vapor	0	0	1	0	1	0	1	0
Vazão Total (ton/h)	51.6	0.0	0.0	8.1	4.4	10.0	10.0	8.0
Vazão Componente (kg/h)								
Glicose	0	0	0	0	0	0	0	0
Água	51134	0	0	8039	99	0	0	7952
Dióxido de carbono	0	0	22	5	4147	0	0	0
Gás hidrogênio	0	0	0	0	132	0	0	0
Acetona	0	0	13	53	6	0	0	0
Butanol	0	0	0	30	0	0	0	0
Etanol	1	0	0	3	0	0	0	0
Ácido Butírico	225	0	0	1	0	19	19	0
Ácido Acético	245	0	0	1	0	6	6	0
Amônia	0	0	0	0	0	0	0	0
Bactérias	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno glicol	0	10	0	0	0	10000	10000	0

Tabela 14. Especificações dos equipamentos para o caso dos ejetores.

Torres	T-401	T-402	T-403	T-404	T-405	T-406	TA-201
Número de estágios	45	30	30	30	10	10	10
Tipo de prato	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve
Estágio alimentação	1	8 e 15	20	15	1	1	1 e 10
Pressão (atm)	1.5	1	0.7	1	1	1	1
Altura (m)	32.2	20.5	20.5	20.5	6.6	6.6	7.3
Diâmetro (m)	1.11	0.77	0.92	1.17	0.41	0.51	0.80
Razão de refluxo	-	3	8	0.1	-	-	-
Vazão de destilado (kg/h)	2343.3	1056.6	786.5	4319.6	980.0	1147.0	-
Temperatura do topo (°C)	105	62	45	98	96	92	-
Temperatura da base (°C)	112	113	69	197	100	117	-
Condensador	-	E-405	E-407	E-411	-	-	-
Tipo	-	Parcial	Parcial	Parcial	-	-	-
Energia (MW)	-	-0.64	-0.91	-0.26	-	-	-
LMTD (°C)	-	26.6	8.8	62.4	-	-	-
U (W/m ² °C)	-	1110	1940	380	-	-	-
Área de troca térmica (m ²)	-	21.6	53.5	11.1	-	-	-
Utilidade	-	Água 30°C	Água 30°C	Água 30°C	-	-	-
Vazão de utilidade (ton/h)	-	55.1	78.9	22.7	-	-	-
Refrervador	E-402	E-404	E-406	E-410	E-417	E-418	-
Tipo	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	-
Energia (MW)	3.54	1.50	0.84	2.96	0.49	0.45	-
LMTD (°C)	47.7	46.2	90.1	253.5	59.5	42.7	-
U (W/m ² °C)	5770	2470	4960	4960	5800	2270	-
Área de troca térmica (m ²)	12.9	13.1	1.9	2.4	1.4	4.7	-
Utilidade	LP	LP	LP	HP	LP	LP	-
Vazão de utilidade (ton/h)	6.1	2.6	1.4	6.3	0.8	0.8	-

Continuação Tabela 14. Especificações dos equipamentos para o caso dos ejetores.

Trocador de calor	E-101	E-301	E-302	E-303	E-304	E-305	E-401	E-403
Temperatura saída (°C)	37	33	40	40	40	243	70	90
Pressão saída (atm)	0.0639	0.0639	0.1283	0.4294	1.0805	3.4	1.5	1
Energia (MW)	13.71	-12.44	-2.65	-1.55	-0.98	2.61	2.11	-0.94
LMTD (°C)	216.5	22.5	38.7	58.6	61.2	27.4	105.9	62.7
U (W/m ² °C)	190	190	190	190	190	4510	2350	1660
Área de troca térmica (m ²)	333.2	2910.2*	359.7	139.5	83.9	21.1	8.5	9.0
Utilidade	LP	Água 10°C	Água 30°C	Água 30°C	Água 30°C	HP	LP	Água 30°C
Vazão de utilidade (ton/h)	23.7	2140.5	228.4	134.1	84.2	5.5	3.6	80.8
Trocador de calor	E-408	E-409	E-412	E-413	E-414	E-415	E-416	E-419
Temperatura saída (°C)	25	40	91	70	70	40	40	40
Pressão saída (atm)	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
Energia (MW)	-0.12	-0.01	-2.02	-0.47	-0.44	-0.19	-0.10	-4.28
LMTD (°C)	28.2	18.0	59.3	47.5	45.7	27.9	32.8	31.4
U (W/m ² °C)	620	1100	1100	2090	1980	2160	860	2130
Área de troca térmica (m ²)	7.0	0.3	31.0	4.7	4.8	3.2	3.6	64.0
Utilidade	Água 10°C	Água 30°C						
Vazão de utilidade (ton/h)	21.0	0.6	174.6	40.4	37.6	16.7	8.7	369.0
Bomba/Compressor	P-101	P-301	P-302	P-303	P-304	P-401	C-101	
Energia (kW)	9.30	0.99	0.44	0.21	1.66	1.21	4.89	
Pressão de saída (atm)	1.0	1.0	1.0	1.0	3.4	1.5	1.0	
Tanques	R-101	F-101	D-401					
Temperatura (°C)	37	37	87.3					
Pressão (atm)	1	0.0639	1					
Fração de vapor	0.01	0.07	-					
Volume (m ³)	500	50	50					
Ejetores	EJ-301	EJ-302	EJ-303					
Fator de compressão (FC)	2	3.3	2.5					
Diâmetro garganta (cm)	4	4	3					
Diâmetro da seção reta (cm)	34	14	6					

*Normalmente, um trocador de calor tem até 1000 m² (TURTON et al., 2018). Acima dessa área, é necessário associar mais trocadores em série ou paralelo.

4.3 Simulação do processo com compressores

A simulação do processo desenvolvido com compressores convergiu sem erros. O fluxograma da planta é apresentado na Figura 57 e os dados operacionais nas Tabelas 15 e 16. Os resultados são muito similares aos obtidos pela referência utilizada como base (MARIANO et al., 2011b). Todavia, observamos que o requerimento de energia elétrica total dos compressores foi de 3.9 MJ/kg de butanol que é inferior ao relatado por Mariano et al. (2011b), a saber 6 MJ/kg de butanol. No estudo apresentado por esses autores, foram utilizados 2 compressores em série. Na nossa análise, porém, foram utilizados 3 compressores com fatores de compressão menores que 3. Logo, o acréscimo de um terceiro compressor conseguiu reduzir em 36% a demanda de eletricidade e, conseqüentemente, reduzirá os custos operacionais.

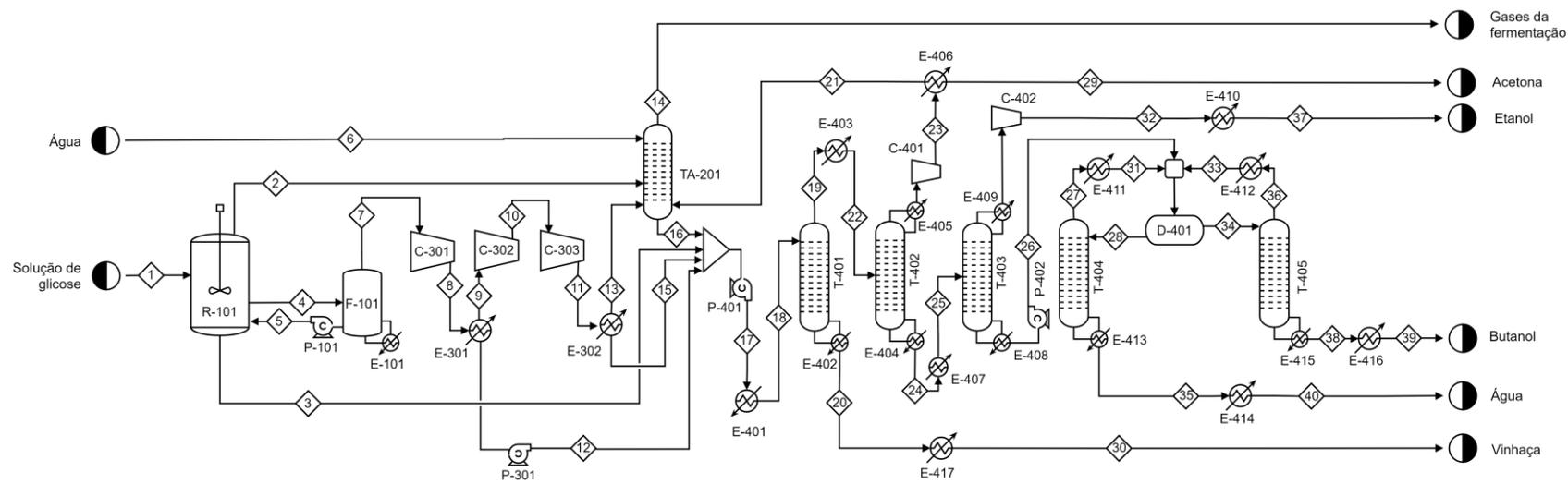


Figura 57. Fluxograma do processo com compressores.

Tabela 16. Especificações dos equipamentos para o caso dos compressores.

Torres	T-401	T-402	T-403	T-404	T-405	TA-201
Número de estágios	45	30	40	10	10	10
Tipo de prato	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve
Estágio alimentação	1	15	20	1	1	1 e 10
Pressão (atm)	1.5	0.7	0.3	1	1	1
Altura (m)	32.2	20.5	27.8	7.3	7.3	7.3
Diâmetro (m)	1.10	0.92	1.67	0.29	0.52	0.80
Razão de refluxo	-	8	40	-	-	-
Vazão de destilado (kg/h)	5242	785	262	350	1000	-
Temperatura do topo (°C)	105	45	50	92	94	-
Temperatura da base (°C)	112	81	63	100	118	-
Condensador	-	E-405	E-409	-	-	-
Tipo	-	Parcial	Parcial	-	-	-
Energia (MW)	-	-0.9	-2.8	-	-	-
LMTD (°C)	-	8.7	14.9	-	-	-
U (W/m ² °C)	-	1990	650	-	-	-
Área de troca térmica (m ²)	-	53.0	287.7	-	-	-
Utilidade	-	Água 30°C	Água 30°C	-	-	-
Vazão de utilidade (kg/h)	-	79.2	240.6	-	-	-
Refrervedor	E-402	E-404	E-408	E-413	E-415	-
Tipo	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	-
Energia (MW)	3.47	1.14	2.92	0.22	0.43	-
LMTD (°C)	47.7	78.4	96.9	59.5	41.6	-
U (W/m ² °C)	5770	4150	190	5620	3790	-
Área de troca térmica (m ²)	12.6	3.5	158.5	0.7	2.7	-
Utilidade	LP	LP	LP	LP	LP	-
Vazão de utilidade (ton/h)	6.0	2.0	5.0	0.4	0.7	-

Continuação Tabela 16. Especificações dos equipamentos para o caso dos compressores.

Trocador de calor	E-101	E-301	E-302	E-401	E-403	E-406	E-407
Temperatura saída (°C)	37	53	40	90	60	20	50
Pressão saída (atm)	0.064	0.19	1.20	1.50	1.50	1.00	0.70
Energia (MW)	13.71	-13.74	-1.22	3.09	-2.32	-0.12	-0.15
LMTD (°C)	216.5	57.5	61.1	91.4	45.3	19.1	29.3
U (W/m ² °C)	190	190	190.0	2280	1610	690	190
Área de troca térmica (m ²)	333.2	1257.8	104.8	14.9	31.8	9.4	26.1
Utilidade	LP	Água 30°C	Água 30°C	LP	Água 30°C	Água 10°C	Água 30°C
Vazão de utilidade (ton/h)	23.7	1185.6	104.8	5.3	200.1	5.4	12.5
Trocador de calor	E-410	E-411	E-412	E-414	E-416	E-417	
Temperatura saída (°C)	40	75	75	40	40	40	
Pressão saída (atm)	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	
Energia (MW)	-0.08	-0.13	-0.36	-0.19	-0.10	-4.29	
LMTD (°C)	33.3	48.5	49.3	27.9	33.1	31.4	
U (W/m ² °C)	650	1740	1550	2110	750	2130	
Área de troca térmica (m ²)	3.7	1.5	4.7	3.1	4.1	64.2	
Utilidade	Água 30°C						
Vazão de utilidade (kg/h)	6.88	11.18	31.23	15.98	8.79	369.89	
Bombas	P-101	P-301	P-401	P-402			
Energia (kW)	9.30	0.90	1.28	0.31			
Pressão de saída (atm)	1.0	1.0	1.5	1.0			
Compressores	C-301	C-302	C-303	C-401	C-402		
Energia (kW)	1393.7	101.2	123.4	4.9	8.0		
Pressão de saída (atm)	0.19	0.54	1.50	1.00	1.00		
Tanques	R-101	F-101	D-401				
Temperatura (°C)	37	37	69				
Pressão (atm)	1	0.064	1				
Fração de vapor	0.01	0.071	-				
Volume (m ³)	500	50	50				

4.4 Integração Energética

O *Aspen Energy Analysis* forneceu o potencial de economia máxima das utilidades quentes e frias conforme a análise *pinch* (Figura 58). A economia com utilidades é maior para o caso dos compressores. Isso acontece, pois a energia de alguns trocadores no sistema de ejetores, especialmente o condensador após o tanque *flash*, não pode ser reaproveitada no processo devido às temperaturas baixas das correntes. Além disso, não é possível reduzir a energia requerida de vapor de alta pressão e água fria. Essas utilidades são caras e podem ser um impasse para a viabilidade econômica do processo.

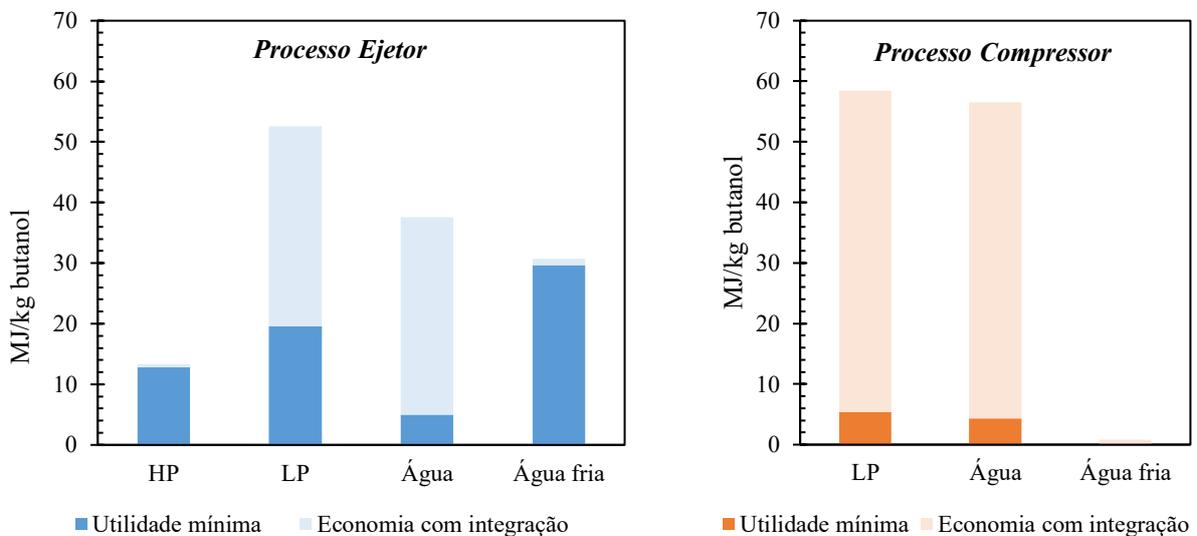


Figura 58. Potencial de economia de utilidades com a integração.

É interessante destacar também que no processo com compressores a demanda mínima de vapor LP é de 5.4 MJ/kg de butanol. Esse valor é inferior ao que foi obtido por Mariano et al. (2011b): 10.9 MJ/kg de butanol. Isso mostra que com outras integrações é possível reduzir ainda mais o requerimento energético da planta com compressores.

4.5 Análise Econômica

4.5.1 Custos de investimento (CAPEX)

Os custos de investimento (Figura 59) para o cenário com ejetores (MMUS\$ 5.6) foi menor que o caso com compressores (MMUS\$ 7.0). Essa diferença se deve principalmente ao custo do compressor, cujo investimento é cerca de 24 vezes maior que o dos ejetores (Figura 60). Nota-se também que na planta com ejetores houve um aumento do custo de trocadores por causa dos condensadores adicionados na Unidade 3. Ainda, é interessante destacar que o custo com as torres no processo de destilação extrativa proposto para a nova planta se equiparou ao custo da separação convencional do ABE. Os custos com reatores e tanques, por sua vez, se mantiveram iguais, pois a Unidade 1 é a mesma em ambos os casos. Das quatro Unidades simuladas, as Unidades 3 e 4 são as responsáveis pelo maior CAPEX.

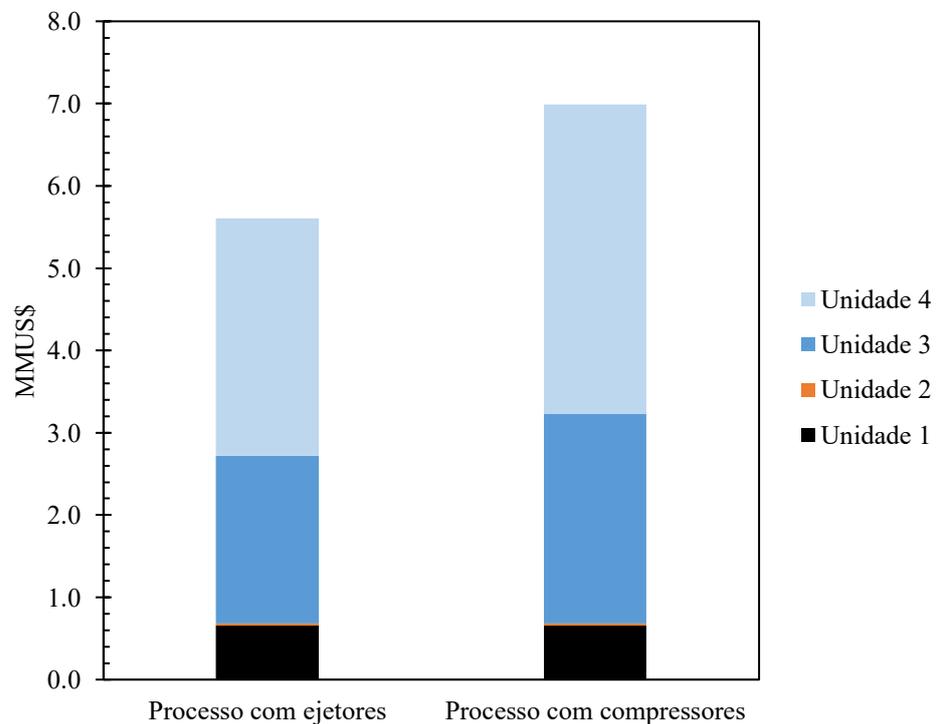


Figura 59. CAPEX total para os casos com ejetor e com compressor.

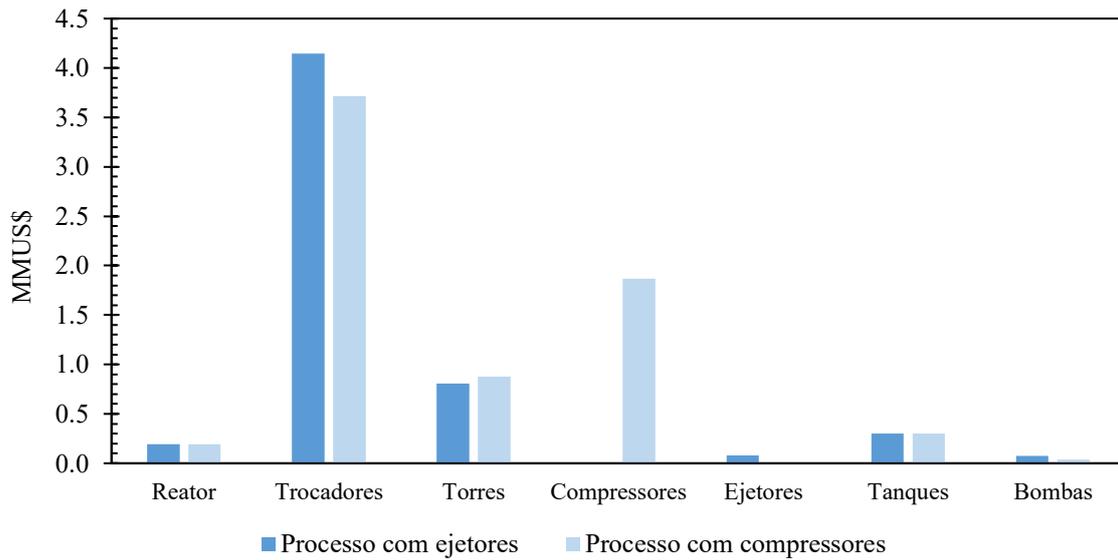


Figura 60. CAPEX de cada tipo de equipamento para os casos com ejetor e com compressor.

4.5.2 Custos operacionais (OPEX)

Os custos operacionais (Figura 61) para o cenário com ejetores (4.8 MMUS\$/ano) foi maior que o caso com compressores (3.5 MMUS\$/ano) sem considerar a integração energética. Em ambos os processos, as utilidades são responsáveis pela maior parcela do OPEX, porém, no caso dos ejetores, esse custo é ainda maior (Figura 61).

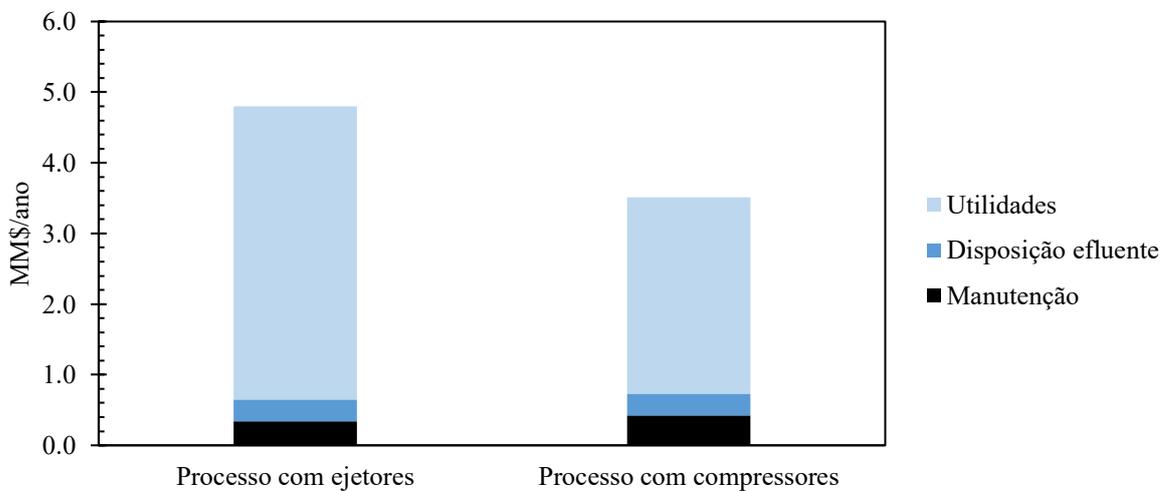


Figura 61. OPEX discriminado para os casos com ejetor e com compressor.

Ao analisar as utilidades para um contexto sem integração, o gasto com vapor de baixa pressão é similar nos dois casos estudados (Figura 62). Esse vapor é requerido sobretudo no

tanque flash e nos refulvedores das colunas de destilação. O consumo de eletricidade no sistema de ejetores é irrisório comparado ao outro processo. Porém, como mostrado anteriormente, a planta de ejetores necessita de vapor de alta pressão cujo custo se equipara ao consumo de eletricidade no caso dos compressores. Ainda, no caso dos ejetores, há um gasto muito alto com água fria, devido ao condensador que foi adicionado antes dos ejetores, conforme destacado na Unidade 3. Esse gasto não existe no cenário dos compressores e é responsável pela maior diferença entre os casos. Por meio da integração energética, conseguimos calcular a economia máxima de utilidade em cada caso. Ambos os processos apresentaram uma redução considerável de gasto com utilidade após a integração (Figura 62). Todavia, na planta com compressores, a economia é muito maior, como discutido anteriormente.

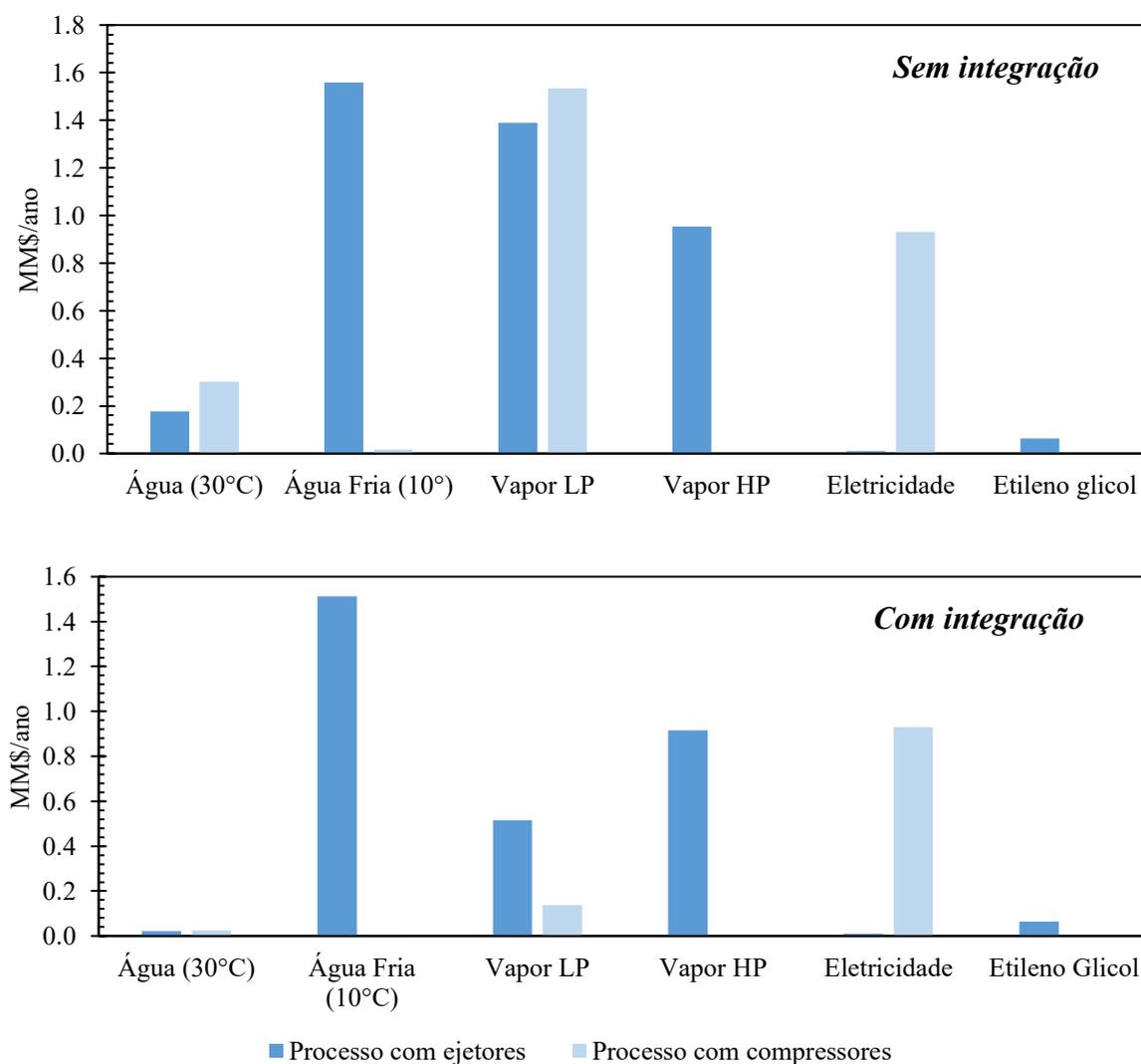


Figura 62. Custo de utilidades para os casos com ejetor e com compressor sem e com integração energética.

Assim, pela análise econômica, concluímos que o custo total da planta com ejetores (CAPEX anualizado + OPEX) é maior comparado à planta com compressores, mesmo após a integração (Figura 63). É importante destacar que nesta análise consideramos que o custo de investimento foi mantido constante. Na prática, o CAPEX pode ser alterado devido à rede de trocadores de calor implementada para realizar a integração.

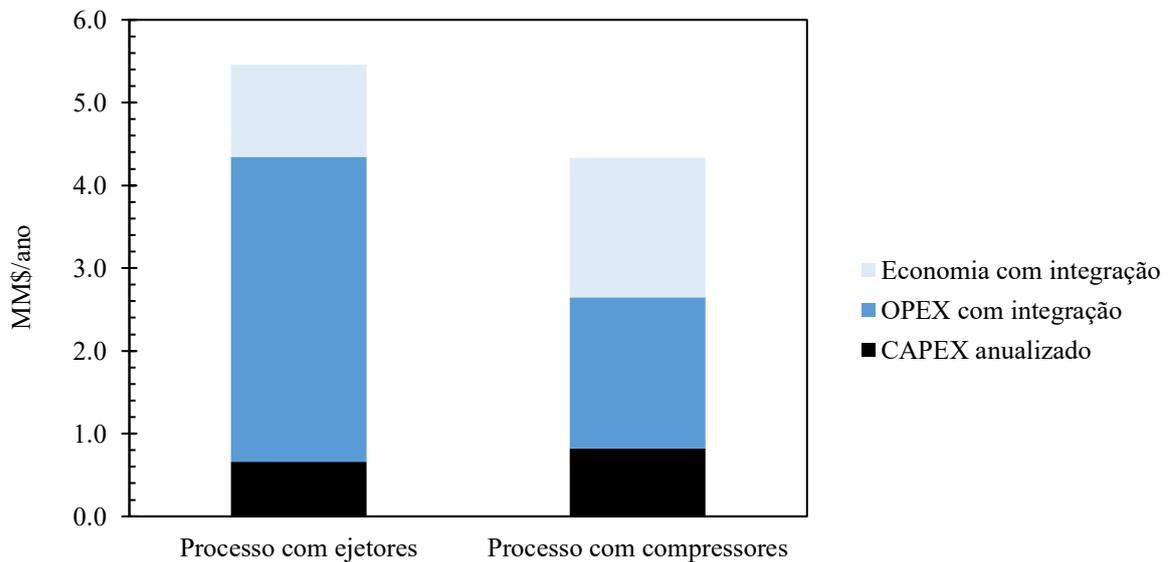


Figura 63. Custo total anualizado para os casos com ejetor e com compressor.

4.6 Desenvolvimento de novos processos

A análise econômica mostrou que o processo com ejetor é mais caro que o processo com compressor por causa, sobretudo, da água fria (10°C) e do vapor de alta pressão. Essas utilidades estão associadas a três equipamentos (Figura 64):

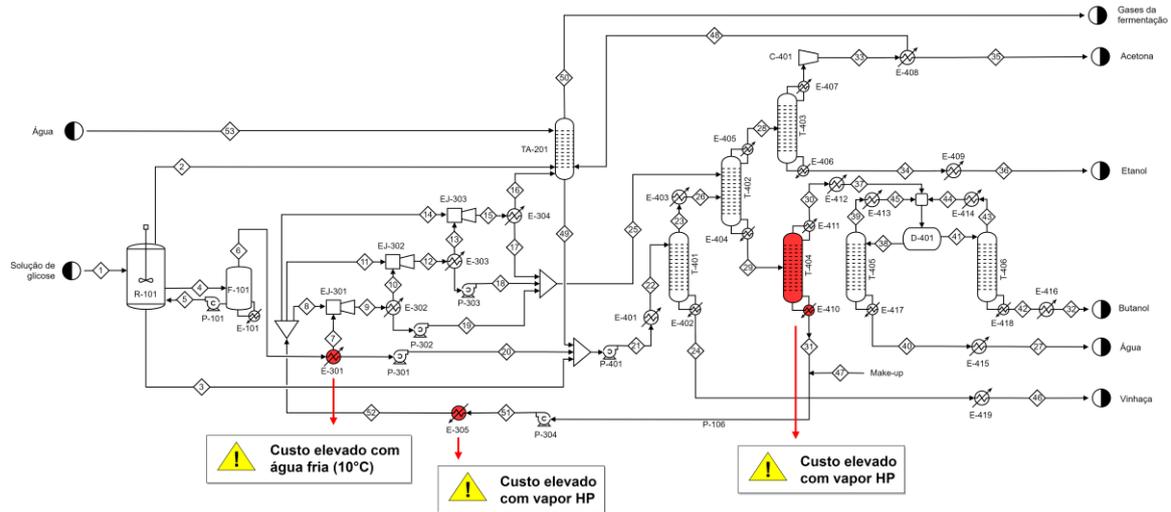


Figura 64. Equipamentos que encarecem o processo de ejetores.

- *Vaporizador E-305*: Esse vaporizador opera a uma temperatura de 243°C para gerar vapor de etileno glicol a 3.4 atm. Logo, esse equipamento precisa de vapor de alta pressão como utilidade (41 bar, 254°C). Quanto maior a quantidade de etileno glicol requerida pelos ejetores, maior será o consumo de vapor de alta pressão nesse vaporizador.
- *Torre T-404*: O refeedor da Torre T-104 necessita de vapor de alta pressão, pois sua temperatura é 197°C . Quanto maior a quantidade de água presente na corrente de alimentação dessa coluna (corrente 25, Figura 64), maior é a energia do refeedor e, consequentemente, maior a demanda de vapor de alta pressão.
- *Condensador E-301*: Esse condensador necessita de um grande volume de água fria para absorver a energia da corrente 6 (-12.4 MW). Essa energia não pode ser reaproveitada no processo, pois a temperatura da corrente 6 é baixa (37°C).

Dos três equipamentos destacadas, o condensador E-301, em especial, tem uma grande influência no processo, até mesmo sobre o funcionamento dos outros dois equipamentos. Para avaliar economicamente o impacto desse condensador, sua fração de vapor foi variada (Figura 65). Quanto maior a fração de vapor desse condensador, menor é sua energia e, consequentemente, menor o consumo de água fria. Todavia, observa-se que a elevação da fração de vapor aumenta muito o custo de vapor de alta pressão. Isso acontece, pois quanto mais vapor é alimentado ao sistema de ejetores, maior é a demanda de etileno glicol (Figura 66).

O aumento de etileno glicol, por sua vez, resulta no aumento de vapor de alta pressão no vaporizador E-305. Além disso, há um acréscimo de água que alimenta a torre T-404 e, portanto, um aumento de vapor de alta pressão requerida pelo refeedor dessa coluna. A economia com água fria não compensa o aumento de vapor de alta pressão, o que resulta na elevação do OPEX. O CAPEX, por outro lado, tem uma pequena redução que é pouco significativa. Assim, observa-se que quanto maior a fração de vapor do condensador E-301, maior é o custo total do processo.

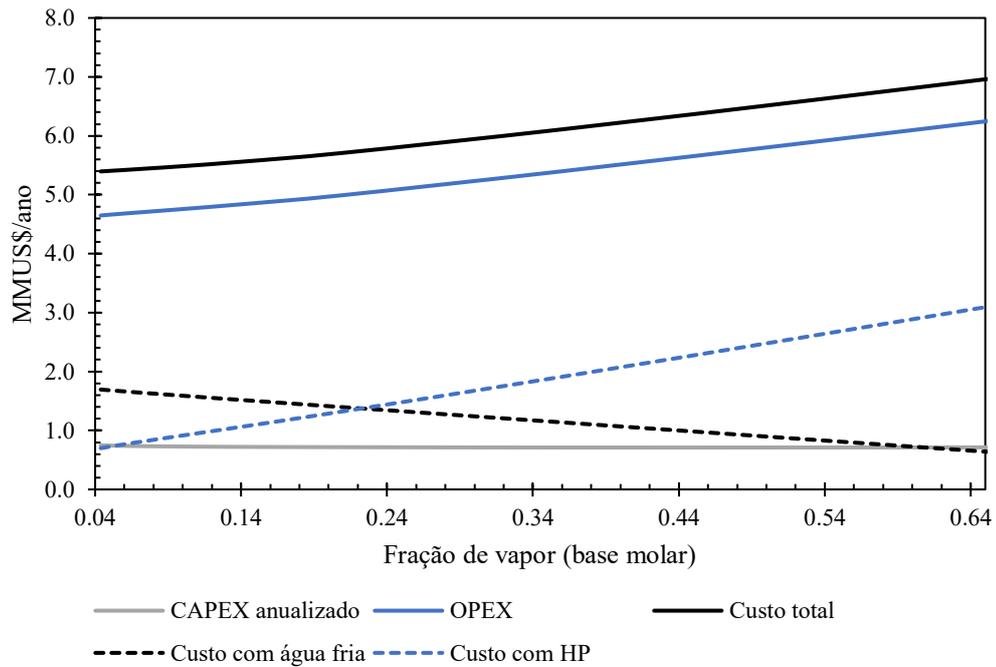


Figura 65. Efeito da variação da fração de vapor do condensador E-301 sobre custos.

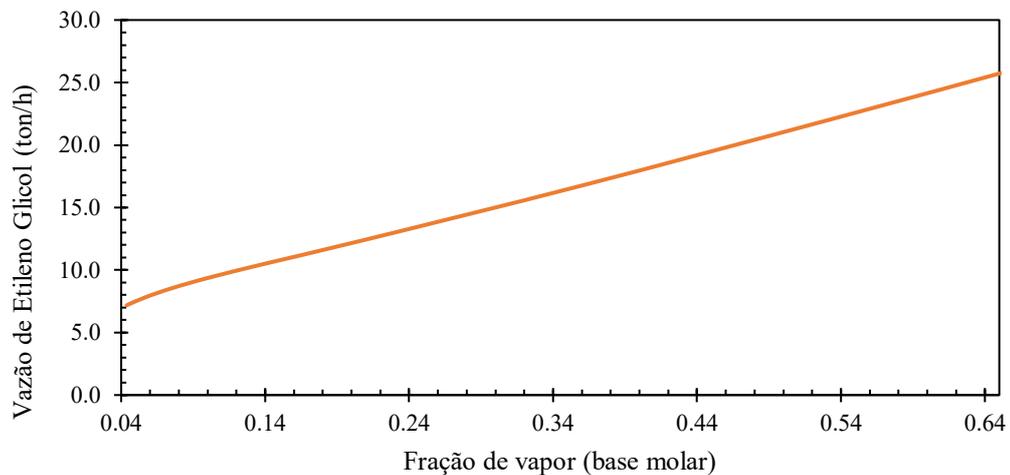


Figura 66. Efeito da variação da fração de vapor do condensador E-301 sobre a vazão de etileno glicol.

Diante dessa análise, pensamos em algumas modificações no processo que poderiam solucionar esses desafios encontrados na planta de ejetores.

4.6.1 Proposta de novos processos

Foram propostos outros 5 possíveis cenários para a planta de ejetores (nomeada como cenário 1), conforme descrito no fluxograma da Figura 67. Também testamos uma alternativa para reduzir o consumo de eletricidade na planta desenvolvida com compressores (nomeada como cenário 8).

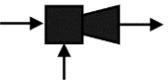
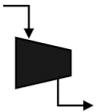
Casos base	Problemas	Possíveis soluções	✔ Vantagens	✘ Desvantagens
 <p>Sistema de ejetores operando com Etileno Glicol (Cenário 1)</p>	<p>Custo elevado com água fria (10°C) e vapor de alta pressão</p>	<ul style="list-style-type: none"> → Diminuir a fração de vapor no condensador E-101 e modificar a configuração do sistema de ejetores → Remover o condensador E-101 e modificar a configuração do sistema de ejetores → Adicionar um compressor antes dos ejetores → Utilizar vapor de água como fluido primário → Utilizar vapor de água como fluido primário e adicionar um compressor antes dos ejetores 	<ul style="list-style-type: none"> → Redução do consumo de água fria e de vapor de alta pressão → Redução do consumo de água fria e de vapor de alta pressão → Não necessita de água fria → Não necessita de vapor de alta pressão → Não necessita de vapor de alta pressão e possibilita redução do consumo de água fria 	<ul style="list-style-type: none"> → Aumento do consumo de vapor de baixa pressão → Cenário 2 → Aumento do consumo de vapor de média pressão → Cenário 3 → Aumento do consumo de eletricidade → Cenário 4 → Aumento do consumo de água fria e de vapor de média pressão → Cenário 5 → Aumento do consumo de eletricidade e de vapor de média pressão → Cenário 6 → Aumento do consumo de água fria → Cenário 7
 <p>Sistema com compressores (Cenário 8)</p>	<p>Custo elevado com eletricidade</p>	<ul style="list-style-type: none"> → Adicionar um condensador antes dos compressores 	<ul style="list-style-type: none"> → Redução do consumo de eletricidade 	

Figura 67. Propostas para solucionar problemas na planta de ejetores.

Todos os processos propostos foram simulados por completo no Aspen Plus® (Anexo 3). O fluxograma de cada cenário é apresentado a seguir, onde as modificações principais foram destacadas.

Cenário 2

No cenário 2, o condensado do condensador E-301 alimenta o ejetor EJ-301 (Figura 68). A corrente de saída desse ejetor, contendo um grande volume de água, é direcionada à coluna T-401 sem se misturar ao etileno glicol. Nesta configuração, é possível aumentar a fração de vapor do condensador E-301, o que diminui a demanda de água fria neste trocador e a área de troca térmica. Ainda, há uma diminuição da demanda de etileno glicol, pois o primeiro ejetor não precisa desse solvente, o que economiza vapor de alta pressão no vaporizador E-305. Além disso, esse cenário permite com que menos água chegue à coluna T-404, o que reduz a demanda de vapor de alta pressão em seu refulvedor. Outra vantagem é que mais energia pode ser reaproveitada no processo. Todas essas modificações diminuem a demanda de água fria e vapor de alta pressão, porém há um aumento do consumo de vapor de baixa pressão, por causa do novo vaporizador E-306.

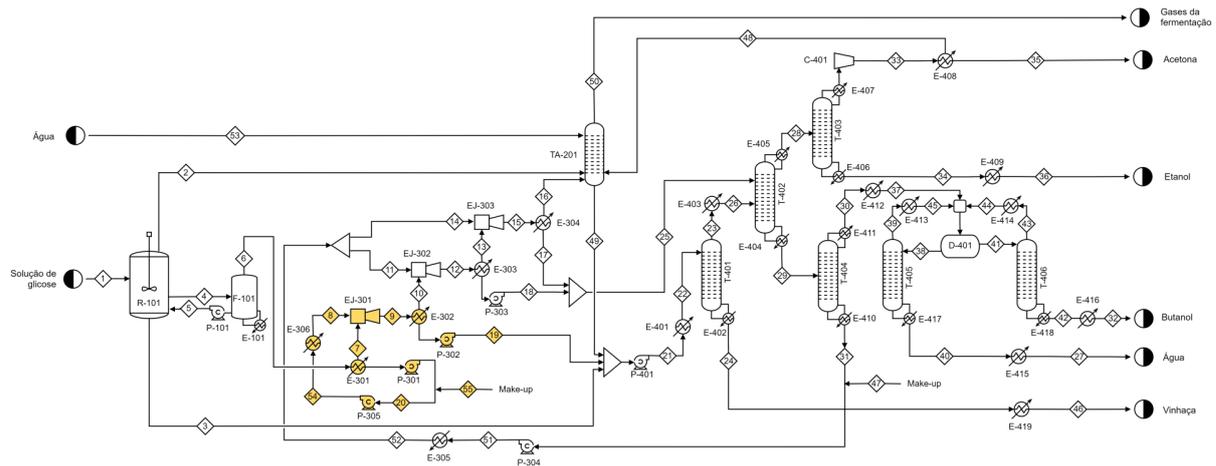


Figura 68. Fluxograma do cenário 2.

Cenário 3

No cenário 3, o condensador antes dos ejetores foi removido, o que elimina a demanda de água fria nesta Unidade (Figura 69). Parte do condensado do condensador E-302 alimenta o ejetor EJ-301, enquanto outra parte é direcionada à coluna T-401. Essa configuração também reduz a quantidade de água que é direcionada a coluna T-404, diminuindo o consumo de vapor

de alta pressão em seu refeedor. Outra vantagem é que mais energia pode ser reaproveitada no processo. Todas essas modificações diminuem a demanda com água fria e vapor de alta pressão, porém há um aumento do consumo de vapor de baixa média pressão, por causa do novo vaporizador E-301.

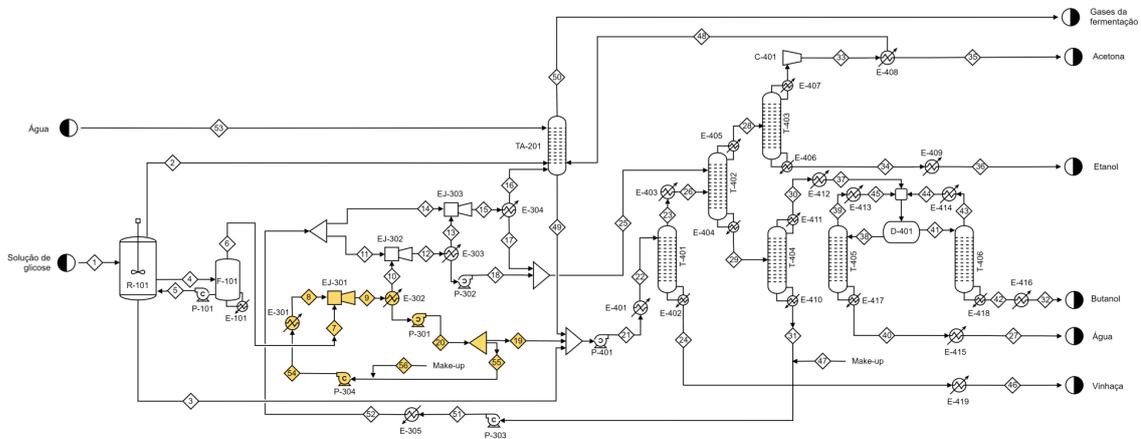


Figura 69. Fluxograma do cenário 3.

Cenário 4

Após o tanque flash F-101, colocamos um compressor com fator de compressão de 1.6 (Figura 70). Esse equipamento aumenta a temperatura da corrente 6 de 37°C para 83°C, permitindo com que o condensador E-301 opere com água a 30°C no lugar de água fria (10°C). Ainda, a pressão da corrente 6 aumenta de 0.0639 atm para 0.1 atm. Essa pequena elevação na pressão resulta numa diminuição de etileno glicol requerido pelos ejetores, o que diminui vapor de alta pressão.

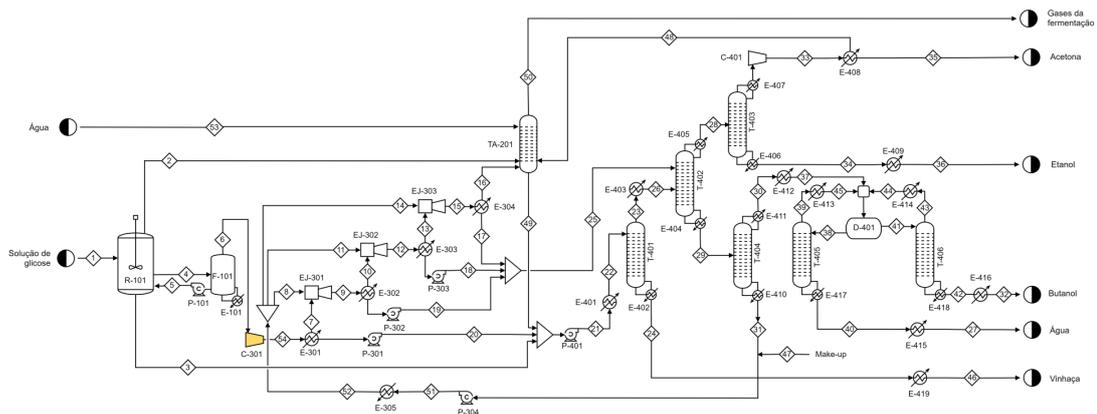


Figura 70. Fluxograma do cenário 4.

Cenário 5

Nesta configuração, o vácuo é gerado por meio de dois ejetores operando com vapor de água (Figura 71). O sistema de ejetores é alimentado com parte do fluido que sai do ejetor EJ-302. Como a água é mais volátil que o etileno glicol, não há necessidade de utilizar vapor de alta pressão para vaporizá-la. Apesar disso, há um aumento do consumo de vapor de baixa pressão e de média pressão. Diferente do etileno glicol, não é desejado que os produtos se misturem com o vapor, pois o processo ficará ainda mais diluído. Assim, abaixamos a temperatura do condensador E-301 para 15 °C com o propósito de condensar uma quantidade maior de ABE, o que demanda mais água fria. Por esse motivo, apenas dois ejetores são suficientes para gerar o vácuo. É interessante destacar também que a Unidade 4 foi projetada apenas com a destilação convencional, uma vez que não há etileno glicol no processo.

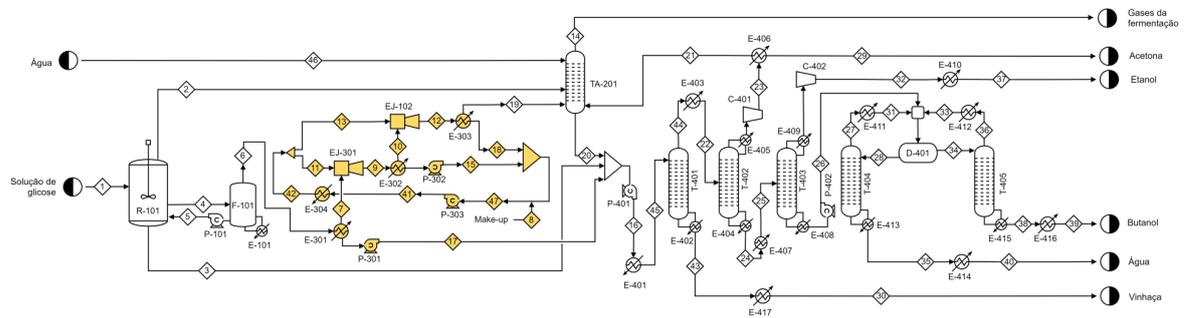


Figura 71. Fluxograma do cenário 5.

Cenário 6

O cenário 6 também utiliza vapor de água e apresenta a mesma configuração que o cenário anterior. Porém, assim como feito no cenário 4, adicionamos um compressor com fator de compressão de 1.6 após o tanque *flash* F-101 (Figura 72). Esse equipamento aumenta a pressão e temperatura da corrente 6, o que economiza água fria no trocador E-301. Diferente do cenário 4, não foi possível substituir a água fria a 10°C pela água a 30°C. Ainda, há um aumento do requerimento de energia elétrica, além do aumento do consumo de vapor de baixa e de média pressão.

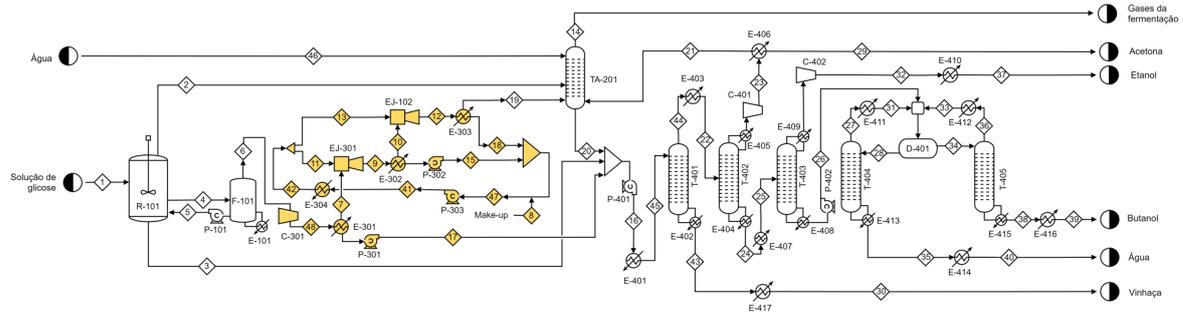


Figura 72. Fluxograma do cenário 6.

Cenário 7

A configuração do cenário 7 é a mesma da planta com compressores (cenário 8), porém o condensador E-301 (a 33°C) foi colocado antes do primeiro compressor (Figura 73). Nessa configuração, menos vapor é direcionado aos compressores, o que reduz energia elétrica. Todavia, há um aumento de consumo de água fria (10°C).

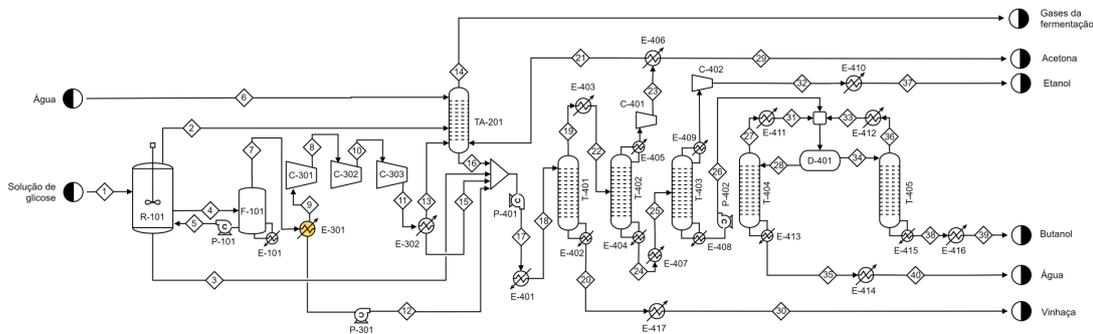


Figura 73. Fluxograma do cenário 7.

Cada cenário apresenta suas vantagens e desvantagens. Logo, para saber se houve redução dos custos comparados aos casos iniciais (cenários 1 e 8), realizamos a análise econômica completa de cada processo, assim como descrito na metodologia. Ainda, estimamos os custos de investimento e de operação da fermentação ABE convencional sem recuperação a vácuo. Para realizar essa estimativa, foram feitas as seguintes considerações:

- i. O processo de fermentação convencional sem vácuo é constituído pelas Unidade 1, 2 e 4. A Unidade 1 é formada apenas pelo reator, enquanto as outras Unidades são as mesmas que na planta de compressores (cenário 8).
- ii. Normalmente, a produtividade do processo convencional varia de 0.2 a 0.5 g butanol/(L.h) (ASSUMPCÃO et al., 2018; MARIANO et al., 2011b;

MARIANO; FILHO, 2012). Assim, definimos que a produtividade seria de 0.35 g butanol/(L.h), que é o valor médio. Sabendo a produtividade, o volume do reator pode ser estimado por:

$$\text{Volume reator (L)} = \frac{\text{Produção de butanol (g/h)}}{\text{Produtividade (g/L.h)}} \quad (74)$$

Ainda, consideramos que o volume máximo do reator é de 1000 m³.

- iii. O CAPEX das Unidades 2 e 4 também foram estimados utilizando a regra dos seis décimos ($R = 0.6$) com base nos custos já calculados para a planta de compressores (cenário 8). Para realizar o ajuste de escala, utilizamos como parâmetro a produção de vinhaça. Definimos que na fermentação convencional, a produção é de 71 L de vinhaça/L de butanol, para uma concentração de 12 g/L de butanol no fermentador (MARIANO; FILHO, 2012; QURESHI et al., 2008). Em processos que utilizam o vácuo, essa produção é de 28 L de vinhaça/L de butanol, como mostrado neste trabalho.
- iv. Consideramos que a demanda de vapor de baixa pressão na etapa de destilação é de 25 MJ/kg de butanol (MARIANO; FILHO, 2012; QURESHI et al., 2008). É importante destacar que este valor já inclui as integrações energéticas. Sabendo a demanda, foi possível estimar seu custo operacional conforme descrito na metodologia.
- v. A demanda de água de resfriamento (30°C) foi estimada considerando a proporção de 0.43 J água/J de vapor de baixa pressão. Essa proporção foi calculada conforme os trabalhos de Mariano et al. (2011b).
- vi. Outros custos operacionais, como de manutenção e disposição de efluente, foram calculados conforme a metodologia.

4.6.2 Análise econômica dos novos processos

Os resultados da nova análise econômica são discutidos a seguir.

Custo de investimento (CAPEX)

O custo de investimento de todos os cenários é apresentado na Figura 74.

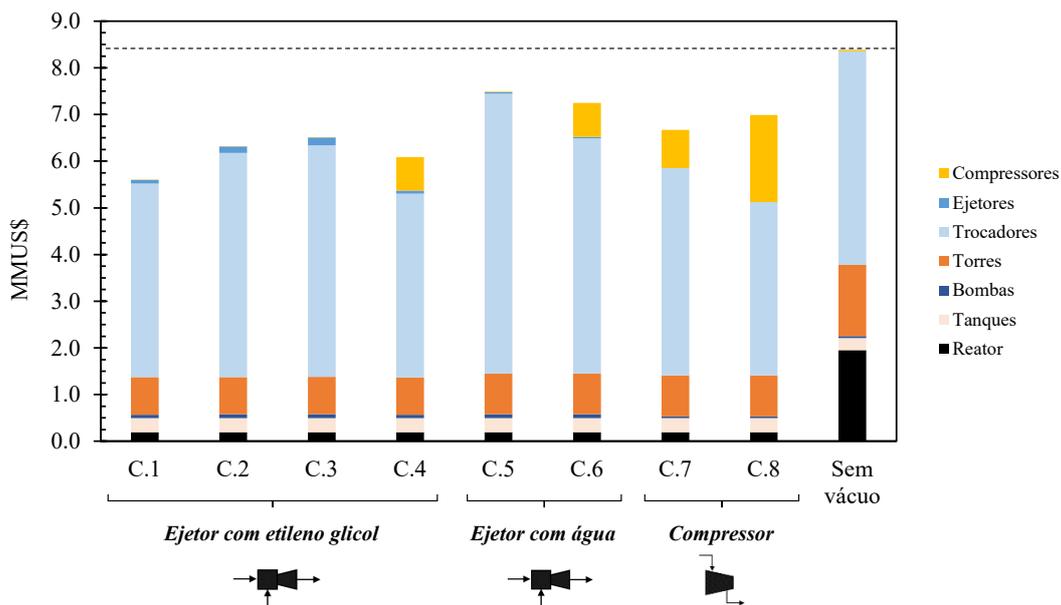


Figura 74. Custo de investimento (CAPEX) de todos os cenários.

Pela análise da Figura 74, é possível inferir que:

- O custo com reator no cenário sem vácuo é 10 vezes maior comparado aos outros cenários. Isso acontece, pois no processo convencional a produtividade do butanol (0.35 g butanol/L h) é bem menor do que aqueles que usam a tecnologia do vácuo (3 g butanol/L h). São necessários 5 reatores de 1000 m³ na fermentação convencional, enquanto nos casos que usam a tecnologia do vácuo, apenas 1 reator de 500 m³. Assim, outro benefício da utilização do vácuo além da redução do CAPEX é que as plantas são mais compactas.
- A planta de ejetores com etileno glicol desenvolvido inicialmente neste trabalho (C.1) apresentou menor CAPEX (MMUS\$ 5.6). Logo, as sugestões propostas não proporcionaram redução desse custo.

- Os cenários que utilizam ejetores com etileno glicol (C.1, C.2, C.3 e C.4) são mais baratos diante dos ejetores com vapor de água (C.5 e C.6) e dos compressores (C.7 e C.8).
- Em todos os casos, a maior parte do CAPEX é referente a trocadores de calor. Esse custo é ainda maior para os sistemas com ejetores que utilizam vapor de água como fluido primário (C.5 e C.6). Isso se deve, sobretudo, ao condensador que foi adicionado antes dos ejetores.
- A adição de um condensador antes do 1º compressor, em C.7, reduziu o gasto com compressores e aumentou o custo com trocadores. Porém, o CAPEX total desse cenário ainda ficou menor que o original (C.8).

Potencial de redução de custos operacionais (OPEX) pela integração

A Figura 75 apresenta o potencial de redução do OPEX que foi calculado a partir da integração energética.

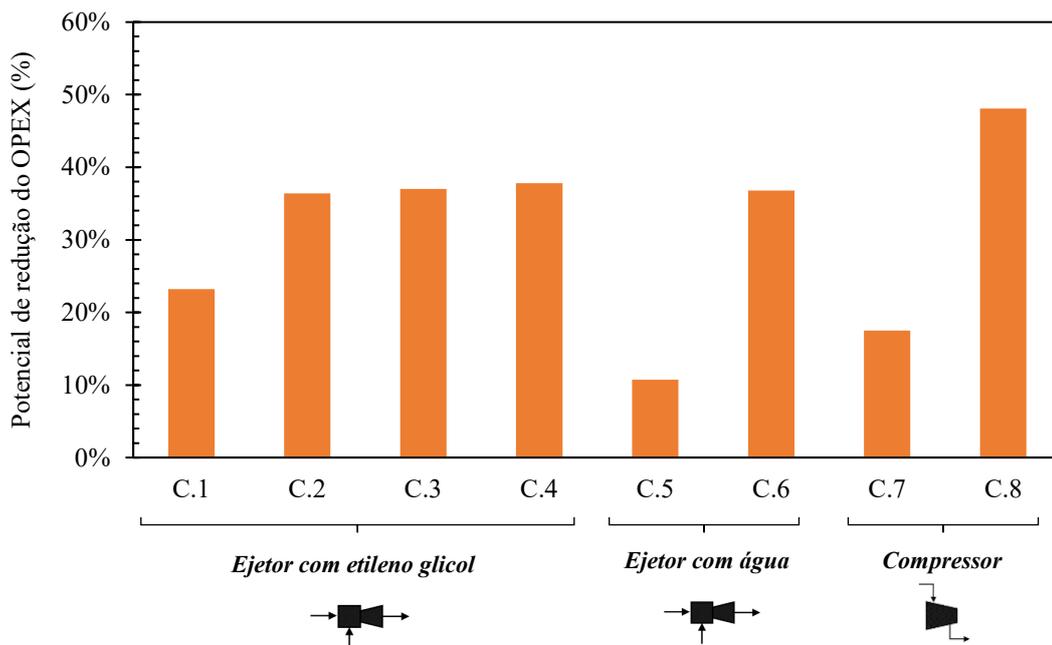


Figura 75. Potencial de redução de custos operacionais (CAPEX) de todos os cenários obtidos pela integração energética.

Pela análise da Figura 75, é possível inferir que:

- Com a integração, é possível reduzir de modo significativo os custos operacionais de todos os cenários simulados. Essa redução se deve, sobretudo, à diminuição do consumo de vapor de baixa pressão.
- O cenário com os compressores (C.8), desenvolvido inicialmente neste trabalho, apresenta o maior potencial de economia do OPEX (48%). Isso se deve sobretudo ao condensador após o primeiro compressor.
- A redução da fração de vapor do condensador E-301 (em C.2) ou a sua remoção (em C.3) promoveram um aumento da energia recuperável comparado ao processo original (C.1).
- A adição de um compressor em C.4 e C.6 antes dos ejetores também proporcionaram a elevação da energia recuperável.
- A redução da fração de vapor do condensador E-301 (em C.5), por sua vez, reduziu a energia recuperável.
- A adição de um condensador antes do 1º compressor, em C.7, reduziu o potencial comparado ao processo inicial (C.8).

Custos operacionais (OPEX) após a integração

O custo operacional de todos os cenários, considerando a integração energética, é apresentado na Figura 76.

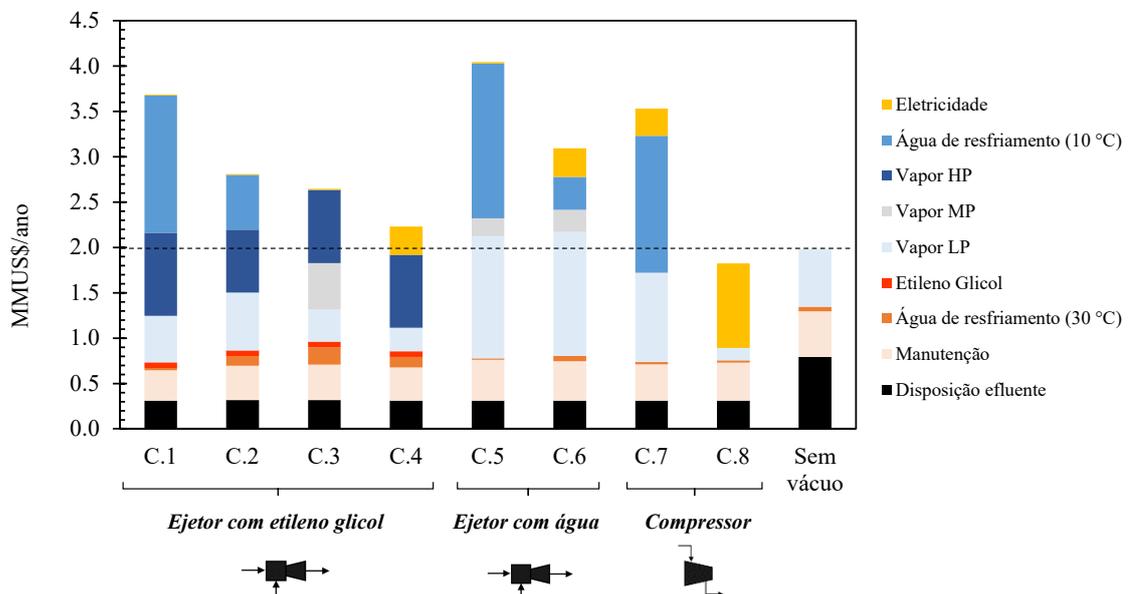


Figura 76. Custos operacionais (OPEX) de todos os cenários após integração energética.

Pela análise da Figura 76, é possível inferir que:

- A produção de vinhaça na fermentação convencional (71 L/L butanol) é muito maior do que os processos que utilizam a tecnologia do vácuo (28 L/L butanol). Assim, o custo com a disposição desse efluente pela fertirrigação também é mais alto. Além dos benefícios econômicos, a redução da vinhaça com a tecnologia do vácuo traz vantagens ambientais, uma vez que a fertirrigação excessiva pode resultar na salinização e acidificação dos solos (DANTAS et al., 2020; FUESS; GARCIA; ZAIAT, 2018).
- Os novos cenários propostos para o sistema ejetor com etileno glicol (C.2, C.3 e C.4) reduziram os custos operacionais comparado ao processo inicial (C.1). Em todos esses casos, a demanda de vapor HP e de água fria (10 °C) diminuiram.
- No cenário C.2, a demanda de água fria reduziu quase pela metade, porque houve uma diminuição da fração de vapor do condensador E-301. Todavia, o consumo de vapor LP aumentou, por causa do vaporizador que alimenta o primeiro ejetor.
- Em C.3, não há demanda de água fria no sistema de ejetores, pois o condensador E-301 foi removido. Porém a planta necessita de vapor de média pressão para o vaporizador que alimenta o primeiro ejetor.
- A adição de um compressor em C.4 possibilitou com que a água fria (10 °C) fosse substituída pela água ambiente (30 °C), porém aumentou o consumo de eletricidade por causa do compressor adicionado.
- A substituição do etileno glicol pelo vapor de água (C.5 e C.6) não trouxe benefícios para o OPEX. Mesmo que os processos que utilizam vapor de água não necessitam de vapor de alta pressão, observa-se um aumento do consumo de água fria e um custo adicional de vapor de média pressão.
- A adição de um compressor em C.6 não permitiu com que a água fria (10 °C) fosse substituída pela água ambiente (30 °C), como no caso do etileno glicol (C.4).
- O cenário C.7, por sua vez, tem um consumo menor de eletricidade, porém o custo com água fria torna o processo ainda mais caro que o original (C.8).
- De todos os novos cenários desenvolvidos, o C.4 (ejetor com etileno glicol e compressor) é o que teve uma redução de custos operacionais mais significativa. Seu OPEX mínimo foi de 2.2 MMUS\$/ano que é mais próximo ao caso C.8, referente a planta de compressores (1.8 MMUS\$/ano). O cenário C.8, por sua vez, conseguiu

apresentar um OPEX mínimo um pouco inferior ao caso sem recuperação a vácuo (2 MMUS\$/ano), o que é um aspecto muito positivo.

Custo Total Anualizado

O cenário 8, com apenas compressores, apresentou o menor custo total: 209.8 US\$/ton butanol. O cenário 4, com ejetores a vapor de etileno glicol e compressor, também apresentou um custo baixo de 233.7 US\$/ton butanol. Ainda, os dois processos foram mais econômicos que o processo convencional sem vácuo (235.3 US\$/ton butanol), conforme mostrado na Figura 77.

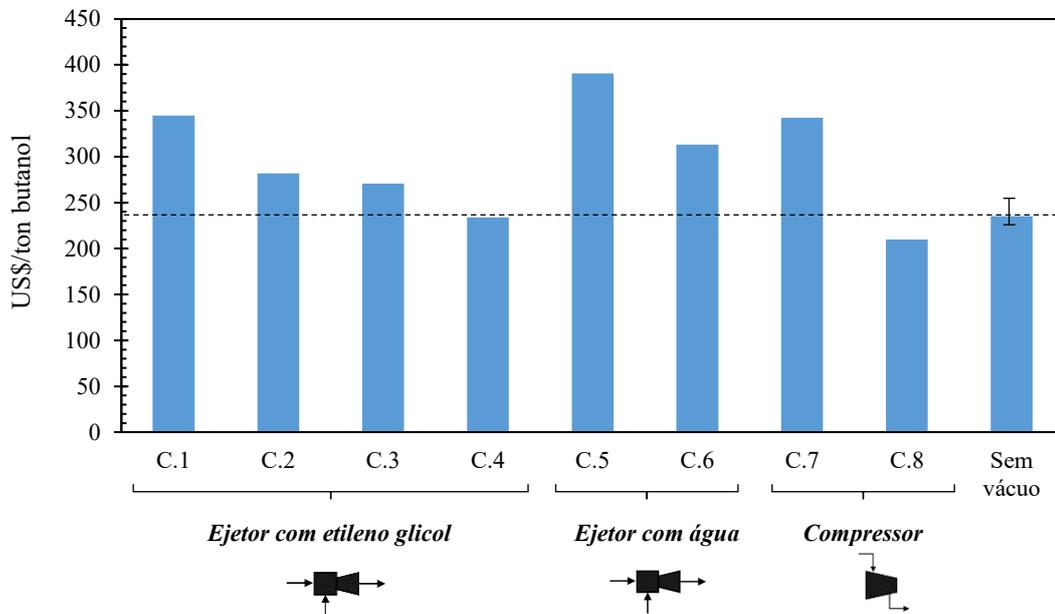


Figura 77. Custo total de todos os processos após integração energética. Para o cenário sem vácuo, foi inserido o erro referente ao intervalo de produtividade de 0.2 a 0.5 g butanol/L.h.

Análises de Sensibilidade

Algumas análises de sensibilidade foram feitas considerando os melhores resultados obtidos neste trabalho (casos C.4 e C.8) e o processo convencional sem recuperação a vácuo. Variamos o custo de eletricidade bem como o CAPEX para ver o impacto no custo total dos processos, considerando a integração energética.

Variação do preço de eletricidade

O custo da energia elétrica foi definido inicialmente como 0.0674 US\$/kWh. Logo, variamos esse valor de 0.03 a 0.11 US\$/kWh (Figura 77). Como o custo de vapores de água depende da eletricidade, foi necessário recalculer o preço dessas utilidades. Para tanto foi utilizada a metodologia descrita em TURTON et al. (2018).

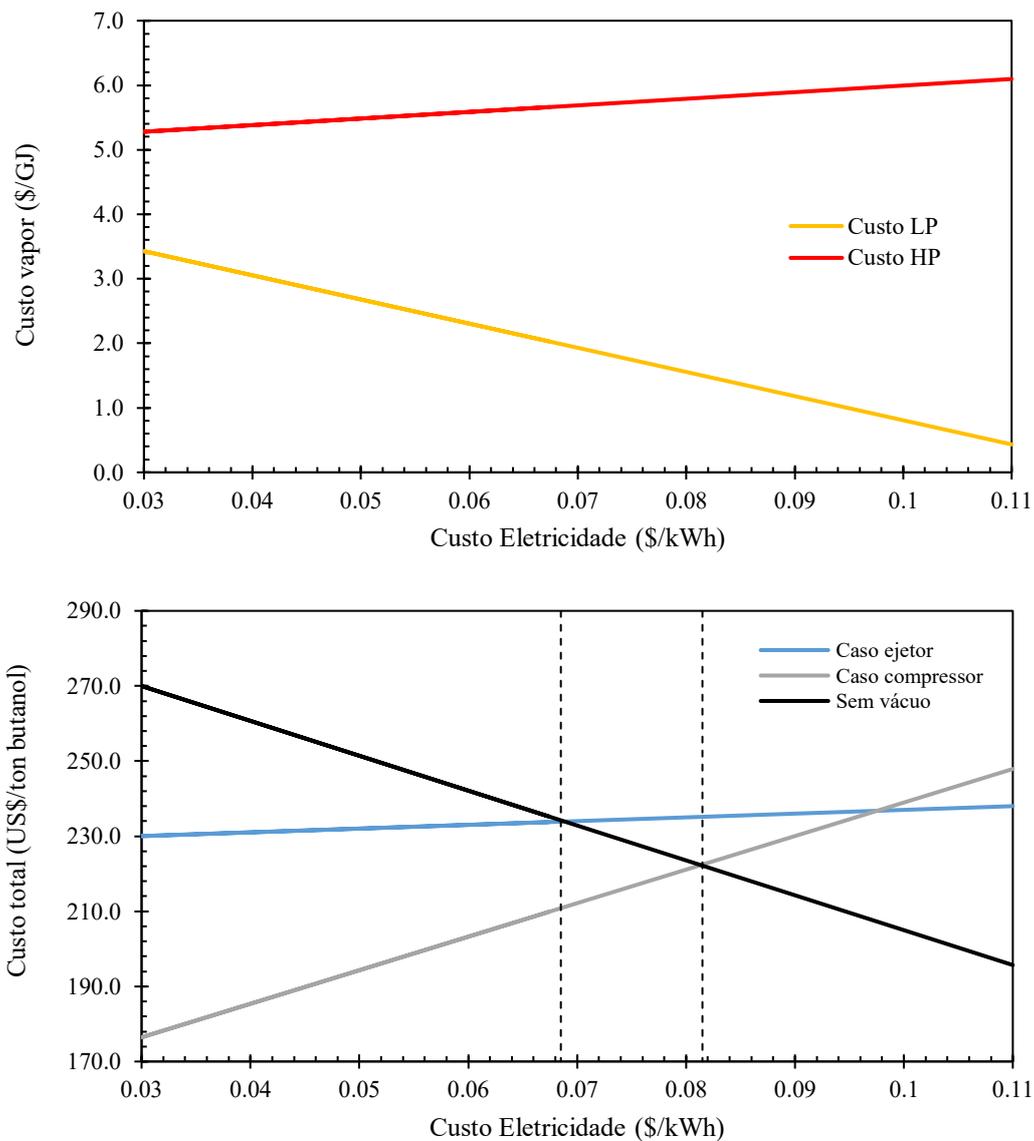


Figura 78. Variação do custo de eletricidade.

O preço do vapor de alta pressão (HP) aumenta com a elevação do custo de eletricidade. Todavia, o preço do vapor de baixa pressão (LP) diminui. Essa diminuição acontece, pois o

custo desse vapor foi calculado considerando a geração de energia elétrica. Assim, quanto mais valorizada a eletricidade, mais barato é o vapor LP.

Para um custo de eletricidade inferior a 0.068 US\$/kWh, os cenários que utilizam compressor (C.8) e ejetor com etileno glicol (C.4) são mais econômicos comparados ao processo convencional sem vácuo. Além disso, à medida que o preço da eletricidade diminui, a vantagem dos novos processos é ainda maior. O processo sem vácuo é apenas mais vantajoso que C.4 e C.8 para um custo superior a 0.082 US\$/kWh.

Variação do CAPEX

O CAPEX foi variado de 40 a 400 % do seu valor original (Figura 79). Para um CAPEX superior a 95 %, os processos com compressor e ejetor são mais baratos que o convencional. Observa-se também que a diferença entre os casos se torna mais acentuada à medida que o CAPEX aumenta. Ainda, para um custo superior a 285 %, o cenário com ejetor é o mais vantajoso.

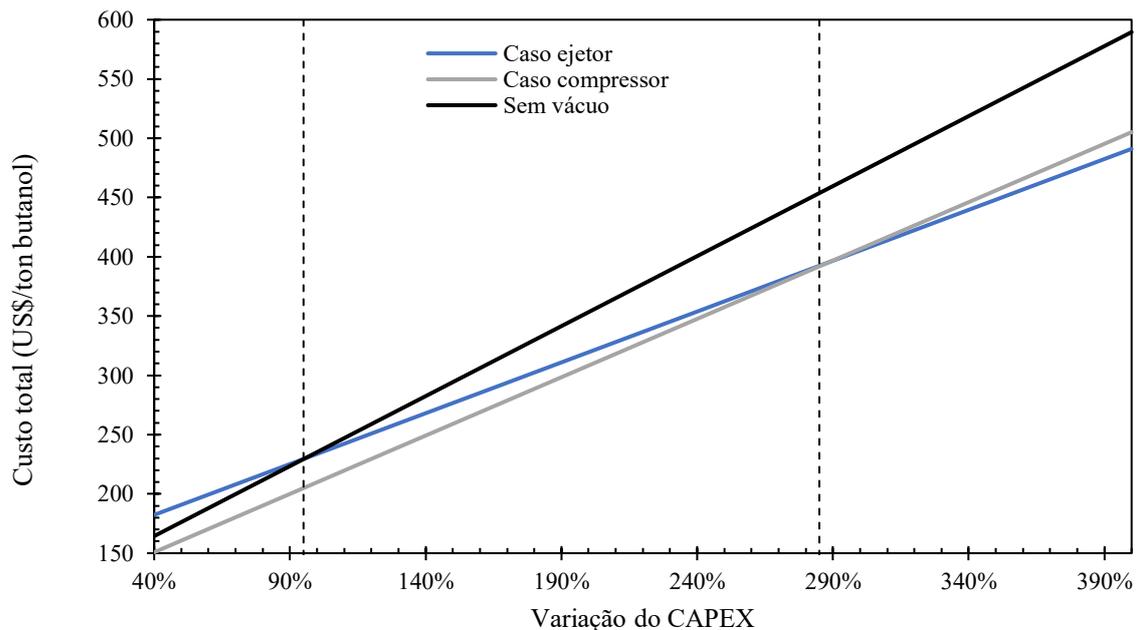
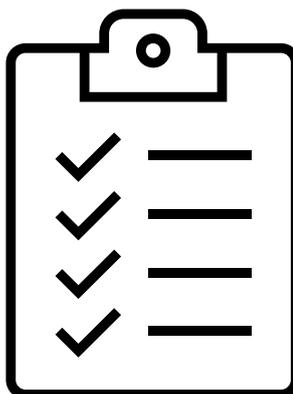


Figura 79. Variação do CAPEX.

CAPÍTULO 5

Considerações Finais

Neste capítulo, apresentamos as principais conclusões deste projeto e algumas sugestões para trabalhos futuros.



5.1 Conclusões

Neste trabalho, desenvolvemos um sistema de geração de vácuo e condensação baseado em ejetores para a fermentação ABE. Esse tipo de sistema é inédito na literatura até o momento. Todo o processo, desde a fermentação até a destilação, foi simulado no Aspen Plus® com êxito.

Para simular os ejetores no simulador, programamos um código em linguagem Fortran baseado em um modelo unidimensional que foi validado com dados experimentais. Essa metodologia é bastante útil e poderá ser empregada futuramente em outros trabalhos de simulação. Com a modelagem implementada, diferentes configurações de ejetores foram testadas. Observamos que um sistema com múltiplos estágios de ejetores com intercondensadores é necessário para uma economia de fluido primário, que mostrou ser um fator limitante no estudo.

A proposta inicial dessa dissertação era desenvolver apenas o processo com ejetores operando com vapor de etileno glicol. Todavia, propomos também outras configurações utilizando ejetores com vapor de água e compressores. Ao todo foram desenvolvidos oito cenários, sendo quatro referentes a ejetores a vapor de etileno glicol, dois referentes a ejetores a vapor de água e dois referentes a compressores. Cada um dos cenários foi simulado por completo e analisado economicamente, considerando uma integração energética máxima. Todas as plantas apresentaram a mesma produção de 2.5 ton ABE/h.

A substituição de compressores por ejetores de fato reduz o consumo de eletricidade, porém aumenta a demanda de outras utilidades. A principal limitação do processo com ejetores a vapor de etileno glicol é o consumo de vapor de alta pressão e de água de resfriamento a 10°C. A adição de um compressor com baixo fator de compressão antes dos ejetores se mostrou benéfica para este caso, reduzindo custos operacionais. Os cenários com ejetores a vapor de etileno glicol tiveram um custo de investimento menor comparado aos outros cenários. Ejetores a vapor de água, por sua vez, não foram uma solução vantajosa para a fermentação ABE a vácuo, pois nesse sistema a demanda de água fria é ainda maior. Este cenário apresentou custos altos, tanto de investimento quanto operacionais. Além disso, o acréscimo de um condensador antes do sistema de compressores também não proporcionou redução dos custos totais.

O cenário 8, com apenas compressores, foi o mais econômico de todos os processos desenvolvidos (209.8 US\$/ton butanol) seguido do cenário 4, com ejetores a vapor de etileno glicol e compressor (233.7 US\$/ton butanol). Ambos os casos ficaram ligeiramente mais baratos que o processo convencional sem vácuo (235.3 US\$/ton butanol). A vantagem dos

novos processos desenvolvidos é ainda maior para custos menores de eletricidade e custos altos de CAPEX.

Após todas as análises, concluímos que a fermentação ABE a vácuo do tipo *flash* com compressor e/ou ejetor a vapor de etileno glicol tem potencial de apresentar um custo total inferior ao processo convencional sem vácuo, desde que haja integrações energéticas. É importante destacar também que, além dos benefícios econômicos, a fermentação *flash* torna a planta mais compacta, pois utiliza um número muito menor de reatores por causa da maior produtividade. Ainda, a tecnologia reduz impactos ambientais causados pelo volume excessivo de vinhaça na fertirrigação.

5.2 Sugestões de trabalhos futuros

A partir dos resultados obtidos nesta dissertação, sugerimos algumas ideias que poderiam ser avaliadas em trabalhos futuros com o objetivo de tornar a fermentação ABE a vácuo com ejetores ainda mais econômica, a saber:

- i. *Testar novas combinações de ejetor e compressor:* De todos os cenários desenvolvidos com ejetores, o melhor foi aquele que utilizou compressor e ejetor a vapor de etileno glicol juntos. Logo, essa combinação poderia ser explorada com mais detalhes em novos trabalhos. Sugerimos, por exemplo, testar diferentes posições desses equipamentos, bem como diferentes condições operacionais.
- ii. *Realizar um estudo de integração energética mais detalhado:* Para trabalhos futuros, sugerimos que sejam feitas análises globais de cascata de calor para cada um dos cenários desenvolvidos. Por meio dessa metodologia, é possível identificar de forma sistemática a origem do calor. Ainda, seria interessante desenvolver a rede de trocadores de calor a partir dos casos 4 e 8 para saber se é possível chegar na demanda mínima calculada pela análise *pinch*. Outra sugestão é estudar a integração da usina de ABE com a usina de etanol.
- iii. *Trabalhar com pressões mais altas no tanque flash:* Ao aumentar a pressão do tanque *flash*, sua temperatura também aumenta para uma dada fração de vapor. Portanto, se a pressão desse tanque fosse maior, a corrente de saída que contém os produtos estaria a uma temperatura maior e poderia ser condensada parcialmente sem a necessidade de utilizar água de resfriamento a 10°C, que foi um fator limitante em vários cenários. Um ponto importante que precisa ser considerado nessa sugestão é a necessidade de adicionar um filtro antes do tanque *flash*. Esse filtro é importante para impedir com que os microrganismos fermentadores cheguem no mesmo, pois uma temperatura mais alta pode ser um ambiente inóspito.
- iv. *Utilizar fluidos primários leves no sistema de ejetor:* A utilização de fluidos primários pesados no sistema de ejetores, a exemplo do etileno glicol, mostrou ser onerosa por causa do vapor de alta pressão. Isso acontece pois o fluido primário precisa ser vaporizado a altas pressões e, assim, altas temperaturas. Por esse motivo, a utilização de fluidos leves poderia trazer algum benefício econômico. Uma sugestão é utilizar a

acetona, que é bastante volátil. Outra vantagem desse solvente é que o mesmo pode ser separado pela destilação convencional para a separação ABE. Ainda, a acetona produzida no próprio processo poderia servir como corrente de *make-up*. Todavia, um aspecto negativo de utilizar fluidos leves e que precisa ser avaliado é a temperatura dos ejetores. À medida que o fluido escoar no ejetor, sua temperatura diminui dependendo da posição no equipamento. Logo, fluidos muito leves podem ocasionar uma redução acentuada da temperatura, que por sua vez pode gerar um congelamento no ejetor e atrapalhar seu funcionamento.

- v. *Utilizar fluidos primários imiscíveis em água no sistema de ejetor:* A utilização de fluidos imiscíveis em água poderia reduzir custos na etapa de destilação. No nosso trabalho, por exemplo, o grande volume de água misturada ao etileno glicol ocasionou o aumento do consumo de vapor de alta pressão na torre de recuperação do solvente. Caso o fluido primário fosse imiscível em água, poderíamos utilizar um decantador logo após os ejetores. A corrente rica em água seria previamente separada e direcionada a coluna de desidratação para remover a vinhaça. Por outro lado, a corrente orgânica, com pouca água, seria direcionada para outras colunas para separação dos produtos. Uma sugestão de fluido é o ciclohexano que, além de pouco solúvel em meio aquoso, é um fluido leve. Um desafio neste caso é propor um processo de separação de todos os compostos envolvidos. Sabe-se que o ciclohexano é usado na destilação azeotrópica para separar o etanol. Porém, na fermentação ABE, há também o butanol e a acetona no meio. Logo, um estudo mais aprofundado é recomendado para entender melhor o comportamento dessa mistura para propor um possível processo de separação.

Referências

- ASSUMPÇÃO, Daniel de Castro et al. Resolving mismatches in the flexible production of ethanol and butanol from eucalyptus wood with vacuum fermentation. **Bioprocess and Biosystems Engineering**, , v. 41, n. 11, p. 1651–1663, 2018.
- BANKAR, Sandip B. et al. Biobutanol: The outlook of an academic and industrialist. **RSC Advances**, v. 3, n. 47, p. 24734–24757, 2013.
- BASF. **n-Butanol MSDS**, 2016. Disponível em: <<http://www.solvents.basf.com/portal/streamer?fid=278912>>. Acesso em: 1 jun. 2021.
- BIRGENHELER, David B. et al. Designing steam-jet vacuum systems. **Chemical Engineering (New York)**, v. 100, n. 7, p. 116–121, 1993.
- CHEM. **Ethylene Glycol Vacuum System**. 2017. Disponível em: <<http://www.chemprosys.com/process-solutions/ethylene-glycol-vaccum-system-process-solutions/>>. Acesso em: 1 jun. 2021.
- CHEN, S. L.; YEN, J. Y.; HUANG, M. Ch. Experimental investigation of ejector performance based upon different refrigerants. **ASHRAE Transactions**, v. 104, n. 2, p. 153–160, 1998.
- CHEN, Yau Ming; SUN, Chung Yung. Experimental Study of the Performance Characteristics of a Steam-Ejector Refrigeration System. **Experimental Thermal and Fluid Science**, , v. 15, n. 4, p. 384–394, 1997.
- DANTAS, Ercília Regina Silva. **Desenvolvimento de processo e avaliação técnico-econômica da produção de butanol lignocelulósico via fermentação IBE (Isopropanol-Butanol-Etanol)**. Dissertação de mestrado. Faculdade de engenharia Química, UNICAMP, 2018.
- DANTAS, Ercília Regina Silva et al. Biochemical conversion of sugarcane bagasse into the alcohol fuel mixture of isopropanol-butanol-ethanol (IBE): Is it economically competitive with cellulosic ethanol? **Bioresource Technology**, v. 314, n. May, p. 123712, 2020.
- DEFRATE, L. A.; HOERL, A. E. Optimum design of ejector using digital computers. In: CHEM. ENG. PROG. SYMP. SER. 1959.

- DÍAZ, Víctor Hugo Grisales; VON STOSCH, Moritz; WILLIS, Mark J. Butanol production via vacuum fermentation: An economic evaluation of operating strategies. **Chemical Engineering Science**, v. 195, p. 707–719, 2019.
- DOW CHEMICALS. **DOW™ n-Butanol**, 2013. Disponível em: <www.dow.com/productsafety/assess/finder.htm.®TM> Acesso em: 1 dez. 2020.
- DÜRRE, Peter. Biobutanol: An attractive biofuel. **Biotechnology Journal**, v. 2, n. 12, p. 1525–1534, 2007.
- EAMES, I. W.; APHORNRATANA, S.; HAIDER, H. A theoretical and experimental study of a small-scale steam jet refrigerator. **International Journal of Refrigeration**, v. 18, n. 6, p. 378–386, 1995.
- EZEJI, Thaddeus et al. Achievements and perspectives to overcome the poor solvent resistance in acetone and butanol-producing microorganisms. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 85, n. 6, p. 1697–1712, 2010.
- FISCHER, Kai; GMEHLING, Jürgen. P-x and 7 " Data for the Different Binary Butanol-Water Systems at 50., p. 309–315, 1994.
- FUESS, Lucas Tadeu; GARCIA, Marcelo Loureiro; ZAIAT, Marcelo. Seasonal characterization of sugarcane vinasse: Assessing environmental impacts from fertirrigation and the bioenergy recovery potential through biodigestion. **The Science of the total environment**, Netherlands, v. 634, p. 29–40, 2018.
- GRAHAM. **Ejectors Applications**. 2021. Disponível em: <<https://www.graham-mfg.com/graham-steam-jet-ejectors-applications>>. Acesso em: 1 jun. 2021.
- GREEN, Edward M. Fermentative production of butanol—the industrial perspective. **Current Opinion in Biotechnology**, v. 22, n. 3, p. 337–343, 2011. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0958166911000310?via%3Dihub>>. Acesso em: 28 out. 2019.
- HAN, Dongmin; CHEN, Yanhong. Combining the preconcentration column and recovery column for the extractive distillation of ethanol dehydration with low transition temperature mixtures as entrainers. **Chemical Engineering and Processing - Process Intensification**, , v. 131, n. May, p. 203–214, 2018.
- HARTMANIS, M. G. N.; GATENBECK, S. Intermediary metabolism in *Clostridium*

- acetobutylicum: Levels of enzymes involved in the formation of acetate and butyrate. **Applied and Environmental Microbiology**, v. 47, n. 6, p. 1277–1283, 1984.
- HUANG, B. et al. A 1-D analysis of ejector performance Analyse unidimensionnelle de la performance d'un éjecteur. **International Journal of Refrigeration**, v. 22, n. 5, p. 354–364, 1999.
- HUANG, B. J.; JIANG, C. B.; HU, F. L. Ejector performance characteristics and design analysis of jet refrigeration system. **Journal of Engineering for Gas Turbines and Power**, v. 107, n. 3, p. 792–802, 1985.
- IGLESIAS, José Miguel Cardemil. **Uma análise de modelos de projeto de ejetores e aplicações em ciclos de refrigeração utilizando vapor d'água e CO₂**. Universidade Federal de Santa Catarina, 2012.
- JIN, Chao et al. Progress in the production and application of n-butanol as a biofuel. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 15, n. 8, p. 4080–4106, 2011.
- JONES, D. T.; WOODS, D. R. Acetone-butanol fermentation revisited. **Microbiological Reviews**, v. 50, n. 4, p. 484–524, 1986.
- KENT, Robin. Services. **Energy Management in Plastics Processing**, , p. 105–210, 2018.
- KORTING. **Process vapour operated ejectors**. 2021. Disponível em: <<https://www.koerting.de/pt/vapor-do-processo.html>>. Acesso em: 1 jun. 2021.
- KUJAWSKA, Anna et al. ABE fermentation products recovery methods—A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 48, p. 648–661, 2015.
- KURKIJÄRVI, Antti; LEHTONEN, Juha; LINNEKOSKI, Juha. Novel dual extraction process for acetone–butanol–ethanol fermentation. **Separation and Purification Technology**, v. 124, p. 18–25, 2014.
- LEE, S. Y. et al. Fermentative butanol production by clostridia. **Biotechnology and Bioengineering**, v. 101, n. 2, p. 209–228, 2008.
- LIAO, Chaqing. **Gas ejector modeling for design and analysis**.: Texas A&M University, 2008.
- LINNHOFF, B.; TOWNSEND, D. W.; BOLAND, D.; HEWITT, G. F.; THOMAS, B. E. A.; GUY, A. R. **A User Guide on Process Integration for the Efficient Use of Energy**.

- Warks, England: Institution of Chemical Engineers, 1982.
- LÓPEZ CONTRERAS, A. M. et al. Production of longer-chain alcohols from lignocellulosic biomass: butanol, isopropanol and 2,3-butanediol. **Bioalcohol Production**, p. 415–460, 2010.
- MA, Zhiwei; BAO, Huashan; ROSKILLY, Anthony Paul. Thermodynamic modelling and parameter determination of ejector for ejection refrigeration systems. **International Journal of Refrigeration**, v. 75, p. 117–128, 2017.
- MARIANO, Adriano Pinto et al. An alternative process for butanol production: Continuous flash fermentation. **Chemical Product and Process Modeling**, v. 3, n. 1, 2008.
- MARIANO, Adriano Pinto et al. Bioproduction of butanol in bioreactors: New insights from simultaneous in situ butanol recovery to eliminate product toxicity. **Biotechnology and Bioengineering**, v. 108, n. 8, p. 1757–1765, 2011. a
- MARIANO, Adriano Pinto et al. Energy requirements for butanol recovery using the flash fermentation technology. **Energy and Fuels**, v. 25, n. 5, p. 2347–2355, 2011. b.
- MARIANO, Adriano Pinto et al. Assessment of in situ butanol recovery by vacuum during acetone butanol ethanol (ABE) fermentation. **Journal of Chemical Technology and Biotechnology**, v. 87, n. 3, p. 334–340, 2012.
- MARIANO, Adriano Pinto; FILHO, Rubens Maciel. Improvements in Biobutanol Fermentation and Their Impacts on Distillation Energy Consumption and Wastewater Generation. **Bioenergy Research**, v. 5, n. 2, p. 504–514, 2012.
- MARIANO, Adriano Pinto; FILHO, Rubens Maciel; EZEJI, Thaddeus Chukwuemeka. Energy requirements during butanol production and in situ recovery by cyclic vacuum. **Renewable Energy**, v. 47, p. 183–187, 2012.
- MATCHE. **Ejector Cost Estimate**. 2014. Disponível em: <<https://www.matche.com/equipcost/Ejector.html>>. Acesso em: 1 jun. 2021.
- NDABA, B.; CHIYANZU, I.; MARX, S. n-Butanol derived from biochemical and chemical routes: A review. **Biotechnology Reports**, v. 8, p. 1–9, 2015.
- NGUYEN, Ngoc Phuong Thao et al. Reviving the Weizmann process for commercial n-butanol production. **Nature Communications**, v. 9, n. 1, p. 1–8, 2018.

- NIEMISTÖ, Johanna. **Towards sustainable and efficient biofuels production : Use of pervaporation in product recovery and purification.** Tese de doutorado. University of Oulu, Acta Univ, 2014,
- OUTRAM, Victoria et al. Applied in situ product recovery in ABE fermentation. **Biotechnology Progress**, v. 33, n. 3, p. 563–579, 2017.
- PEREIRA, Guilherme C. Q. et al. Process design and economics of a flexible ethanol-butanol plant annexed to a eucalyptus kraft pulp mill. **Bioresource Technology**, v. 250, n. September 2017, p. 345–354, 2018.
- PEREIRA, Joana P. C. et al. Prospects and challenges for the recovery of 2-butanol produced by vacuum fermentation – a techno-economic analysis. **Biotechnology Journal**, v. 12, n. 7, p. 1–13, 2017.
- PERRY, John Howard; PERRY, Robert H.; GREEN, Don W. **Perry's chemical engineers' handbook.** 8th ed: McGraw-Hill, 2008.
- POWER, Robert B. **Steam Jet Ejectors for the Process Industries**, 1994.
- PYRGAKIS, Konstantinos A. et al. A process integration approach for the production of biological iso-propanol, butanol and ethanol using gas stripping and adsorption as recovery methods. **Biochemical Engineering Journal**, v. 116, p. 176–194, 2016.
- QURESHI, N.; LIU, S.; EZEJI, T. C. Cellulosic Butanol Production from Agricultural Biomass and Residues: Recent Advances in Technology BT - Advanced Biofuels and Bioproducts. In: LEE, James W. (Ed.). New York, NY: Springer New York, 2013. p. 247–265.
- QURESHI, Nasib et al. Butanol production from wheat straw by simultaneous saccharification and fermentation using *Clostridium beijerinckii*: Part I-Batch fermentation. **Biomass and Bioenergy**, v. 32, n. 2, p. 168–175, 2008.
- ROFFLER, S. R.; BLANCH, H. W.; WILKE, C. R. In situ recovery of fermentation products. **Trends in Biotechnology**, v. 2, n. 5, p. 129–136, 1984.
- SUN, Da Wen. Geometry ejectors and their applications in ejector refrigeration systems. **Energy**, v. 21, n. 10, p. 919–929, 1996.
- TURTON, Richard et al. **Analysis, synthesis and design of chemical processes.** Pearson Education, 2018.

- VANE, Leland M. Separation technologies for the recovery and dehydration of alcohols from fermentation broths. **Biofuels Bioproducts & Biorefining-Biofpr**, v. 2, n. 6, p. 553–588, 2008.
- WOOLEY, Robert J.; PUTSCHE, Victoria. Development of an ASPEN PLUS Physical Property Database for Biofuels Components. **Victoria**, n. April, p. 1–38, 1996.
- ZHU, Yin Hai et al. Simplified ejector model for control and optimization. **Energy Conversion and Management**, v. 49, n. 6, p. 1424–1432, 2008.
- ZVERLOV, V. V. et al. Bacterial acetone and butanol production by industrial fermentation in the Soviet Union: Use of hydrolyzed agricultural waste for biorefinery. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 71, n. 5, p. 587–597, 2006.

Anexo 1 Definição do modelo de Ejetores

Neste trabalho, avaliamos os modelos propostos por Zhu et al. (2008) e por Huang et al. (1999).

Zhu et al. (2008)

O modelo desenvolvido por Zhu et al. (2008) é representado pela seguinte equação (apresentadas no Capítulo 2 - Revisão Bibliográfica):

$$\omega = k_1 \alpha^m \left[1 - k_2 \alpha^{\frac{-\gamma-1}{4\gamma}} \left(\alpha^{\frac{1-\gamma}{\gamma}} - 1 \right)^{-\frac{1}{4}} \right] \quad (\text{A1.1})$$

Em que:

$\omega = m_s/m_p$ (razão entre as vazões mássicas, kg s^{-1} , dos fluidos secundário e primário);

$\alpha = P_s/P_p$ (razão entre as pressões dos fluidos secundário e primário);

$\gamma = C_p/C_v$ (coeficiente de expansão adiabática do fluido primário);

C_p é a capacidade térmica a pressão constante, $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$;

C_v é a capacidade térmica a volume constante, $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$;

k_1 , k_2 e m são parâmetros determinados experimentalmente.

Este modelo é bastante simples e não exige cálculo iterativo, o que facilitaria bastante sua implementação no simulador. Porém, antes de usá-lo, algumas análises foram feitas.

Influência dos parâmetros m , k_1 e k_2 sobre o modelo

Para analisar a influência dos parâmetros m , k_1 e k_2 sobre o modelo, realizamos inicialmente uma análise de sensibilidade e depois um planejamento de experimentos.

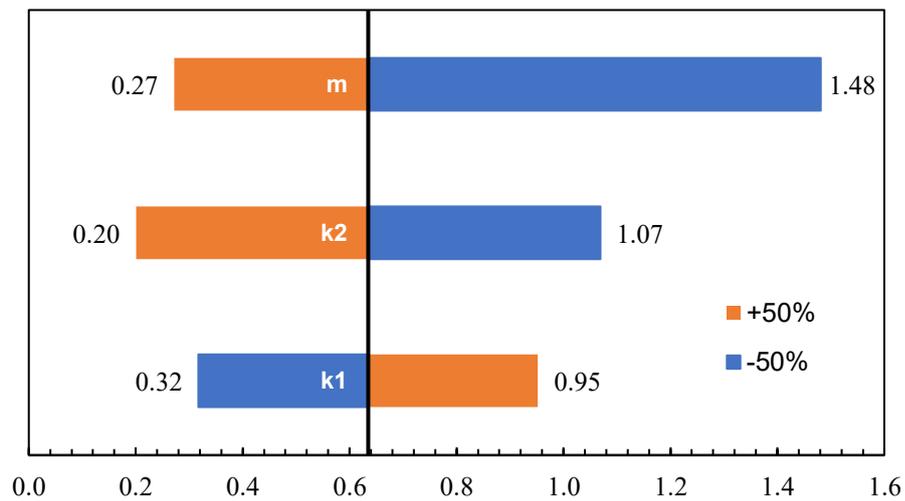
Análise de sensibilidade

Na análise de sensibilidade, fixamos um caso base (Tabela A1.1) e variamos m , k_1 , e k_2 em $\pm 50\%$.

Tabela A1. 1. Valores base da análise de sensibilidade.

Parâmetros	Valor
m	0.7392
k_1	8.1802
k_2	0.1471
γ	1.135
Ps (kPa)	47
Pp (kpa)	465

O parâmetro m, aparentemente, é o que mais influencia o modelo, seguido de k_2 (Figura A1.1). O valor de ω variou de 35 a 233% em relação ao caso base (0.6348), o que é um indicio de que o modelo é bem sensível a m, k_1 e k_2 .

**Figura A1.1.** Análise de sensibilidade do modelo.

Planejamento de experimentos

Realizamos um planejamento fatorial 2^k com delineamento do composto central rotacional ($\alpha = 1.6818$) com um limite de confiança de 95%. O caso base foi mantido conforme os dados da Tabela A1.1 e os parâmetros variados em $\pm 50\%$. Os valores codificados são mostrados na Tabela A1.2, enquanto a matriz de planejamento e as respostas, na Tabela A1.3. Toda a análise foi feita utilizando o *Statistica*®.

Tabela A1.2. Variáveis e valores codificados do planejamento.

Variável	-1,6818	-1	0	1	1,6818
k₁	4,0901	5,7482	8,1802	10,6122	12,2703
k₂	0,07355	0,1034	0,1471	0,1908	0,22065
m	0,3696	0,5194	0,7392	0,959	1,1088

Tabela A1.3. Matriz de Planejamento.

k₁	k₂	m	ω
-1,00	-1,00	-1,00	1,0384
-1,00	-1,00	1,00	0,3792
-1,00	1,00	-1,00	0,4380
-1,00	1,00	1,00	0,1600
1,00	-1,00	-1,00	1,9170
1,00	-1,00	1,00	0,7001
1,00	1,00	-1,00	0,8086
1,00	1,00	1,00	0,2953
-1,68	0,00	0,00	0,3174
1,68	0,00	0,00	0,9522
0,00	-1,68	0,00	1,0690
0,00	1,68	0,00	0,2007
0,00	0,00	-1,68	1,4809
0,00	0,00	1,68	0,2721
0,00	0,00	0,00	0,6348

Conforme o gráfico de Pareto (Figura A1.2), os fatores m, k₁ e k₂ e suas combinações binárias interferem de modo significativo no modelo. Os parâmetros que mais influenciam a resposta são m, k₂ e k₁, respectivamente. Este mesmo resultado foi obtido na análise de sensibilidade.

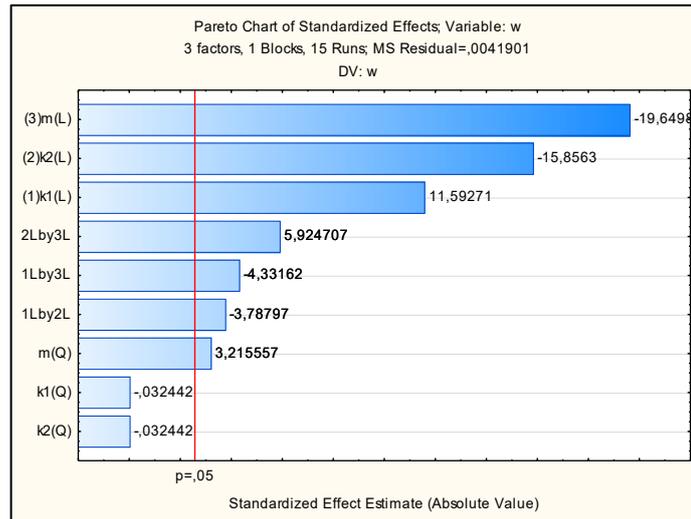


Figura A1.2. Gráfico de Pareto.

As superfícies das Figuras A1.3 a 5 também confirmam que a resposta ω varia bastante com m , k_1 e k_2 .

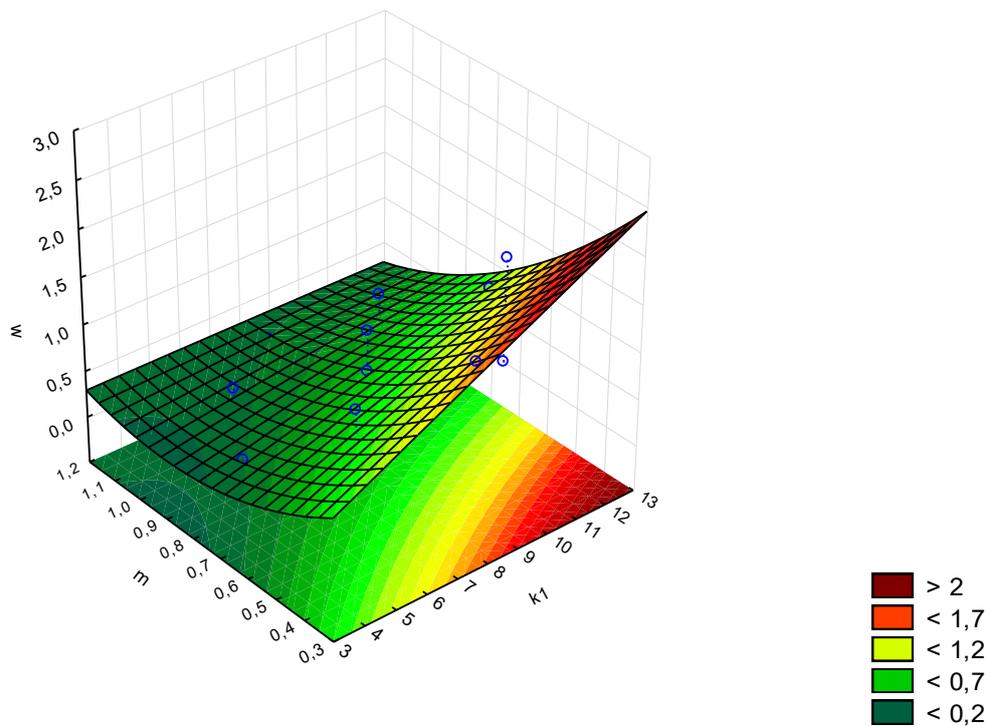


Figura A1.3. Superfície resposta variando m e k_1 ($k_2 = 0,1471$).

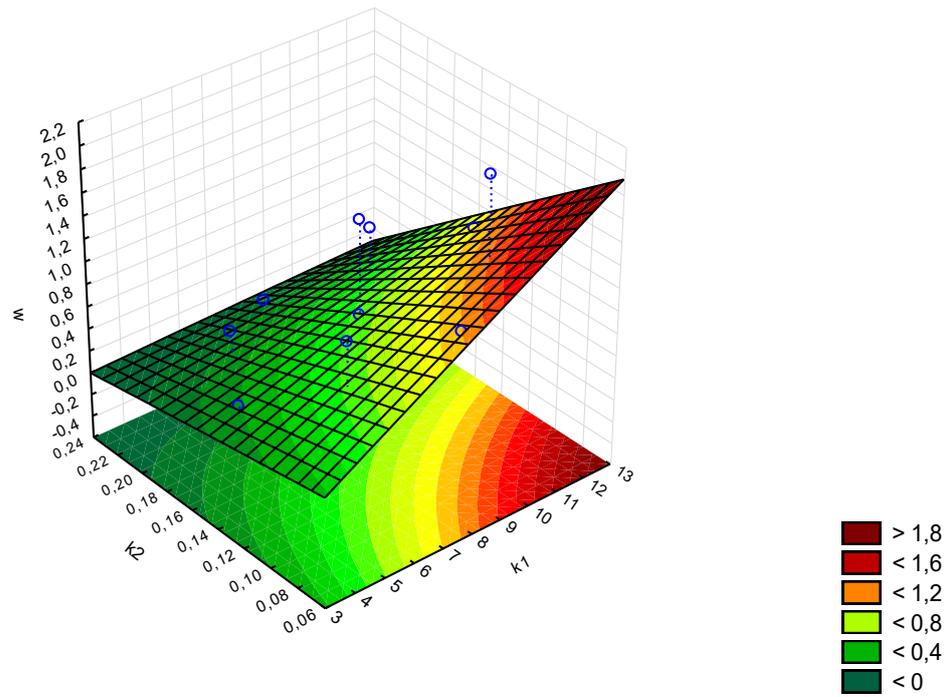


Figura A1.4. Superfície resposta variando k_2 e k_1 ($m = 0,7392$).

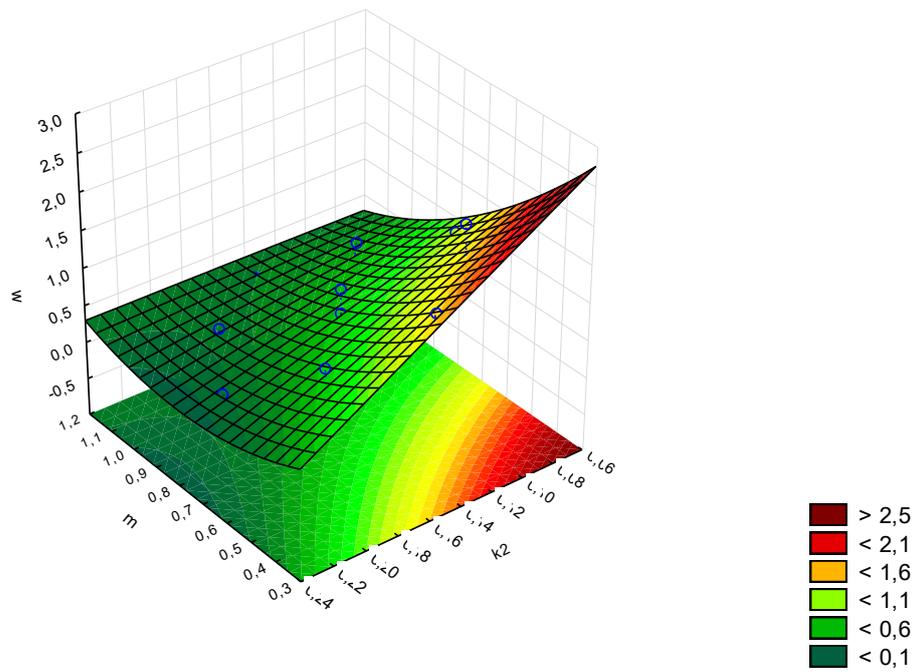


Figura A1.5. Superfície resposta variando m e k_2 ($k_1 = 8,1802$).

Aplicação do modelo em outros sistemas

No modelo de Zhu et. al (2008), os parâmetros ($k_1 = 8,1802$; $k_2 = 0,1471$; $m = 0,7392$) foram determinados para um ejetor com geometria específica ($R_3/R_t = 9,41$, Figura A1.6) e cujo fluido primário era o gás refrigerante R141b. Como visto pela análise de sensibilidade e pelo planejamento de experimentos, seria importante estimar esses valores para outros sistemas visto que o modelo depende muito deles.

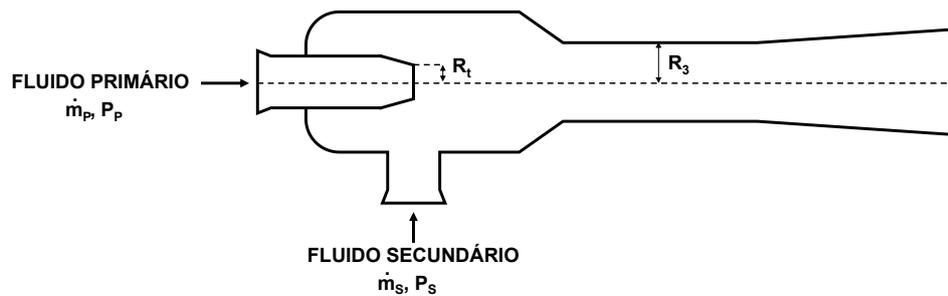


Figura A1.6. Representação de um ejetor.

Uma maneira simples de fazer uma estimativa inicial desses parâmetros para outras condições é por meio de um ajuste linear de dados experimentais, conforme descrito pela metodologia a seguir.

Uma variável C é definida como:

$$C = \left[1 - k_2 \alpha^{\frac{-\gamma-1}{4\gamma}} \left(\alpha^{\frac{1-\gamma}{\gamma}} - 1 \right)^{-\frac{1}{4}} \right] \quad (\text{A1.2})$$

O parâmetro k_2 também pode ser calculado por:

$$k_2 = b_2 \frac{R_t}{R_3} \quad (\text{A1.3})$$

Em que:

$$b_2 = \psi_{exp}^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\gamma-1}{2} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{\gamma+1}{2} \right)^{\frac{\gamma+1}{4(1-\gamma)}} \quad (\text{A1.4})$$

R_t e R_3 são os raios da garganta do bocal de entrada e da seção de área constante do ejetor, respectivamente;

ψ_{exp} é o coeficiente de perda por atrito no ejetor

Substituindo a Equação A1.1 na Equação 7 e isolando ω/C :

$$\frac{\omega}{C} = k_1 \alpha^m \quad (\text{A1.5})$$

Aplicando o logaritmo em ambos os lados da equação, obtemos a seguinte expressão:

$$\ln\left(\frac{\omega}{C}\right) = \ln(k_1) + m \cdot \ln(\alpha) \quad (\text{A1.6})$$

A Equação A1.5 apresenta o mesmo formato que a equação de uma reta ($y = Ax + B$). Logo, pela linearização de $\ln(\alpha)$ por $\ln(\omega/C)$, observa-se que $\ln(k_1)$ será igual ao termo independente da reta (B) e m , o termo angular (A). Por meio de dados experimentais de ω e α , é possível, portanto, estimar de modo simples os valores de k_1 e m para outros sistemas.

Diante disto, foram coletados dados de ω e α da literatura de experimentos cujo fluido primário era o vapor de água e o gás refrigerante R113 (1,1,2-tricloro-1,2,2-trifluoroetano) para ejtores com diferentes razões R_3/R_t . Na análise, considerou-se constante o coeficiente de perda por atrito ($\psi_{\text{exp}} = 0,8075$) e os coeficientes de expansão adiabática dos fluidos ($\gamma_{\text{água}} = 1,325$ e $\gamma_{\text{R113}} = 1,075$). Os valores de γ foram definidos conforme o banco de dados do simulador Aspen Plus®.

No geral, os dados experimentais se ajustaram bem à linearização, como pode ser observado pelos altos valores de R^2 - a exceção dos casos com $R_3/R_t = 3,38$ e $2,73$ para o R113 (Tabela A1.4). Os resultados obtidos de k_1 e m para os ejtores operando com vapor de água e com gás R113 foram muito diferentes do ejtor com R141b. Além disso, para um mesmo tipo de fluido primário, os parâmetros variaram bastante conforme a razão R_3/R_t do ejtor, o que destaca a grande influência que a geometria do equipamento exerce no processo. O tipo de fluido, por sua vez, também alterou de modo considerável k_1 e m , como pode ser observado para ejtores com R_3/R_t semelhantes.

Tabela A1.4. Dados experimentais e valores dos ajustes.

Composto	Ps/Pp	R ₃ /R _t	k ₂	k ₁	m	R ²	Referência
R141b ($\gamma = 1,135$)*	0,066-0,118	3,07	0,1428	8,4605	0,7702	-	Huang, 1999
Vapor de água ($\gamma = 1,325$)	0,006-0,024	9,49	0,0570	102,1048	0,8940	0,9617	Eames et al., 1995
	0,005-0,009	9,00	0,0600	65,2418	0,8849	0,9927	Sun, 1996
	0,005-0,020	8,90	0,0606	31,0438	0,7402	0,9348	Chen e Sun, 1997
	0,040-0,150	3,07	0,1758	3,4325	0,6731	0,8694	Chen e Sun, 1997
R113 ($\gamma = 1,075$)	0,070-0,165	5,83	0,0651	6,8861	1,6108	0,9461	Huang et al., 1985
	0,087-0,213	3,38	0,1123	11,4788	0,9977	0,6794	Chen et al., 1998
	0,087-0,213	2,73	0,1388	21,9617	1,4973	0,6763	Chen et al., 1998
	0,106-0,213	2,16	0,1755	18,7914	1,3602	0,8531	Chen et al., 1998

*os valores de k₂, k₁ e m foram determinados por Zhu et al. (2008).

As taxas de alimentação (ω) foram calculadas para cada sistema utilizando os novos parâmetros. Os valores teóricos ficaram próximos aos experimentais com a maioria dos erros inferiores a 15% em módulo, principalmente para o vapor de água (Fig. A1.7). Quando utilizamos os parâmetros do R141b para simular um caso com vapor de água, por exemplo, observamos que a modelagem com os novos parâmetros representou melhor os dados experimentais. Isso mostra que o modelo de fato é muito sensível a k₁ e m.

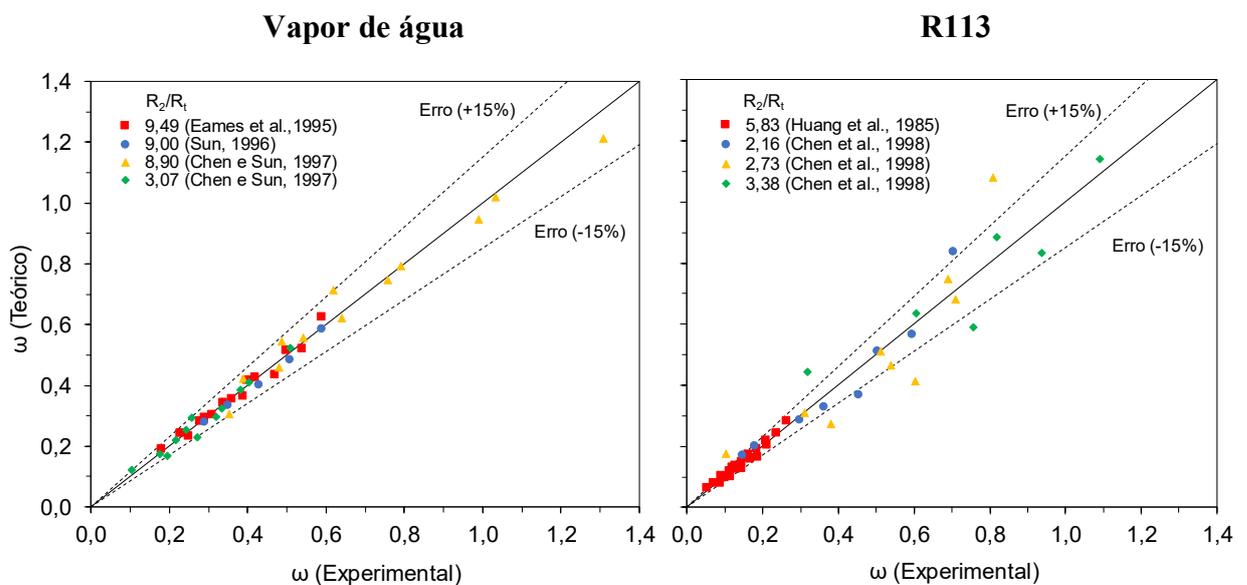


Figura A1.7. Taxa de alimentação (ω) teórica e experimental para o vapor de água e o gás R113.

Não conseguimos estimar k_1 , k_2 e m para um ejetor operando com etileno glicol, porque não há dados experimentais para este sistema disponíveis na literatura. Logo, utilizar parâmetros de outros sistemas poderia ser uma fonte de erros muito grande no projeto.

Conclusões:

- O valor da taxa de alimentação ω é muito sensível a k_1 , k_2 e m . Logo utilizar uma estimativa errada poderia resultar em muitos erros.
- Existe um método simples de estimar k_1 , k_2 e m a partir de dados experimentais. Esses parâmetros foram estimados para outros tipos de ejetores e fluidos, como o vapor de água e o R134. Os valores estimados variaram bastante dependendo do tipo de fluido, da geometria do ejetor e das condições de pressão e temperatura, o que reforça a limitação de k_1 , k_2 e m . Na literatura, não há dados experimentais disponíveis referentes a ejetores operando com etileno glicol, o que impossibilitou a estimativa desses parâmetros para este fluido.
- O modelo é válido para quando os fluidos primário e secundário são iguais, o que é comum em sistemas de refrigeração. No projeto, entretanto, os fluidos são diferentes.
- Apenas utilizando a Equação A1.1, não é possível estimar a pressão de saída do ejetor que é um parâmetro indispensável para a continuidade do projeto.

Assim, por causa de suas limitações, concluiu-se que o modelo de Zhu et al. (2008) não seria adequado para a simulação em estudo, o que nos levou ao modelo de Huang et al (1999), que é mais amplo.

Modelo 1-D de Huang e colaboradores (1999)

O modelo de Huang et al. (1999) é representado pelas equações abaixo (apresentadas no Capítulo 2 - Revisão Bibliográfica):

$$\dot{m}_p = A_t P_p \sqrt{\frac{\gamma_p}{T_p R_p} \left(\frac{2}{\gamma_p + 1} \right)^{\frac{\gamma_p + 1}{\gamma_p - 1}} n_p} \quad (\text{A1.7})$$

$$\frac{A_{p1}}{A_t} = \frac{1}{M_{p1}} \left[\frac{2}{\gamma_p + 1} \left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{p1}^2 \right) \right]^{\frac{(\gamma_p + 1)}{2(\gamma_p - 1)}} \quad (\text{A1.8})$$

$$\frac{P_p}{P_{p1}} = \left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{p1}^2\right)^{\frac{\gamma_p}{(\gamma_p - 1)}} \quad (\text{A1.9})$$

$$\frac{A_{py}}{A_{p1}} = \frac{\frac{\varphi_p}{M_{py}} \left[\frac{2}{\gamma_p + 1} \left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{py}^2\right) \right]^{\frac{(\gamma_p + 1)}{2(\gamma_p - 1)}}}{\frac{1}{M_{p1}} \left[\frac{2}{\gamma_p + 1} \left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{p1}^2\right) \right]^{\frac{(\gamma_p + 1)}{2(\gamma_p - 1)}}} \quad (\text{A1.10})$$

$$\frac{P_{py}}{P_{p1}} = \frac{\left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{p1}^2\right)^{\frac{\gamma_p}{(\gamma_p - 1)}}}{\left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{py}^2\right)^{\frac{\gamma_p}{(\gamma_p - 1)}}} \quad (\text{A1.11})$$

$$\dot{m}_s = A_{sy} P_s \sqrt{\frac{\gamma_s}{T_s R_s} \left(\frac{2}{\gamma_s + 1}\right)^{\frac{\gamma_s + 1}{\gamma_s - 1}}} n_s \quad (\text{A1.12})$$

$$\frac{P_s}{P_{sy}} = \left(1 + \frac{\gamma_s - 1}{2} M_{sy}^2\right)^{\frac{\gamma_s}{(\gamma_s - 1)}} \quad (\text{A1.13})$$

$$A_3 = A_{py} + A_{sy} \quad (\text{A1.14})$$

$$\frac{T_p}{T_{py}} = 1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{py}^2 \quad (\text{A1.15})$$

$$\frac{T_s}{T_{sy}} = 1 + \frac{\gamma_s - 1}{2} M_{sy}^2 \quad (\text{A1.16})$$

$$\varphi_m (\dot{m}_p V_{py} + \dot{m}_s V_{sy}) = (\dot{m}_p + \dot{m}_s) V_m \quad (\text{A1.17})$$

$$\dot{m}_p \left(C_{pp} T_{py} + \frac{V_{py}^2}{2} \right) + \dot{m}_s \left(C_{ps} T_{sy} + \frac{V_{sy}^2}{2} \right) = (\dot{m}_p + \dot{m}_s) \left(C_{pm} T_m + \frac{V_m^2}{2} \right) \quad (\text{A1.18})$$

$$V_{py} = M_{py} a_{py} \quad (\text{A1.19})$$

$$a_{py} = \sqrt{\gamma_p R_p T_{py}} \quad (\text{A1.20})$$

$$V_{sy} = M_{sy} a_{sy} \quad (\text{A1.21})$$

$$a_{sy} = \sqrt{\gamma_s R_s T_{sy}} \quad (\text{A1.22})$$

$$M_m = \frac{V_m}{a_m} \quad (\text{A1.23})$$

$$a_m = \sqrt{\gamma_m R_m T_m} \quad (\text{A1.24})$$

$$\frac{P_3}{P_m} = \frac{1 + \gamma_m M_m^2}{1 + \gamma_m M_3^2} \quad (\text{A1.25})$$

$$M_3^2 = \frac{M_m^2 + \frac{2}{\gamma_m - 1}}{\frac{2M_m^2 \gamma_m}{\gamma_m - 1} - 1} \quad (\text{A1.26})$$

$$\frac{P_c}{P_3} = \left(1 + \frac{\gamma_m - 1}{2} M_3^2\right)^{\frac{\gamma_m}{\gamma_m - 1}} \quad (\text{A1.27})$$

Em que:

A	Área (m ²)
a	Velocidade do som (m/s)
C _p	Capacidade térmica a pressão constante (J kg ⁻¹ K ⁻¹)
C _v	Capacidade térmica a volume constante (J kg ⁻¹ K ⁻¹)
D	Diâmetro (m)
M	Número de Mach
m	vazão mássica (kg/s)
MM	Massa molar (kg kmol ⁻¹)
n	Eficiência isentrópica
P	Pressão (Pa)
R	Constante universal dos gases específica (J kg ⁻¹ K ⁻¹)
R _g	Constante universal dos gases (J kmol ⁻¹ K ⁻¹)
T	Temperatura (K)
V	Velocidade do gás (m/s)
γ	Coefficiente de expansão adiabática (=C _p /C _v)
φ	Coefficiente de perda
1	Saída do bocal
2	Início da seção de área constante no ejetor
3	Saída da seção de área constante
c	Saída do ejetor
m	Fluido após mistura
p	Fluido primário
py	Fluido primário na seção y
s	Fluido secundário
sy	Fluido secundário na seção y
t	Garganta do bocal
y	Localização do início da mistura dos fluidos

No artigo original, não há distinção entre γ, C_p e R dos fluidos primário e secundário, pois os mesmos são iguais, ou seja:

$$\begin{aligned} \gamma_p &= \gamma_s = \gamma_m = \gamma \\ C_{pp} &= C_{ps} = C_{pm} = C_p \\ R_p &= R_s = R_m = R \end{aligned}$$

Todavia, aqui, optamos por escrever esses parâmetros como variáveis diferentes, uma vez que os fluidos não são os mesmos. Com base nas equações originais do modelo e considerando a diferença das propriedades dos fluidos, algumas manipulações matemáticas foram realizadas com o propósito de facilitar o cálculo da taxa de alimentação (ω) e da pressão de saída (P_c) do ejetor.

Manipulações referentes ao cálculo de ω

A taxa de alimentação no ejetor é calculada por:

$$\omega = \frac{\dot{m}_s}{\dot{m}_p} \quad (\text{A1.28})$$

Substituindo (A1.7) e (A1.12) em (A1.28):

$$\omega = \frac{A_{sy} P_s}{A_t P_p} \sqrt{\frac{T_p R_p \gamma_s n_s \left(\frac{2}{\gamma_s + 1}\right)^{\frac{\gamma_s + 1}{\gamma_s - 1}}}{T_s R_s \gamma_p n_p \left(\frac{2}{\gamma_p + 1}\right)^{\frac{\gamma_p + 1}{\gamma_p - 1}}}} \quad (\text{A1.29})$$

A constante universal dos gases em termos específicos pode ser calculada por:

$$R_p = \frac{R_g}{MM_p} \quad (\text{A1.30})$$

$$R_s = \frac{R_g}{MM_s} \quad (\text{A1.31})$$

A razão P_s/P_p , por sua vez, é chamada de α :

$$\alpha = \frac{P_s}{P_p} \quad (\text{A1.32})$$

Substituindo (A1.30-32) em (A1.29):

$$\omega = \frac{A_{sy}}{A_t} \alpha \sqrt{\frac{T_p MM_s \gamma_s n_s \left(\frac{2}{\gamma_s + 1}\right)^{\frac{\gamma_s + 1}{\gamma_s - 1}}}{T_s MM_p \gamma_p n_p \left(\frac{2}{\gamma_p + 1}\right)^{\frac{\gamma_p + 1}{\gamma_p - 1}}}} \quad (\text{A1.33})$$

Na seção y:

$$P_{py} = P_{sy} \quad (\text{A1.34})$$

Substituindo (A1.9) e (A1.13) em (A1.34):

$$\frac{P_p}{\left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{py}^2\right)^{\frac{\gamma_p}{\gamma_p - 1}}} = \frac{P_s}{\left(1 + \frac{\gamma_s - 1}{2} M_{sy}^2\right)^{\frac{\gamma_s}{\gamma_s - 1}}} \quad (\text{A1.35})$$

Substituindo (A1.30) em (A1.35):

$$\frac{P_s}{P_p} = \alpha = \frac{\left(1 + \frac{\gamma_s - 1}{2} M_{sy}^2\right)^{\frac{\gamma_s}{\gamma_s - 1}}}{\left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{py}^2\right)^{\frac{\gamma_p}{\gamma_p - 1}}} \quad (\text{A1.36})$$

Resolvendo (A1.36) para M_{py} :

$$M_{py} = \left\{ \left(\frac{2}{\gamma_p - 1} \right) \left[\alpha^{\frac{-(\gamma_p - 1)}{\gamma_p}} \left(1 + \frac{\gamma_s - 1}{2} M_{sy}^2 \right)^{\frac{(\gamma_p - 1)\gamma_s}{(\gamma_s - 1)\gamma_p}} - 1 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A1.37})$$

Como $M_{sy} = 1$, então:

$$M_{py} = \left\{ \left(\frac{2}{\gamma_p - 1} \right) \left[\alpha^{\frac{1 - \gamma_p}{\gamma_p}} \left(\frac{1 + \gamma_s}{2} \right)^{\frac{(\gamma_p - 1)\gamma_s}{(\gamma_s - 1)\gamma_p}} - 1 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A1.38})$$

Substituindo (A1.8) em (A1.10):

$$\frac{A_{py}}{A_t} = \frac{\varphi_p}{M_{py}} \left[\frac{2}{\gamma_p + 1} \left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{py}^2 \right) \right]^{\frac{(\gamma_p + 1)}{2(\gamma_p - 1)}} \quad (\text{A1.39})$$

Substituindo (A1.38) em (A1.39):

$$\frac{A_{py}}{A_t} = \varphi_p \left(\frac{2}{\gamma_p + 1} \right)^{\frac{\gamma_p + 1}{2(\gamma_p - 1)}} \left(\frac{1 + \gamma_s}{2} \right)^{\frac{(\gamma_p + 1)\gamma_s}{2(\gamma_s - 1)\gamma_p}} \left(\frac{2}{\gamma_p - 1} \right)^{-\frac{1}{2}} \alpha^{\frac{-\gamma_p - 1}{2\gamma_p}} \left[\alpha^{\frac{1 - \gamma_p}{\gamma_p}} \left(\frac{1 + \gamma_s}{2} \right)^{\frac{(\gamma_p - 1)\gamma_s}{(\gamma_s - 1)\gamma_p}} - 1 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A1.40})$$

Com base em (A1.14), A_{sy} pode ser calculado por:

$$A_{sy} = A_3 - A_{py} \quad (\text{A1.41})$$

Substituindo (A1.40) em (A1.32):

$$\omega = \left(\frac{A_3}{A_t} - \frac{A_{py}}{A_t} \right) \alpha \sqrt{\frac{T_p MM_s \gamma_s n_s \left(\frac{2}{\gamma_s + 1} \right)^{\frac{\gamma_s + 1}{\gamma_s - 1}}}{T_s MM_p \gamma_p n_p \left(\frac{2}{\gamma_p + 1} \right)^{\frac{\gamma_p + 1}{\gamma_p - 1}}}} \quad (\text{A1.42})$$

Substituindo (A1.40) em (A1.42):

$$\omega = \sqrt{\frac{T_p MM_s \gamma_s n_s \left(\frac{2}{\gamma_s + 1} \right)^{\frac{\gamma_s + 1}{\gamma_s - 1}}}{T_s MM_p \gamma_p n_p \left(\frac{2}{\gamma_p + 1} \right)^{\frac{\gamma_p + 1}{\gamma_p - 1}}}} \alpha \left\{ \frac{A_3}{A_t} - \varphi_p \left(\frac{2}{\gamma_p + 1} \right)^{\frac{(\gamma_p + 1)}{2(\gamma_p - 1)}} \left(\frac{1 + \gamma_s}{2} \right)^{\frac{(\gamma_p + 1)\gamma_s}{2(\gamma_s - 1)\gamma_p}} \left(\frac{2}{\gamma_p - 1} \right)^{-\frac{1}{2}} \alpha^{\frac{-\gamma_p - 1}{2\gamma_p}} \left[\left(\frac{1 + \gamma_s}{2} \right)^{\frac{(\gamma_p - 1)\gamma_s}{(\gamma_s - 1)\gamma_p}} \alpha^{\frac{1 - \gamma_p}{\gamma_p}} - 1 \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (\text{A1.43})$$

Algumas funções de γ_i podem ser definidas:

$$k_1 = \left(\frac{2}{\gamma_p + 1} \right)^{\frac{(\gamma_p + 1)}{2(\gamma_p - 1)}} \left(\frac{1 + \gamma_s}{2} \right)^{\frac{(\gamma_p + 1)\gamma_s}{2(\gamma_s - 1)\gamma_p}} \left(\frac{2}{\gamma_p - 1} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{A1.44})$$

$$k_2 = \left(\frac{1 + \gamma_s}{2} \right)^{\frac{(\gamma_p - 1)\gamma_s}{(\gamma_s - 1)\gamma_p}} \quad (\text{A1.45})$$

$$k_3 = \left(\frac{2}{\gamma_s + 1} \right)^{\frac{(\gamma_s+1)}{2(\gamma_s-1)}} \left(\frac{2}{\gamma_p + 1} \right)^{-\frac{(\gamma_p+1)}{2(\gamma_p-1)}} \quad (\text{A1.46})$$

Substituindo (A1.44-46) em (A1.43)

$$\omega = \alpha \sqrt{\frac{MM_s T_p n_s}{MM_p T_s n_p}} k_3 \left\{ \frac{A_3}{A_t} - \varphi_p k_1 \alpha^{\frac{-\gamma_p-1}{2\gamma_p}} \left[k_2 \alpha^{\frac{1-\gamma_p}{\gamma_p}} - 1 \right]^{-\frac{1}{2}} \right\} \quad (\text{A1.47})$$

Logo, pelas Equações A1.44-47 é possível calcular ω para um ejedor operando com fluidos diferentes dado as áreas, as condições dos fluidos e as eficiências.

Isolando A_t e A_3 nas Equações (A1.7) e (A1.47) respectivamente:

$$A_t = \frac{\dot{m}_p}{P_p \sqrt{\frac{\gamma_p}{T_p R_p} \left(\frac{2}{\gamma_p + 1} \right)^{\frac{\gamma_p+1}{\gamma_p-1}} n_p}} \quad (\text{A1.48})$$

$$A_3 = A_t \left(\frac{\omega}{\alpha \sqrt{\frac{MM_s T_p n_s}{MM_p T_s n_p}} k_3} + \varphi_p k_1 \alpha^{\frac{-\gamma_p-1}{2\gamma_p}} \left[k_2 \alpha^{\frac{1-\gamma_p}{\gamma_p}} - 1 \right]^{-\frac{1}{2}} \right) \quad (\text{A1.49})$$

Uma vez que A_t e A_3 são áreas circulares:

$$D_t = 2 \sqrt{\frac{A_t}{\pi}} \quad (\text{A1.50})$$

$$D_3 = 2 \sqrt{\frac{A_3}{\pi}} \quad (\text{A1.51})$$

Portanto, utilizando as equações A1.48-51 podemos determinar também algumas dimensões básicas do ejedor quando ω é um parâmetro de entrada.

Manipulações referentes ao cálculo de Pc

Isolando T_{py} em (A1.15):

$$T_{py} = \frac{T_p}{1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_{py}^2} \quad (\text{A1.52})$$

Isolando T_{sy} em (A1.16) e substituindo $M_{sy} = 1$:

$$T_{sy} = \frac{2T_s}{1 + \gamma_s} \quad (\text{A1.53})$$

Substituindo (A1.20) em (A1.19):

$$V_{py} = M_{py} \sqrt{\gamma_p R_p T_{py}} \quad (\text{A1.54})$$

Substituindo (A1.22) e $M_{sy} = 1$ em (A1.21):

$$V_{sy} = M_{sy} \sqrt{\gamma_s R_s T_{sy}} \quad (\text{A1.55})$$

Isolando V_m em (A1.17):

$$V_m = \frac{\varphi_m (V_{py} + \omega V_{sy})}{(1 + \omega)} \quad (\text{A1.56})$$

As propriedades C_{pm} e γ_m podem ser estimadas conforme as seguintes aproximações:

$$C_{pm} = \frac{C_{pp} + \omega C_{ps}}{(1 + \omega)} \quad (\text{A1.57})$$

$$\gamma_m = \frac{\gamma_p + \omega \gamma_s}{(1 + \omega)} \quad (\text{A1.58})$$

Substituindo (A1.28) em (A1.18) e isolando T_m :

$$T_m = \frac{\left(C_{pp} T_{py} + \frac{V_{py}^2}{2} \right) + \omega \left(C_{ps} T_{sy} + \frac{V_{sy}^2}{2} \right)}{(1 + \omega) C_{pm}} - \frac{V_m^2}{2 C_{pm}} \quad (\text{A1.59})$$

Substituindo (A1.24) em (A1.23):

$$M_m = \frac{V_m}{\sqrt{\gamma_m R_m T_m}} \quad (\text{A1.60})$$

Em que R_m é calculado por:

$$R_m = \frac{R_g}{MM_m} \quad (\text{A1.61})$$

A pressão dos fluidos na seção m é igual à da seção y, logo:

$$P_m = P_{py} = P_{sy} = \frac{P_s}{\left(\frac{1 + \gamma_s}{2}\right)^{\frac{\gamma_s}{\gamma_s - 1}}} \quad (\text{A1.62})$$

Isolando P_3 , M_3 e P_c de (A1.25), (A1.26) e (A1.27) respectivamente:

$$P_3 = P_m \left(\frac{1 + \gamma_m M_m^2}{1 + \gamma_m M_3^2} \right) \quad (\text{A1.63})$$

$$M_3 = \sqrt{\left(\frac{M_m^2 + \frac{2}{\gamma_m - 1}}{\frac{2M_m^2 \gamma_m}{\gamma_m - 1} - 1} \right)} \quad (\text{A1.64})$$

$$P_c = P_3 \left(1 + \frac{\gamma_m - 1}{2} M_3^2 \right)^{\frac{\gamma_m}{\gamma_m - 1}} \quad (\text{A1.65})$$

Assim, utilizando todas as equações apresentadas anteriormente, é possível calcular P_c . Podemos deduzir ainda uma equação direta para o fator de compressão juntando as equações (A1.62), (A1.63) e (A1.65):

$$\frac{P_c}{P_s} = \left(\frac{1 + \gamma_s}{2} \right)^{-\frac{\gamma_s}{\gamma_s - 1}} \left(\frac{1 + \gamma_m M_m^2}{1 + \gamma_m M_3^2} \right) \left(1 + \frac{\gamma_m - 1}{2} M_3^2 \right)^{\frac{\gamma_m}{\gamma_m - 1}} \quad (\text{A1.66})$$

O trabalho de Huang e Colaboradores (1999), não apresenta uma equação referente à temperatura do fluido nas seções 3 e na saída do ejetor. Apesar disso, com base nas relações isentrópicas de um escoamento, é possível calcular essas temperaturas utilizando as equações A1.67-68.

$$T_3 = T_m \left(\frac{P_3 M_3}{P_m M_m} \right)^2 \quad (\text{A1.67})$$

$$T_c = T_3 \left(1 + \frac{\gamma_p - 1}{2} M_3^2 \right) \quad (\text{A1.68})$$

O modelo 1-D modificado foi testado para diferentes fluidos primários e ejetores operando no modo crítico. Em cada caso, calculamos as eficiências isentrópicas (n_p e n_s) e os coeficientes de perda (φ_p e φ_s) por meio da minimização da raiz do erro quadrático médio (RMS, Equação A1.69) de ω e P_c . Para tanto, utilizamos o *solver* do Excel® e definimos um intervalo de variação das eficiências e dos coeficientes de 0.7 a 1.0.

$$RMS (\%) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n}} \quad (\text{A1.69})$$

Em que:

x_i = dado experimental.

\bar{x} = valor do modelo.

n = número de pontos.

No geral, os dados experimentais de ω e P_c ficaram próximos ao teórico (Figuras A1.8 e A1.9). Para estimar um valor inicial de n_p , n_s , φ_p e φ_s para o modelo, foi feita uma média dos dados testados que apresentaram um *RMS* inferior a 15% (Tabela A1.5).

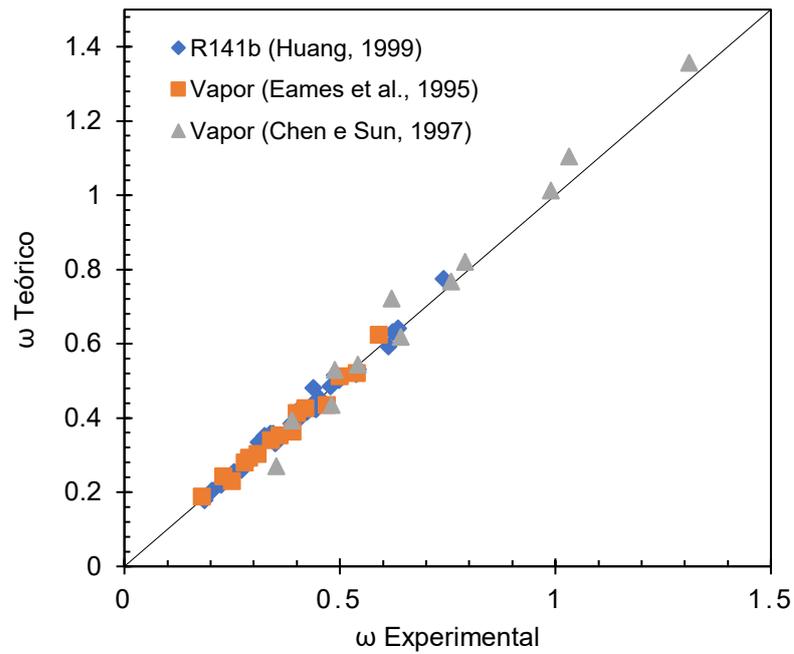


Figura A1.8. Comparação entre ω experimental e do modelo para diferentes sistemas.

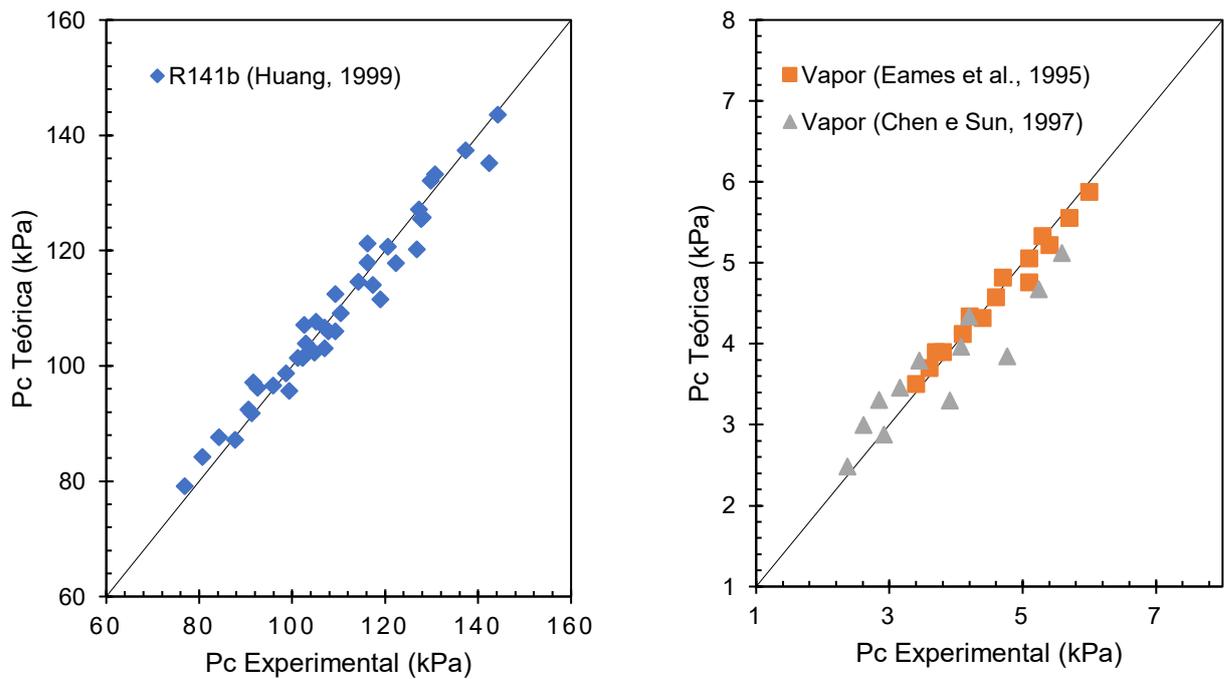


Figura A1.9. Comparação entre a pressão de saída do ejetor (P_c) experimental e do modelo para diferentes sistemas.

Tabela A1.5. Valores das eficiências (η) e coeficientes de perda (ϕ) otimizados para diferentes sistemas.

Fluido	A_3/A_t	η_p	η_s	ϕ_p	ϕ_m	RMS (%)	Referência
R141B	6,44	1,00	0,70	0,75	0,94	3,66	Huang, 1999
R141B	6,99	0,94	0,89	0,86	0,93	4,46	Huang, 1999
R141B	8,29	1,00	0,70	0,79	0,91	2,97	Huang, 1999
R141B	9,41	0,98	0,75	0,83	0,89	2,94	Huang, 1999
R141B	7,73	1,00	0,78	0,81	0,92	4,07	Huang, 1999
R141B	7,26	0,94	0,88	0,86	0,93	1,26	Huang, 1999
R141B	8,25	0,98	0,84	0,85	0,94	0,00	Huang, 1999
R141B	9,17	1,00	0,70	0,80	0,90	3,83	Huang, 1999
R141B	9,83	0,89	0,87	0,95	0,90	1,74	Huang, 1999
R141B	6,77	0,98	0,82	0,79	0,96	0,00	Huang, 1999
R141B	10,64	0,97	0,82	0,90	0,89	0,00	Huang, 1999
Vapor	90,00	0,70	1,00	0,90	0,92	0,92	Eames et al., 1995
Vapor	79,21	1,00	0,70	0,98	0,80	10,41	Chen e Sun, 1997
<i>Média</i>		0,95	0,80	0,85	0,91		

Assim, valores razoáveis das eficiências e dos coeficientes para a simulação são:

$$\eta_p = 0.95, \eta_s = 0.80, \phi_p = 0.85, \phi_m = 0.91.$$

O modelo também foi comparado ao método gráfico de DeFrate e Hoerl (1959), que é bastante utilizado para design de ejtores (Perry, Perry e Green, 2008; Turton *et al.*, 2008). Na comparação, entretanto, foi definido que as eficiências isentrópicas seriam iguais a 1, pois no método de DeFrate e Hoerl (1959) o processo é considerado reversível (a não ser em relação à mistura dos fluidos). Ainda, consideramos que os fluidos seriam iguais entre si (vapor, $\gamma = 1.4$) e que estariam na mesma condição térmica (300 K), que é outra restrição do método de DeFrate e Hoerl (1959).

Os valores de ω ficaram muito próximos para os dois métodos (Figura A1.10). Os valores de P_c , no geral, também ficaram similares, porém apresentaram um erro maior em geometrias de ejtores menores (Figura A1.11).

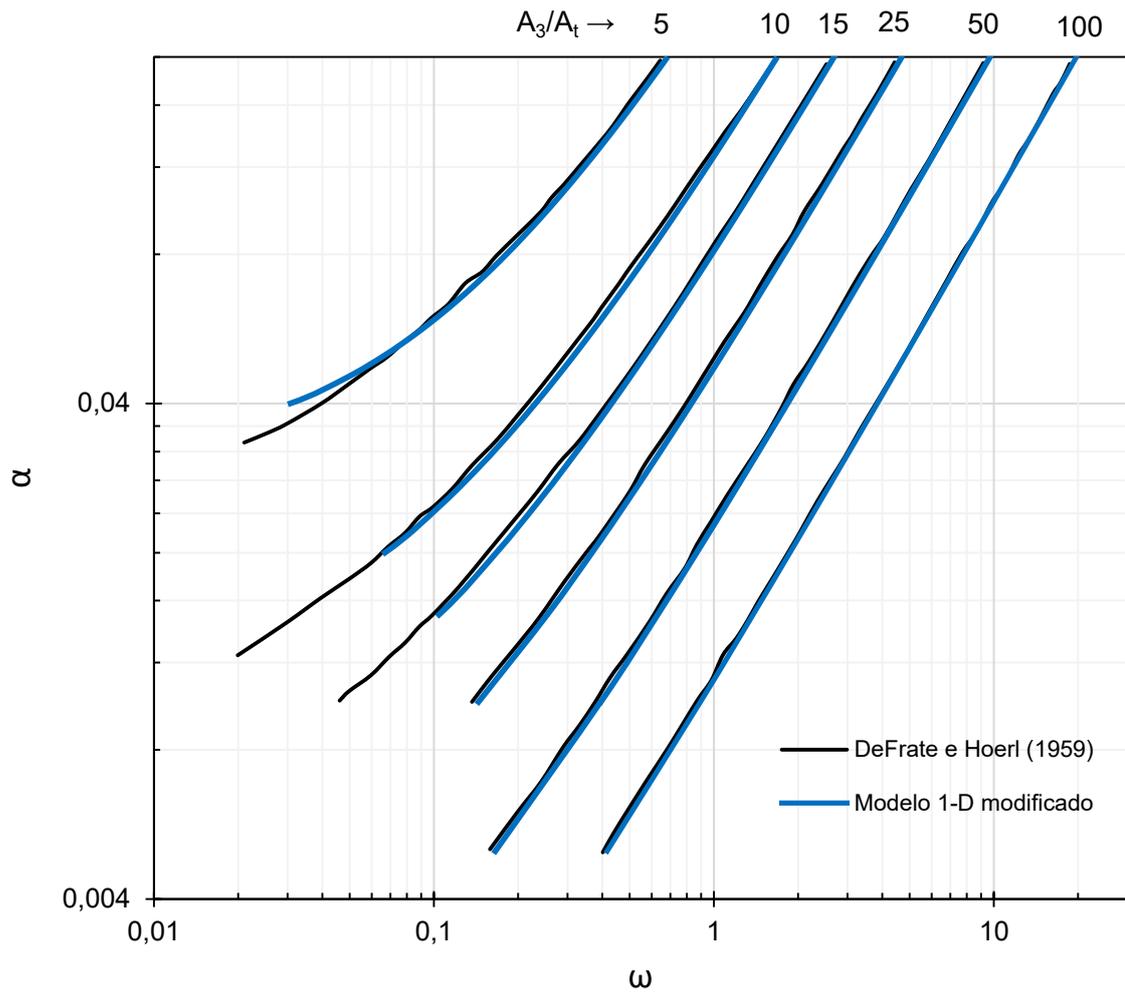


Figura A1.10. Valore de ω calculados pelo modelo de Huang e colaboradores (1999) modificado e por DeFrate e Hoerl (1959).

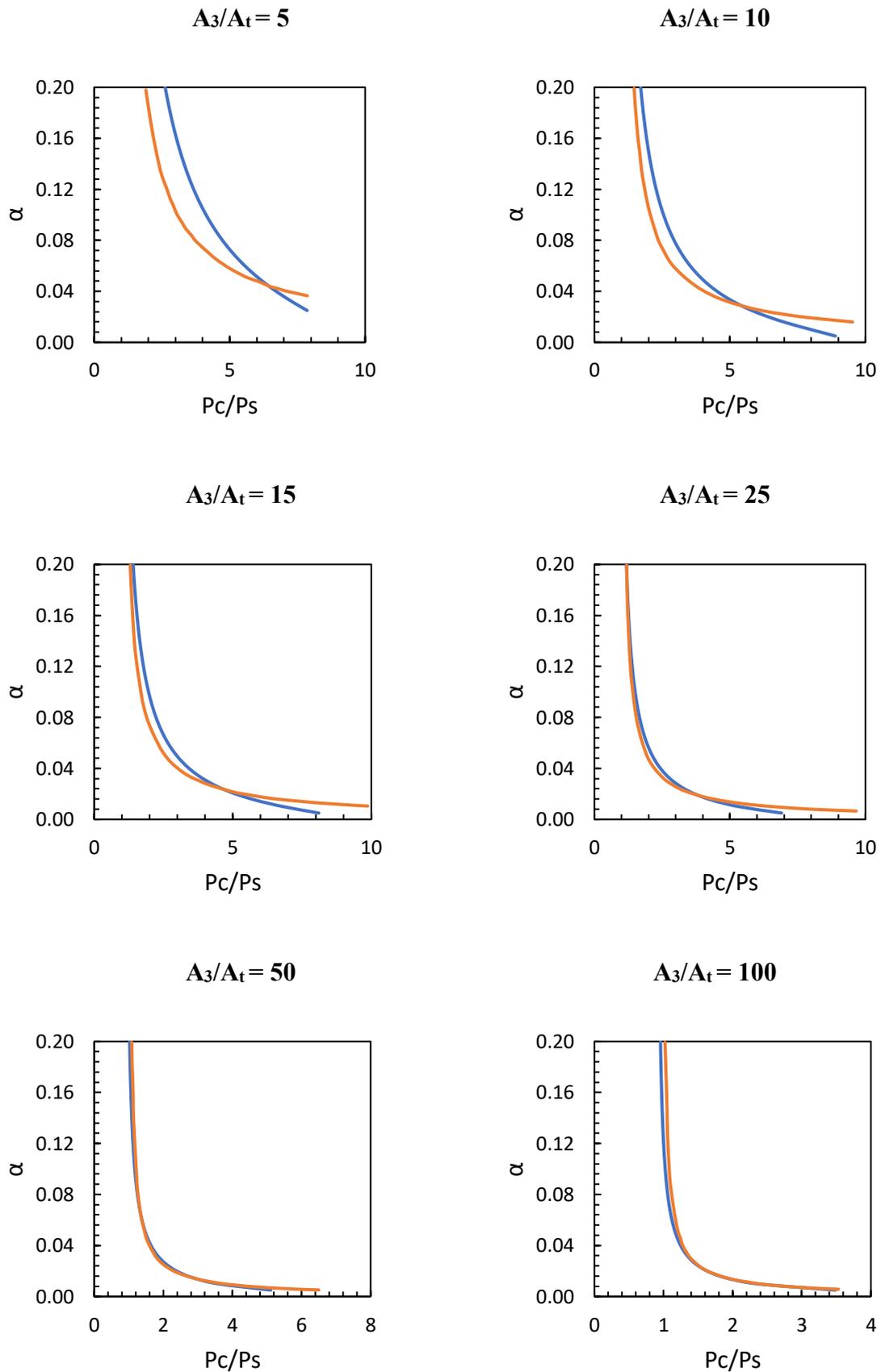


Figura A1.11. Valore de P_c calculados pelo modelo de Huang e colaboradores (1999) modificado, em azul, e por DeFrate e Hoerl (1959), em laranja.

Após essa análise, concluímos que para uma etapa inicial de projeto, o modelo avaliado consegue representar bem o funcionamento de ejetores em diferentes condições. Além disso, fornece todos os parâmetros de processo necessário para a simulação e para uma estimativa de custo de investimento do equipamento. Assim, optamos por escolher o modelo de Huang et al. (1999) modificado para o projeto.

Anexo 2**Variáveis definidas no *Calculator Block*.**

Variable	Information flow	Definition
YP	Import variable	Stream-Prop Stream=13 Prop-Set=PS-2
YS	Import variable	Stream-Prop Stream=7 Prop-Set=PS-2
MP	Import variable	Stream-Var Stream=13 Substream=MIXED Variable=MASS-FLOW Units=kg/sec
MS	Import variable	Stream-Var Stream=7 Substream=MIXED Variable=MASS-FLOW Units=kg/sec
PS	Import variable	Stream-Var Stream=7 Substream=MIXED Variable=PRES Units=Pa
PP	Import variable	Stream-Var Stream=13 Substream=MIXED Variable=PRES Units=Pa
TP	Import variable	Stream-Var Stream=13 Substream=MIXED Variable=TEMP Units=K
TS	Import variable	Stream-Var Stream=7 Substream=MIXED Variable=TEMP Units=K
MMP	Import variable	Stream-Prop Stream=13 Prop-Set=PS-3
MMS	Import variable	Stream-Prop Stream=7 Prop-Set=PS-3
MMM	Import variable	Stream-Prop Stream=14 Prop-Set=PS-3
CPP	Import variable	Stream-Prop Stream=13 Prop-Set=PS-5 Units=J/kg-K
CPS	Import variable	Stream-Prop Stream=7 Prop-Set=PS-5 Units=J/kg-K
NP	Import variable	Parameter Parameter no.=1 Initial value=0,95
NS	Import variable	Parameter Parameter no.=2 Initial value=0,8
OP	Import variable	Parameter Parameter no.=3 Initial value=0,85
OM	Import variable	Parameter Parameter no.=4 Initial value=0,9
W	Export variable	Parameter Parameter no.=5 Initial value=1
ALFA	Export variable	Parameter Parameter no.=6 Initial value=0,1
K1	Export variable	Parameter Parameter no.=7 Initial value=1
K2	Export variable	Parameter Parameter no.=8 Initial value=1
K3	Export variable	Parameter Parameter no.=9 Initial value=1
DT	Export variable	Parameter Parameter no.=10 Physical type=Length Units=meter Initial value=0,01
D3	Export variable	Parameter Parameter no.=11 Physical type=Length Units=meter Initial value=1
AT	Export variable	Parameter Parameter no.=12 Physical type=Area Units=sqm Initial value=0,01
A3	Export variable	Parameter Parameter no.=13 Physical type=Area Units=sqm Initial value=0,1
RAZAO	Export variable	Parameter Parameter no.=14 Initial value=10
MPY	Export variable	Parameter Parameter no.=15 Initial value=1
TPY	Export variable	Parameter Parameter no.=16 Physical type=Temperature Units=K Initial value=200
TSY	Export variable	Parameter Parameter no.=17 Physical type=Temperature Units=K Initial value=100
YM	Export variable	Parameter Parameter no.=18 Initial value=1,1 Parameter Parameter no.=19 Physical type=Mass-Heat-Ca Units=J/kg-K Initial value=1000
CPM	Export variable	Parameter Parameter no.=19 Physical type=Mass-Heat-Ca Units=J/kg-K Initial value=1000
MM	Export variable	Parameter Parameter no.=20 Initial value=1
TM	Export variable	Parameter Parameter no.=21 Physical type=Temperature Units=K Initial value=100
PM	Export variable	Parameter Parameter no.=22 Physical type=Pressure Units=Pa Initial value=1000
M3	Export variable	Parameter Parameter no.=23 Initial value=0,5
T3	Export variable	Parameter Parameter no.=24 Physical type=Temperature Units=K Initial value=100
P3	Export variable	Parameter Parameter no.=25 Physical type=Pressure Units=Pa Initial value=1000
PC	Export variable	Block-Var Block=EJ-301 Variable=PRES Sentence=PARAM Units=Pa
TC	Export variable	Stream-Var Stream=14 Substream=MIXED Variable=TEMP Units=K
COMP	Export variable	Parameter Parameter no.=26 Initial value=1

Anexo 3 Dados dos novos processos

Cenário 2

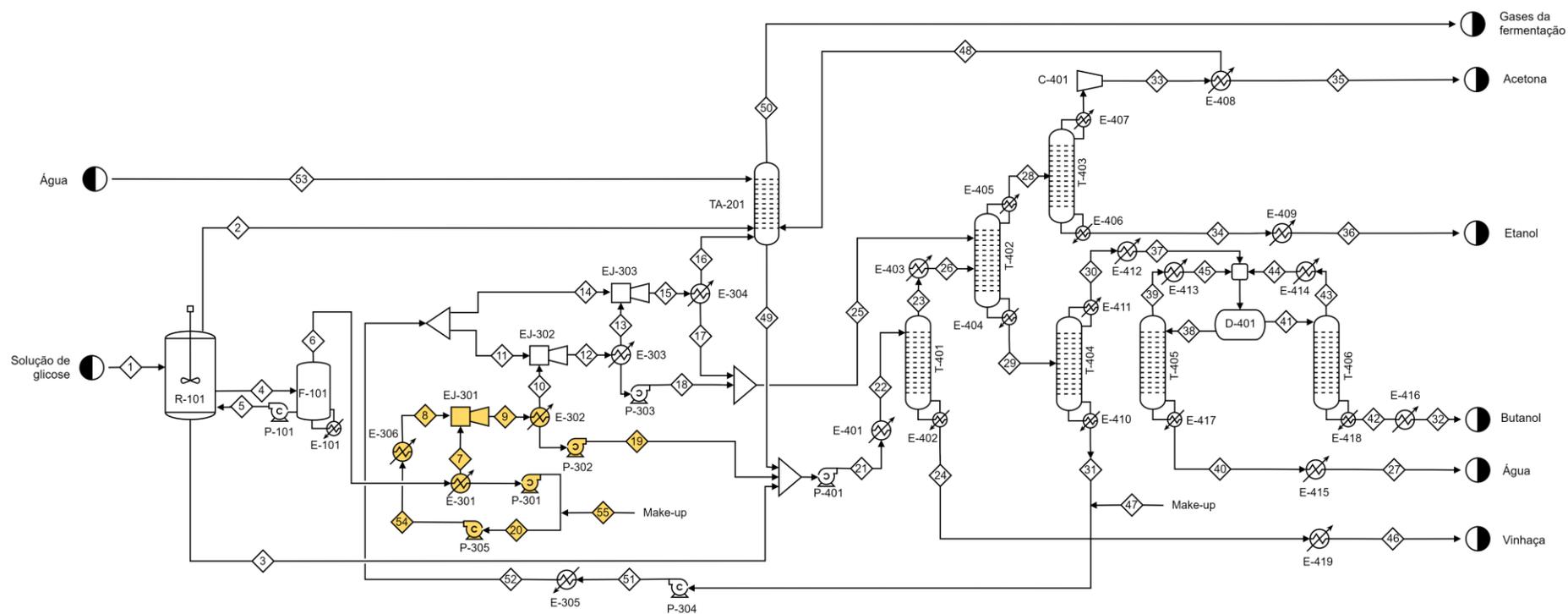


Figura A3. 1. Fluxograma do cenário 2.

Tabela A3.1. Correntes do processo para o cenário 2.

Número da corrente	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Temperatura (°C)	37.0	37.0	37.0	37.0	37.0	37.0	36.5	144.2	71.6	40.0	243.2	200.2	40.0	243.2	234.4
Pressão (atm)	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.064	0.064	4.000	0.124	0.124	3.400	0.360	0.360	3.400	1.001
Fração de Vapor	0	1	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Vazão Total (ton/h)	53.52	4.33	26.81	293.66	271.42	22.23	12.90	9.35	22.25	1.10	4.01	5.12	0.26	4.01	4.27
Vazão Componente (kg/h)															
Glicose	7500	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Água	46000	187	26144	286400	266626	19774	10600	9194	19793	332	0	332	4	0	4
Dióxido de carbono	0	3951	17	186	0	186	186	0	186	186	0	186	183	0	183
Gás hidrogênio	0	131	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Acetona	0	29	74	807	159	648	638	10	648	284	0	284	70	0	70
Butanol	0	30	185	2024	739	1285	1239	46	1285	273	0	273	1	0	1
Etanol	0	3	41	447	240	207	193	14	207	29	0	29	1	0	1
Ácido Butírico	0	1	158	1732	1658	73	29	44	73	1	10	10	0	10	10
Ácido Acético	0	1	188	2063	2001	62	20	42	62	0	4	4	0	4	4
Amônia	20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bactérias	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno glicol	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4000	4000	0	4000	4000

Número da corrente	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
Temperatura (°C)	40.0	40.0	40.1	40.0	36.6	37.9	71.0	103.3	111.8	40.0	70.0	40.0	61.6	114.3	96.5
Pressão (atm)	1.001	1.001	1.000	1.000	1.000	1.500	1.500	1.500	1.500	1.000	1.500	1.000	1.000	1.000	1.000
Fração de Vapor	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	1
Vazão Total (ton/h)	0.19	4.09	4.86	21.15	9.33	56.08	56.08	3.50	52.58	8.94	3.50	1.86	1.06	11.39	3.37
Vazão Componente (kg/h)															
Glicose	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Água	0	4	328	19461	9174	53645	53645	1540	52105	332	1540	1852	17	1855	1855
Dióxido de carbono	178	5	2	0	0	23	23	23	0	8	23	0	30	0	0
Gás hidrogênio	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Acetona	10	60	214	364	10	486	486	486	0	273	486	0	759	0	0
Butanol	0	1	272	1012	46	1227	1227	1227	0	273	1227	0	0	1500	1500
Etanol	0	1	28	178	14	222	222	221	1	29	221	0	250	1	1
Ácido Butírico	0	10	10	73	44	231	231	5	226	20	5	1	0	25	5
Ácido Acético	0	4	4	61	42	250	250	4	246	8	4	2	0	11	4
Amônia	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bactérias	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno glicol	0	4000	4000	0	0	0	0	0	0	8000	0	4	0	8000	5

Continuação Tabela A3.1. Correntes do processo para o cenário 2.

Número da corrente	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45
Temperatura (°C)	197.0	40.0	62.1	69.4	25.0	40.0	91.6	86.4	97.3	100.0	86.4	116.8	91.8	70.0	70.0
Pressão (atm)	1.000	1.000	1.000	0.700	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Fração de Vapor	0	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0
Vazão Total (ton/h)	8.02	1.51	0.79	0.27	0.75	0.27	3.37	2.84	0.98	1.86	2.66	1.51	1.15	1.15	0.98
Vazão Componente (kg/h)															
Glicose	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Água	0	3	0	17	0	17	1855	2547	694	1852	471	3	468	468	694
Dióxido de carbono	0	0	30	0	7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Gás hidrogênio	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Acetona	0	0	759	0	745	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Butanol	0	1500	0	0	0	0	1500	236	236	0	2104	1500	604	604	236
Etanol	0	1	1	249	0	249	1	49	49	0	76	1	75	75	49
Ácido Butírico	20	4	0	0	0	0	5	1	0	1	5	4	0	0	0
Ácido Acético	7	2	0	0	0	0	4	2	0	2	2	2	0	0	0
Amônia	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bactérias	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno glicol	7995	1	0	0	0	0	5	4	0	4	1	1	0	0	0

Número da corrente	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55
Temperatura (°C)	40.0	197.0	25.0	35.5	25.8	197.2	243.2	25.0	36.7	30.0
Pressão (atm)	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	3.400	3.400	1.000	4.000	1.000
Fração de Vapor	0	0	1	0	1	0	1	0	0	0
Vazão Total (ton/h)	52.58	0.01	0.04	8.13	4.38	8.03	8.03	7.95	9.35	0.02
Vazão Componente (kg/h)										
Glicose	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Água	52105	0	0	8040	99	0	0	7952	9194	20
Dióxido de carbono	0	0	23	5	4147	0	0	0	0	0
Gás hidrogênio	0	0	0	0	132	0	0	0	0	0
Acetona	0	0	14	48	5	0	0	0	10	0
Butanol	0	0	0	30	0	0	0	0	46	0
Etanol	1	0	0	3	0	0	0	0	14	0
Ácido Butírico	226	0	0	1	0	20	20	0	44	0
Ácido Acético	246	0	0	1	0	7	7	0	42	0
Amônia	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bactérias	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno glicol	0	5	0	0	0	8000	8000	0	0	0

Tabela A3.2. Especificações dos equipamentos para o cenário 2.

Torres	T-401	T-402	T-403	T-404	T-405	T-406	TA-201
Número de estágios	45	30	30	30	10	10	10
Tipo de prato	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve
Estágio alimentação	1	8 e 15	20	15	1	1	1 e 10
Pressão (atm)	1.5	1	0.7	1	1	1	1
Altura (m)	32.2	20.5	20.5	20.5	6.6	6.6	7.3
Diâmetro (m)	1.15	0.77	0.92	1.00	0.42	0.52	0.80
Razão de refluxo	-	4	8	0.1	-	-	-
Vazão de destilado (kg/h)	3504.9	1055.9	790.1	3370.1	980.0	1147.0	-
Temperatura do topo (°C)	103	62	45	97	97	92	-
Temperatura da base (°C)	112	114	69	197	100	117	-
Condensador	-	E-405	E-407	E-411	-	-	-
Tipo	-	Parcial	Parcial	Parcial	-	-	-
Energia (MW)	-	-0.83	-0.92	-0.20	-	-	-
LMTD (°C)	-	26.3	8.7	61.4	-	-	-
U (W/m ² °C)	-	1110	1960	380	-	-	-
Área de troca térmica (m ²)	-	29.0	54.0	9.1	-	-	-
Utilidade	-	Água 30°C	Água 30°C	Água 30°C	-	-	-
Vazão de utilidade (ton/h)	-	71.8	79.2	17.4	-	-	-
Refervedor	E-402	E-404	E-406	E-410	E-417	E-418	-
Tipo	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	-
Energia (MW)	3.88	1.54	0.84	2.17	0.52	0.45	-
LMTD (°C)	47.7	45.2	90.1	253.5	59.5	42.7	-
U (W/m ² °C)	5770	2470	4960	4960	5800	2270	-
Área de troca térmica (m ²)	14.1	13.8	1.9	1.7	1.5	4.7	-
Utilidade	LP	LP	LP	HP	LP	LP	-
Vazão de utilidade (ton/h)	6.7	2.7	1.5	4.6	0.9	0.8	-

Continuação Tabela A3.2. Especificações dos equipamentos para o cenário 2.

Trocador de calor	E-101	E-301	E-302	E-303	E-304	E-305	E-306	E-401	E-403
Temperatura saída (°C)	37	37	40	40	40	243	144	71	70
Pressão saída (atm)	0.0639	0.0639	0.12	0.36	1.0	3.4	1.5	1.5	1.5
Energia (MW)	13.7	-6.2	-13.7	-1.9	-1.5	2.1	6.7	2.1	-1.4
LMTD (°C)	216.5	24.2	18.8	54.2	62.1	27.4	52.1	104.2	50.8
U (W/m ² °C)	190	190	190	190	190	4510	4770	2350	1660
Área de troca térmica (m ²)	333.2	1346.8	3838.9	180.7	129.7	16.9	26.8	8.5	16.5
Utilidade	LP	Água 10°C	Água 30°C	Água 30°C	Água 30°C	HP	LP	LP	Água 30°C
Vazão de utilidade (ton/h)	23.7	1065.2	1181.6	160.4	132.1	4.4	11.5	3.6	119.6
Trocador de calor	E-408	E-409	E-412	E-413	E-414	E-415	E-416	E-419	
Temperatura saída (°C)	25	40	92	70	70	40	40	40	
Pressão saída (atm)	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	
Energia (MW)	-0.12	-0.01	-1.42	-0.51	-0.44	-0.13	-0.10	-4.36	
LMTD (°C)	28.0	18.0	59.0	48.1	45.6	27.9	32.8	31.4	
U (W/m ² °C)	650	190	1100	2090	1980	2160	860	2130	
Área de troca térmica (m ²)	6.7	1.9	21.9	5.1	4.8	2.1	3.6	64.0	
Utilidade	Água 10°C	Água 30°C							
Vazão de utilidade (ton/h)	21.0	0.6	122.6	44.3	37.6	11.1	8.7	375.9	
Bomba/Compressor	P-101	P-301	P-302	P-303	P-304	P-305	P-401	C-101	
Energia (kW)	9.30	0.61	1.02	0.28	1.45	1.95	1.26	4.91	
Pressão de saída (atm)	1.0	1.0	1.0	1.0	3.4	4.0	1.5	1.0	
Tanques	R-101	F-101	D-401						
Temperatura (°C)	37	37	86.4						
Pressão (atm)	1	0.0639	1						
Fração de vapor	0.01	0.07	-						
Volume (m ³)	500	50	50						
Ejetores	EJ-301	EJ-302	EJ-303						
Fator de compressão (FC)	1.9	2.9	2.8						
Diâmetro garganta (cm)	7	4	4						
Diâmetro da seção reta (cm)	68*	17	8						

*Na prática, seriam necessários dois ejtores em paralelo por causa desse diâmetro grande.

Cenário 3

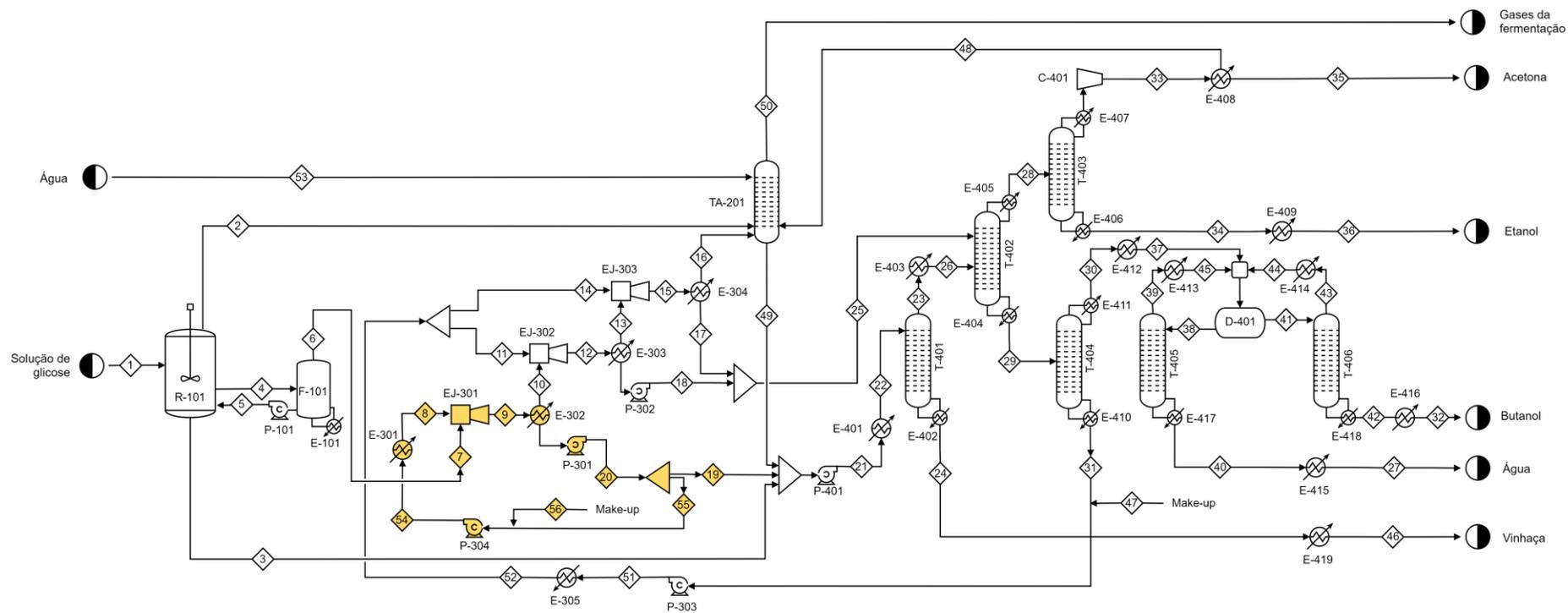


Figura A3. 2. Fluxograma do cenário 3.

Tabela A3.3. Correntes do processo para o cenário 3.

Número da corrente	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Temperatura (°C)	37.0	37.0	37.0	37.0	37.0	37.0	37.0	174.0	71.7	40.0	243.2	208.4	40.0	243.2	234.4
Pressão (atm)	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.064	0.064	8.721	0.118	0.118	3.400	0.372	0.372	3.400	1.016
Fração de Vapor	0	1	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Vazão Total (ton/h)	53.52	4.33	26.81	293.66	271.42	22.23	22.23	12.55	34.78	1.32	6.54	7.86	0.24	3.52	3.76
Vazão Componente (kg/h)															
Glicose	7500	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Água	46000	187	26144	286400	266626	19774	19774	11615	31389	431	0	431	3	0	3
Dióxido de carbono	0	3951	17	186	0	186	186	0	186	186	0	186	182	0	182
Gás hidrogênio	0	131	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Acetona	0	29	74	807	159	648	648	190	838	328	0	328	56	0	56
Butanol	0	30	185	2024	739	1285	1285	563	1848	341	0	341	1	0	1
Etanol	0	3	41	447	240	207	207	102	309	37	0	37	1	0	1
Ácido Butírico	0	1	158	1732	1658	73	73	43	116	1	23	24	0	12	12
Ácido Acético	0	1	188	2063	2001	62	62	36	98	0	12	13	0	7	7
Amônia	20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bactérias	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno glicol	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6500	6500	0	3500	3500
Número da corrente	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
Temperatura (°C)	40.0	40.0	40.0	40.0	40.0	37.9	70.0	103.4	111.8	40.0	70.0	40.0	61.6	117.8	96.5
Pressão (atm)	1.016	1.016	1.000	1.000	1.000	1.500	1.500	1.500	1.500	1.000	1.500	1.000	1.000	1.000	1.000
Fração de Vapor	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	1
Vazão Total (ton/h)	0.19	3.58	7.62	20.96	33.46	55.89	55.89	3.31	52.58	11.19	3.31	1.89	1.06	13.45	3.40
Vazão Componente (kg/h)															
Glicose	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Água	0	3	428	19393	30958	53577	53577	1468	52109	431	1468	1879	17	1882	1882
Dióxido de carbono	177	5	4	0	1	23	23	23	0	8	23	0	31	0	0
Gás hidrogênio	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Acetona	9	47	272	319	510	440	440	440	0	319	440	0	760	0	0
Butanol	0	1	340	944	1507	1159	1159	1159	0	341	1159	0	0	1500	1500
Etanol	0	1	36	170	272	215	215	214	1	37	214	0	250	1	1
Ácido Butírico	0	12	24	72	116	231	231	5	227	36	5	1	0	41	5
Ácido Acético	0	7	13	61	98	250	250	3	247	19	3	2	0	23	4
Amônia	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bactérias	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno glicol	0	3500	6500	0	0	0	0	0	0	10000	0	4	0	10000	5

Continuação Tabela A3.3. Correntes do processo para o cenário 3.

Número da corrente	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45
Temperatura (°C)	197.0	40.0	62.1	69.4	25.0	40.0	91.5	86.3	97.2	100.0	86.3	116.8	91.8	70.0	70.0
Pressão (atm)	1.000	1.000	1.000	0.700	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Fração de Vapor	0	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0
Vazão Total (ton/h)	10.02	1.51	0.79	0.27	0.75	0.27	3.40	2.87	0.98	1.89	2.66	1.51	1.15	1.15	0.98
Vazão Componente (kg/h)															
Glicose	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Água	0	3	0	16	0	16	1882	2571	691	1879	471	3	468	468	691
Dióxido de carbono	0	0	31	0	7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Gás hidrogênio	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Acetona	0	0	760	0	745	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Butanol	0	1500	0	0	0	0	1500	238	238	0	2103	1500	603	603	238
Etanol	0	1	0	249	0	249	1	50	50	0	76	1	75	75	50
Ácido Butírico	36	4	0	0	0	0	5	1	0	1	4	4	0	0	0
Ácido Acético	19	2	0	0	0	0	4	2	0	2	2	2	0	0	0
Amônia	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bactérias	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno glicol	9961	1	0	0	0	0	5	4	0	4	1	1	0	0	0

Número da corrente	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56
Temperatura (°C)	40.0	197.0	25.0	35.4	25.8	197.1	243.2	25.0	40.3	40.0	30
Pressão (atm)	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	3.400	3.400	1.000	9.000	1.000	1
Fração de Vapor	0	0	1	0	1	0	1	0	0	0	0
Vazão Total (ton/h)	52.58	0.04	0.04	8.13	4.38	10.05	10.05	7.95	12.55	12.50	0.05
Vazão Componente (kg/h)											
Glicose	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Água	52109	0	0	8040	99	0	0	7952	11615	11565	50
Dióxido de carbono	0	0	24	5	4147	0	0	0	0	0	0
Gás hidrogênio	0	0	0	0	132	0	0	0	0	0	0
Acetona	0	0	14	47	5	0	0	0	190	190	0
Butanol	0	0	0	30	0	0	0	0	563	563	0
Etanol	1	0	0	3	0	0	0	0	102	102	0
Ácido Butírico	227	0	0	1	0	36	36	0	43	43	0
Ácido Acético	247	0	0	1	0	19	19	0	36	36	0
Amônia	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bactérias	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno glicol	0	39	0	0	0	10000	10000	0	0	0	0

Tabela A3.4. Especificações dos equipamentos para o cenário 3.

Torres	T-401	T-402	T-403	T-404	T-405	T-406	TA-201
Número de estágios	45	30	30	30	10	10	10
Tipo de prato	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve
Estágio alimentação	1	8 e 15	20	15	1	1	1 e 10
Pressão (atm)	1.5	1	0.7	1	1	1	1
Altura (m)	32.2	20.5	20.5	20.5	6.6	6.6	7.3
Diâmetro (m)	1.15	0.81	0.92	1.03	0.42	0.52	0.80
Razão de refluxo	-	4	8	0.1	-	-	-
Vazão de destilado (kg/h)	3311.1	1056.8	791.3	3396.8	980.0	1147.0	-
Temperatura do topo (°C)	103	62	45	97	97	92	-
Temperatura da base (°C)	112	118	69	197	100	117	-
Condensador	-	E-405	E-407	E-411	-	-	-
Tipo	-	Parcial	Parcial	Parcial	-	-	-
Energia (MW)	-	-0.83	-0.92	-0.20	-	-	-
LMTD (°C)	-	26.3	8.6	61.4	-	-	-
U (W/m ² °C)	-	1110	1960	380	-	-	-
Área de troca térmica (m ²)	-	29.0	54.9	8.7	-	-	-
Utilidade	-	Água 30°C	Água 30°C	Água 30°C	-	-	-
Vazão de utilidade (ton/h)	-	71.8	79.3	17.6	-	-	-
Refrervedor	E-402	E-404	E-406	E-410	E-417	E-418	-
Tipo	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	-
Energia (MW)	3.88	1.69	0.85	2.29	0.52	0.45	-
LMTD (°C)	47.7	41.7	90.1	253.5	59.5	42.7	-
U (W/m ² °C)	5770	2470	4960	4960	5800	2270	-
Área de troca térmica (m ²)	14.1	16.4	1.9	1.8	1.5	4.7	-
Utilidade	LP	LP	LP	HP	LP	LP	-
Vazão de utilidade (ton/h)	6.7	2.9	1.5	4.8	0.9	0.8	-

Continuação Tabela A3.4. Especificações dos equipamentos para o cenário 3.

Trocador de calor	E-101	E-301	E-302	E-303	E-304	E-305	E-401	E-403
Temperatura saída (°C)	37	174	40	40	40	243	70	70
Pressão saída (atm)	0.0639	8.72115988	0.1178	0.37	1.02	1.5	1.5	1.5
Energia (MW)	13.7	8.7	-21.9	-2.9	-1.3	2.6	2.0	-1.3
LMTD (°C)	216.5	49.9	18.8	56.1	62.1	27.4	104.8	50.8
U (W/m ² °C)	190	4090	190	190	190	4510	2350	1660
Área de troca térmica (m ²)	333.2	42.5	6127.8	272.9	113.6	21.1	8.2	15.6
Utilidade	LP	MP	Água 30°C	Água 30°C	Água 30°C	HP	LP	Água 30°C
Vazão de utilidade (ton/h)	23.7	15.6	1888.4	251.0	115.7	5.5	3.5	113.6
Trocador de calor	E-408	E-409	E-412	E-413	E-414	E-415	E-416	E-419
Temperatura saída (°C)	25	40	92	70	70	40	40	40
Pressão saída (atm)	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
Energia (MW)	-0.12	-0.01	-1.44	-0.51	-0.44	-0.13	-0.10	-4.36
LMTD (°C)	22.5	18.0	59.0	48.1	45.6	27.9	32.8	31.4
U (W/m ² °C)	620	650	1100	2090	1980	2160	860	2130
Área de troca térmica (m ²)	8.8	0.5	22.2	5.1	4.8	2.2	3.6	65.2
Utilidade	Água 10°C	Água 30°C	Água 30°C	Água 30°C	Água 30°C	Água 30°C	Água 30°C	Água 30°C
Vazão de utilidade (ton/h)	5.3	0.6	124.1	44.2	37.6	11.2	8.7	376.0
Bomba/Compressor	P-101	P-302	P-303	P-304	P-305	P-401	C-101	
Energia (kW)	9.30	1.46	0.34	1.67	6.38	1.25	4.92	
Pressão de saída (atm)	1.0	1.0	1.0	3.4	9.0	1.5	1.0	
Tanques	R-101	F-101	D-401					
Temperatura (°C)	37	37	86.3					
Pressão (atm)	1	0.0639	1					
Fração de vapor	0.01	0.07	-					
Volume (m ³)	500	50	50					
Ejetores	EJ-301	EJ-302	EJ-303					
Fator de compressão (FC)	1.9	2.9	2.8					
Diâmetro garganta (cm)	7	4	4					
Diâmetro da seção reta (cm)	68	17	8					

Cenário 4

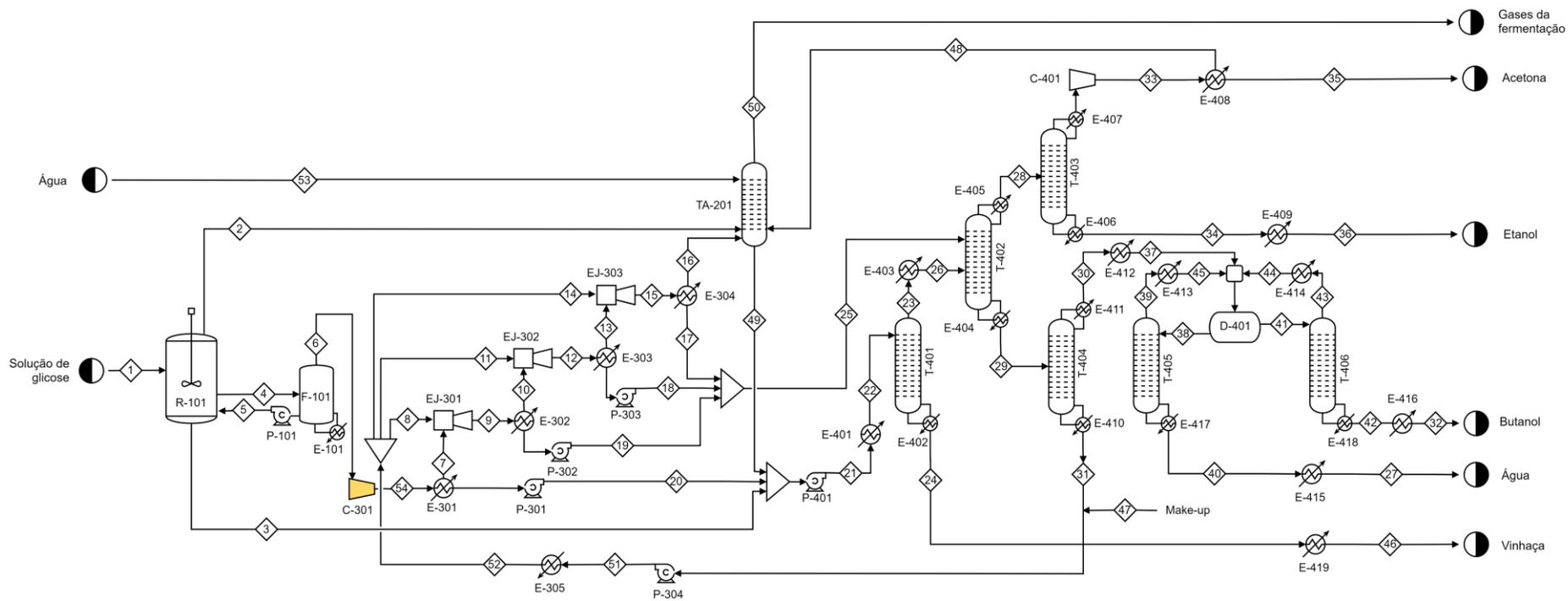


Figura A3. 3. Fluxograma do cenário 4.

Tabela A3.5. Correntes do processo para o cenário 4.

Número da corrente	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Temperatura (°C)	37.0	37.0	37.0	37.0	37.0	37.0	41.1	243.2	129.7	40.0	243.2	219.9	40.0	243.2	229.6
Pressão (atm)	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.064	0.100	3.400	0.172	0.172	3.400	0.534	0.534	3.400	1.220
Fração de Vapor	0	1	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Vazão Total (ton/h)	53.52	4.33	26.81	293.66	271.42	22.23	3.20	2.88	6.07	0.49	3.02	3.51	0.25	2.01	2.26
Vazão Componente (kg/h)															
Glicose	7500	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Água	46000	187	26144	286400	266626	19774	1570	0	1570	56	0	56	1	0	1
Dióxido de carbono	0	3951	17	186	0	186	186	0	186	185	0	185	183	0	183
Gás hidrogênio	0	131	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Acetona	0	29	74	807	159	648	527	0	527	214	0	214	64	0	64
Butanol	0	30	185	2024	739	1285	808	0	808	23	0	23	0	0	0
Etanol	0	3	41	447	240	207	99	0	99	12	0	12	1	0	1
Ácido Butírico	0	1	158	1732	1658	73	3	3	6	0	3	3	0	2	2
Ácido Acético	0	1	188	2063	2001	62	2	1	3	0	1	1	0	0	0
Amônia	20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bactérias	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno glicol	0	0	0	0	0	0	0	2874	2874	0	3019	3020	0	2007	2007

Número da corrente	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
Temperatura (°C)	40.0	40.0	40.0	40.1	41.2	38.2	70.0	105.4	111.8	42.6	90.0	40.0	62.0	110.0	97.5
Pressão (atm)	1.220	1.220	1.000	1.000	1.000	1.500	1.500	1.500	1.500	1.000	1.500	1.000	1.000	1.000	1.000
Fração de Vapor	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	1
Vazão Total (ton/h)	0.19	2.06	3.27	5.58	19.04	53.98	53.98	2.34	51.63	10.91	2.34	2.78	1.06	12.20	4.29
Vazão Componente (kg/h)															
Glicose	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Água	0	1	55	1514	18204	52387	52387	1226	51161	1570	1226	2772	22	2774	2774
Dióxido de carbono	180	3	2	1	0	22	22	22	0	6	22	0	29	0	0
Gás hidrogênio	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Acetona	14	50	150	313	121	245	245	245	0	512	245	0	758	0	0
Butanol	0	0	23	785	477	692	692	692	0	808	692	0	0	1500	1500
Etanol	0	1	12	87	108	152	152	151	1	99	151	0	250	1	1
Ácido Butírico	0	2	3	6	70	229	229	4	224	12	4	2	0	16	8
Ácido Acético	0	0	1	3	60	248	248	3	245	4	3	3	0	7	5
Amônia	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bactérias	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno glicol	0	2007	3019	2874	0	0	0	0	0	7900	0	4	0	7900	5

Continuação Tabela A3.5. Correntes do processo para o cenário 4.

Número da corrente	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45
Temperatura (°C)	197.1	40.0	62.6	69.4	25.0	40.0	91.1	87.3	96.0	100.0	87.3	116.8	91.8	70.0	70.0
Pressão (atm)	1.000	1.000	1.000	0.700	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Fração de Vapor	0	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0
Vazão Total (ton/h)	7.91	1.51	0.79	0.27	0.75	0.27	4.29	3.76	0.98	2.78	2.66	1.51	1.15	1.15	0.98
Vazão Componente (kg/h)															
Glicose	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Água	0	3	0	22	0	22	2774	3374	603	2772	472	3	469	469	603
Dióxido de carbono	0	0	29	0	7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Gás hidrogênio	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Acetona	0	0	758	0	745	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Butanol	0	1500	0	0	0	0	1500	314	314	0	2105	1500	605	605	314
Etanol	0	1	1	249	0	249	1	63	63	0	73	1	73	73	63
Ácido Butírico	8	6	0	0	0	0	8	2	0	2	6	6	0	0	0
Ácido Acético	2	2	0	0	0	0	5	3	0	3	2	2	0	0	0
Amônia	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bactérias	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno glicol	7895	1	0	0	0	0	5	4	0	4	1	1	0	0	0

Número da corrente	46	47	48	49	50	51	52	53	54
Temperatura (°C)	40.0	197.0	25.0	35.5	25.9	197.2	243.2	25.0	82.9
Pressão (atm)	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	3.400	3.400	1.000	0.100
Fração de Vapor	0	0	1	0	1	0	1	0	1
Vazão Total (ton/h)	51.63	0.01	0.03	8.13	4.38	7.91	7.91	7.95	22.23
Vazão Componente (kg/h)									
Glicose	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Água	51161	0	0	8039	99	0	0	7952	19774
Dióxido de carbono	0	0	22	5	4147	0	0	0	186
Gás hidrogênio	0	0	0	0	132	0	0	0	0
Acetona	0	0	13	50	5	0	0	0	648
Butanol	0	0	0	30	0	0	0	0	1285
Etanol	1	0	0	3	0	0	0	0	207
Ácido Butírico	224	0	0	1	0	8	8	0	73
Ácido Acético	245	0	0	1	0	2	2	0	62
Amônia	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Bactérias	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno glicol	0	5	0	0	0	7900	7900	0	0

Tabela A3.6. Especificações dos equipamentos para o cenário 4.

Torres	T-401	T-402	T-403	T-404	T-405	T-406	TA-201
Número de estágios	45	30	30	30	10	10	10
Tipo de prato	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve
Estágio alimentação	1	8 e 15	20	15	1	1	1 e 10
Pressão (atm)	1.5	1	0.7	1	1	1	1
Altura (m)	32.2	20.5	20.5	20.5	6.6	6.6	7.3
Diâmetro (m)	1.11	0.74	0.92	1.14	0.41	0.51	0.80
Razão de refluxo	-	3	8	0.1	-	-	-
Vazão de destilado (kg/h)	2344.1	1057.9	786.9	4292.8	980.0	1147.0	-
Temperatura do topo (°C)	105	62	45	98	96	92	-
Temperatura da base (°C)	112	110	69	197	100	117	-
Condensador	-	E-405	E-407	E-411	-	-	-
Tipo	-	Parcial	Parcial	Parcial	-	-	-
Energia (MW)	-	-0.64	-0.92	-0.26	-	-	-
LMTD (°C)	-	26.7	8.8	62.4	-	-	-
U (W/m ² °C)	-	1110	1940	380	-	-	-
Área de troca térmica (m ²)	-	21.7	53.5	11.0	-	-	-
Utilidade	-	Água 30°C	Água 30°C	Água 30°C	-	-	-
Vazão de utilidade (ton/h)	-	55.5	79.0	22.6	-	-	-
Refervedor	E-402	E-404	E-406	E-410	E-417	E-418	-
Tipo	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	-
Energia (MW)	3.54	1.37	0.84	2.83	0.49	0.45	-
LMTD (°C)	47.7	49.5	90.1	253.5	59.5	42.7	-
U (W/m ² °C)	5770	2470	4960	4960	5800	2270	-
Área de troca térmica (m ²)	12.9	11.2	1.9	2.3	1.4	4.8	-
Utilidade	LP	LP	LP	HP	LP	LP	-
Vazão de utilidade (ton/h)	6.1	2.4	1.4	6.0	0.8	0.8	-

Continuação Tabela A3.6. Especificações dos equipamentos para o cenário 4.

Trocador de calor	E-101	E-301	E-302	E-303	E-304	E-305	E-401	E-403
Temperatura saída (°C)	37	41	40	40	40	243	70	90
Pressão saída (atm)	0.0639	0.1000	0.1723	0.5338	1.2204	3.4	1.5	1
Energia (MW)	13.71	-12.80	-2.38	-1.22	-0.77	2.06062895	1.94	-0.94
LMTD (°C)	216.5	23.6	36.3	58.8	61.0	27.3	104.6	62.7
U (W/m ² °C)	190	190	190	190	190	4510	2350	1660
Área de troca térmica (m ²)	333.2	2861.2	345.0	108.9	66.4	16.7	7.9	9.0
Utilidade	LP	Água 30°C	Água 30°C	Água 30°C	Água 30°C	HP	LP	Água 30°C
Vazão de utilidade (ton/h)	23.7	1104.8	205.4	105.0	66.4	4.4	3.3	80.9
Trocador de calor	E-408	E-409	E-412	E-413	E-414	E-415	E-416	E-419
Temperatura saída (°C)	25	40	91	70	70	40	40	40
Pressão saída (atm)	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
Energia (MW)	-0.12	-0.01	-2.01	-0.47	-0.44	-0.19	-0.10	-4.28
LMTD (°C)	22.7	18.0	59.3	47.5	45.7	27.9	32.8	31.4
U (W/m ² °C)	620	1100	1100	1980	1980	2160	860	2130
Área de troca térmica (m ²)	8.7	0.6	31.0	5.0	4.8	3.2	3.6	64.0
Utilidade	Água 10°C	Água 30°C	Água 30°C	Água 30°C				
Vazão de utilidade (ton/h)	5.3	0.6	173.1	40.5	37.6	16.5	8.7	369.2
Bomba/Compressor	P-101	P-301	P-302	P-303	P-304	P-401	C-301	C-401
Energia (kW)	9.30	0.96	0.39	0.13	1.43	1.21	530.72	4.90
Pressão de saída (atm)	1.0	1.0	1.0	1.0	3.4	1.5	0.1	1.0
Tanques	R-101	F-101	D-401					
Temperatura (°C)	37	37	87.3					
Pressão (atm)	1	0.0639	1					
Fração de vapor	0.01	0.07	-					
Volume (m ³)	500	50	50					
Ejetores	EJ-301	EJ-302	EJ-303					
Fator de compressão (FC)	1.7	3.1	2.3					
Diâmetro garganta (cm)	4	4	3					
Diâmetro da seção reta (cm)	27	11	5					

Cenário 5

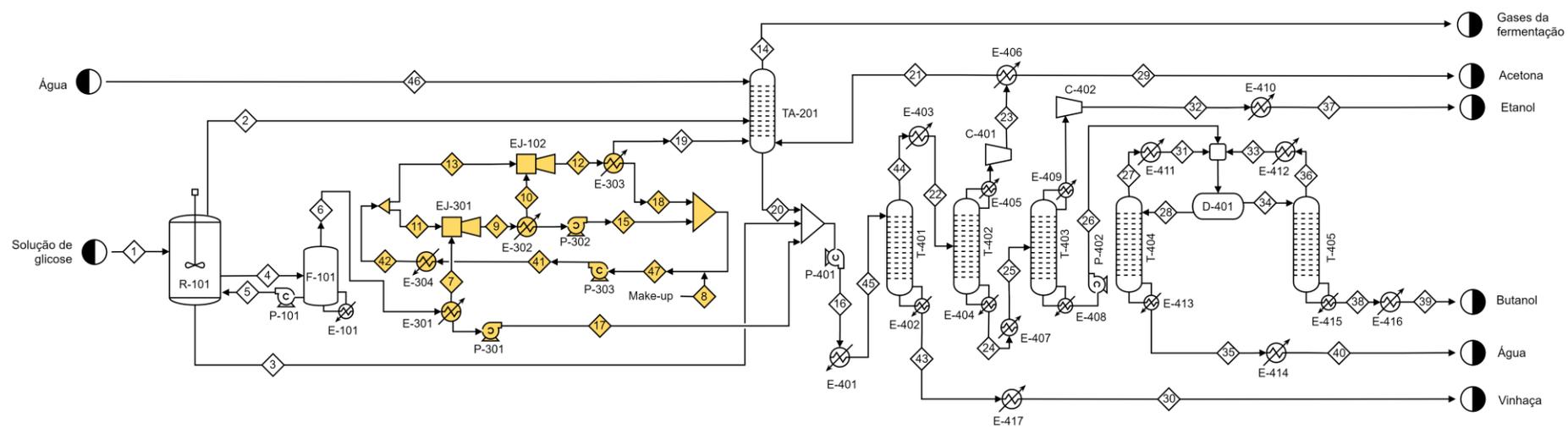


Figura A3. 4. Fluxograma do cenário 5.

Tabela A3.8. Especificações dos equipamentos para o cenário 5.

Torres	T-401	T-402	T-403	T-404	T-405	TA-201
Número de estágios	45	30	40	10	10	10
Tipo de prato	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve
Estágio alimentação	1	15	20	1	1	1 e 10
Pressão (atm)	1.5	0.7	0.3	1	1	1
Altura (m)	32.2	20.5	27.8	7.3	7.3	7.3
Diâmetro (m)	1.10	0.91	1.67	0.29	0.52	0.80
Razão de refluxo	-	8	40	-	-	-
Vazão de destilado (kg/h)	5220	765	262	350	1000	-
Temperatura do topo (°C)	105	45	50	92	94	-
Temperatura da base (°C)	112	81	63	100	118	-
Condensador	-	E-405	E-409	-	-	-
Tipo	-	Parcial	Parcial	-	-	-
Energia (MW)	-	-0.9	-2.8	-	-	-
LMTD (°C)	-	9.1	14.9	-	-	-
U (W/m ² °C)	-	1990	650	-	-	-
Área de troca térmica (m ²)	-	49.6	287.6	-	-	-
Utilidade	-	Água 30°C	Água 30°C	-	-	-
Vazão de utilidade (kg/h)	-	77.1	240.6	-	-	-
Refrervedor	E-402	E-404	E-408	E-413	E-415	-
Tipo	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	-
Energia (MW)	3.47	1.12	2.92	0.22	0.43	-
LMTD (°C)	47.7	78.4	96.9	59.5	41.6	-
U (W/m ² °C)	5770	4150	190	5620	3790	-
Área de troca térmica (m ²)	12.6	3.4	158.5	0.7	2.7	-
Utilidade	LP	LP	LP	LP	LP	-
Vazão de utilidade (ton/h)	6.0	1.9	5.0	0.4	0.7	-

Continuação Tabela A3.8. Especificações dos equipamentos para o cenário 5.

Trocador de calor	E-101	E-301	E-302	E-303	E-304	E-401	E-403	E-406
Temperatura saída (°C)	37	15	61	67	170	90	60	20
Pressão saída (atm)	0.064	0.06	0.28	1.02	8.00	1.50	1.50	1.00
Energia (MW)	13.71	-14.19	-0.34	-2.42	2.77	3.94	-2.32	-0.12
LMTD (°C)	216.5	11.5	51.5	63.1	47.9	97.0	45.4	19.2
U (W/m ² °C)	190	190	190	190	3990	2280	1610	690
Área de troca térmica (m ²)	333.2	6507.6	34.2	202.0	14.5	17.8	31.7	9.3
Utilidade	LP	Água 10°C	Água 30°C	Água 30°C	MP	LP	Água 30°C	Água 10°C
Vazão de utilidade (ton/h)	23.7	2441.3	28.9	209.1	5.0	6.8	199.9	21.1
Trocador de calor	E-407	E-410	E-411	E-412	E-414	E-416	E-417	
Temperatura saída (°C)	50	40	75	75	40	40	40	
Pressão saída (atm)	0.7	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	
Energia (MW)	-0.15	-0.08	-0.13	-0.36	-0.19	-0.10	-4.29	
LMTD (°C)	29.3	33.3	48.5	49.3	59.5	33.1	31.4	
U (W/m ² °C)	190	650	1740	1550	5620	750	2130	
Área de troca térmica (m ²)	26.1	3.7	1.5	4.7	0.7	4.1	64.2	
Utilidade	Água 30°C							
Vazão de utilidade (kg/h)	12.52	6.88	11.18	31.23	15.97	8.79	369.87	
Bombas	P-101	P-301	P-302	P-303	P-401	P-402	C-401	C-402
Energia (kW)	9.30	1.10	0.03	2.99	1.26	0.31	4.8	8.0
Pressão de saída (atm)	1.0	1.0	1.0	8.0	1.5	1.0	1.00	1.00
Tanques	R-101	F-101	D-401					
Temperatura (°C)	37	37	69					
Pressão (atm)	1	0.064	1					
Fração de vapor	0.01	0.071	-					
Volume (m ³)	500	50	50					
Ejetores	EJ-301	EJ-302						
Fator de compressão (FC)	4.4	3.7						
Diâmetro garganta (cm)	2	3						
Diâmetro da seção reta (cm)	10	10						

Cenário 6

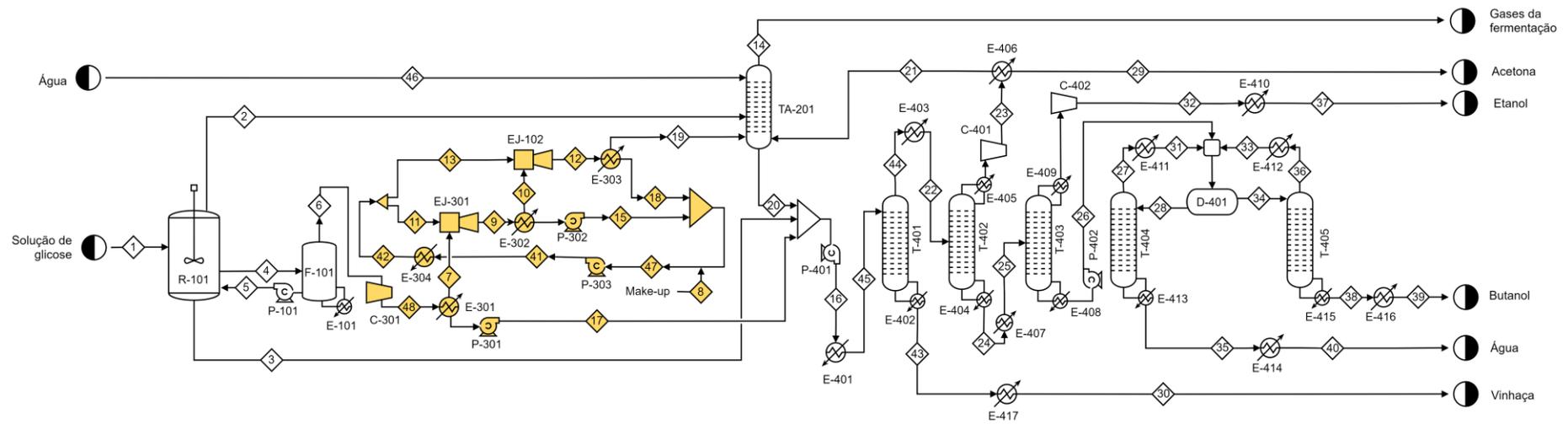


Figura A3. 5. Fluxograma do cenário 6.

Tabela A3.10. Especificações dos equipamentos para o cenário 6.

Torres	T-401	T-402	T-403	T-404	T-405	TA-201
Número de estágios	45	30	40	10	10	10
Tipo de prato	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve
Estágio alimentação	1	15	20	1	1	1 e 10
Pressão (atm)	1.5	0.7	0.3	1	1	1
Altura (m)	32.2	20.5	27.8	7.3	7.3	7.3
Diâmetro (m)	1.10	0.90	1.67	0.29	0.52	0.80
Razão de refluxo	-	8	40	-	-	-
Vazão de destilado (kg/h)	5213	756	262	350	1000	-
Temperatura do topo (°C)	105	45	50	92	94	-
Temperatura da base (°C)	112	81	63	100	118	-
Condensador	-	E-405	E-409	-	-	-
Tipo	-	Parcial	Parcial	-	-	-
Energia (MW)	-	-0.9	-2.8	-	-	-
LMTD (°C)	-	9.0	14.9	-	-	-
U (W/m ² °C)	-	1990	650	-	-	-
Área de troca térmica (m ²)	-	49.1	287.6	-	-	-
Utilidade	-	Água 30°C	Água 30°C	-	-	-
Vazão de utilidade (kg/h)	-	76.2	240.6	-	-	-
Refervedor	E-402	E-404	E-408	E-413	E-415	-
Tipo	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	-
Energia (MW)	3.47	1.11	2.92	0.22	0.43	-
LMTD (°C)	47.7	78.4	96.9	59.5	41.6	-
U (W/m ² °C)	5770	4150	190	5620	3790	-
Área de troca térmica (m ²)	12.6	3.4	158.5	0.7	2.7	-
Utilidade	LP	LP	LP	LP	LP	-
Vazão de utilidade (ton/h)	6.0	1.9	5.0	0.4	0.7	-

Continuação Tabela A3.10. Especificações dos equipamentos para o cenário 6.

Trocador de calor	E-101	E-301	E-302	E-303	E-304	E-401	E-403	E-406	
Temperatura saída (°C)	37	24	72	83	171	90	60	20	
Pressão saída (atm)	0.064	0.10	0.42	1.39	8.00	1.50	1.50	1.00	
Energia (MW)	13.71	-14.51	-0.40	-2.90	3.32	3.72	-2.32	-0.12	
LMTD (°C)	216.5	17.4	60.5	75.0	43.4	95.5	45.4	19.2	
U (W/m ² °C)	190	190	190	190	3990	2280	1610	690	
Área de troca térmica (m ²)	333.2	4377.1	34.5	203.3	19.2	17.1	31.7	9.2	
Utilidade	LP	Água 10°C	Água 30°C	Água 30°C	MP	LP	Água 30°C	Água 10°C	
Vazão de utilidade (ton/h)	23.7	2496.0	34.3	249.9	6.0	6.4	199.9	20.9	
Trocador de calor	E-407	E-410	E-411	E-412	E-414	E-416	E-417		
Temperatura saída (°C)	50	40	75	75	40	40	40		
Pressão saída (atm)	0.7	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0		
Energia (MW)	-0.15	-0.08	-0.13	-0.36	-0.19	-0.10	-4.29		
LMTD (°C)	29.3	33.3	48.5	49.3	27.9	33.1	31.4		
U (W/m ² °C)	190	650	1740	1550	2110	750	2130		
Área de troca térmica (m ²)	26.1	3.7	1.5	4.7	3.1	4.1	64.2		
Utilidade	Água 30°C								
Vazão de utilidade (kg/h)	12.53	6.88	11.18	31.23	15.98	8.79	369.98		
Bombas	P-101	P-301	P-302	P-303	P-401	P-402	C-301	C-401	C-402
Energia (kW)	9.30	1.07	0.03	3.30	1.27	0.31	530.7	4.7	8.0
Pressão de saída (atm)	1.0	1.0	1.0	8.0	1.5	1.0	0.10	1.00	1.00
Tanques	R-101	F-101	D-401						
Temperatura (°C)	37	37	69						
Pressão (atm)	1	0.064	1						
Fração de vapor	0.01	0.071	-						
Volume (m ³)	500	50	50						
Ejetores	EJ-301	EJ-302							
Fator de compressão (FC)	4.2	3.3							
Diâmetro garganta (cm)	2	3							
Diâmetro da seção reta (cm)	9	9							

Cenário 7

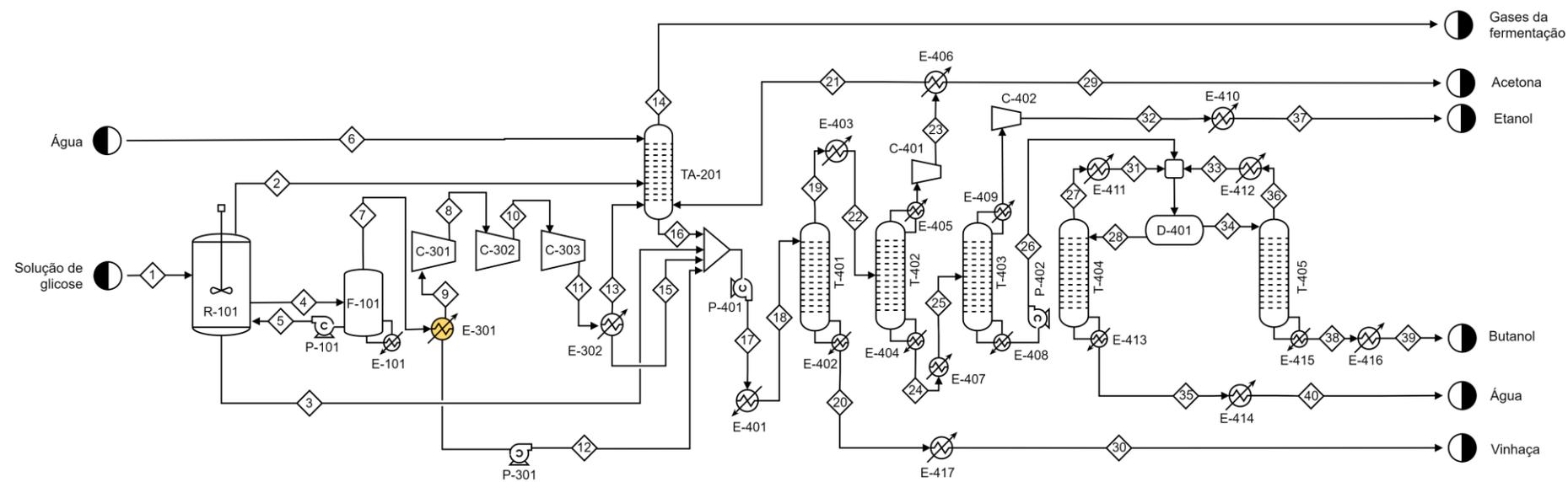


Figura A3. 6. Fluxograma do cenário 7.

Tabela A3.12. Especificações dos equipamentos para o cenário 7.

Torres	T-401	T-402	T-403	T-404	T-405	TA-201
Número de estágios	45	30	40	10	10	10
Tipo de prato	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve	Sieve
Estágio alimentação	1	15	20	1	1	1 e 10
Pressão (atm)	1.5	0.7	0.3	1	1	1
Altura (m)	32.2	20.5	27.8	7.3	7.3	7.3
Diâmetro (m)	1.10	0.92	1.67	0.29	0.52	0.80
Razão de refluxo	-	8	40	-	-	-
Vazão de destilado (kg/h)	5245	787	262	350	1000	-
Temperatura do topo (°C)	105	45	50	92	94	-
Temperatura da base (°C)	112	81	63	100	118	-
Condensador	-	E-405	E-409	-	-	-
Tipo	-	Parcial	Parcial	-	-	-
Energia (MW)	-	-0.9	-2.8	-	-	-
LMTD (°C)	-	8.6	14.9	-	-	-
U (W/m ² °C)	-	1990	650	-	-	-
Área de troca térmica (m ²)	-	53.5	287.7	-	-	-
Utilidade	-	Água 30°C	Água 30°C	-	-	-
Vazão de utilidade (kg/h)	-	79.4	240.6	-	-	-
Refrervador	E-402	E-404	E-408	E-413	E-415	-
Tipo	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	Kettle	-
Energia (MW)	3.47	1.15	2.92	0.22	0.43	-
LMTD (°C)	47.7	78.4	96.9	59.5	41.6	-
U (W/m ² °C)	5770	4150	190	5620	3790	-
Área de troca térmica (m ²)	12.6	3.5	158.5	0.7	2.7	-
Utilidade	LP	LP	LP	LP	LP	-
Vazão de utilidade (ton/h)	6.0	2.0	5.0	0.4	0.7	-

Continuação Tabela A3.12. Especificações dos equipamentos para o cenário 7.

Trocador de calor	E-101	E-301	E-302	E-401	E-403	E-406	E-407
Temperatura saída (°C)	37	33	40	90	60	20	50
Pressão saída (atm)	0.064	0.06	1.20	1.50	1.50	1.00	0.70
Energia (MW)	13.71	-12.44	-1.83	3.52	-2.32	-0.12	-0.15
LMTD (°C)	216.5	22.5	83.4	94.2	45.3	19.1	29.3
U (W/m ² °C)	190	190	190.0	2280	1610	690	190
Área de troca térmica (m ²)	333.2	2910.2	115.4	16.4	31.8	9.4	26.1
Utilidade	LP	Água 10°C	Água 30°C	LP	Água 30°C	Água 10°C	Água 30°C
Vazão de utilidade (ton/h)	23.7	2140.5	157.8	6.1	200.2	21.4	12.5
Trocador de calor	E-410	E-411	E-412	E-414	E-416	E-417	
Temperatura saída (°C)	40	75	75	40	40	40	
Pressão saída (atm)	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	
Energia (MW)	-0.08	-0.13	-0.36	-0.19	-0.10	-4.29	
LMTD (°C)	33.3	48.5	49.3	27.9	33.1	31.4	
U (W/m ² °C)	650	1740	1550	2110	750	2130	
Área de troca térmica (m ²)	3.7	1.5	4.7	3.1	4.1	64.2	
Utilidade	Água 30°C						
Vazão de utilidade (kg/h)	6.88	11.18	31.23	15.98	8.79	369.88	
Bombas	P-101	P-301	P-401	P-402			
Energia (kW)	9.30	0.99	1.27	0.31			
Pressão de saída (atm)	1.0	1.0	1.5	1.0			
Compressores	C-301	C-302	C-303	C-401	C-402		
Energia (kW)	135.5	165.7	200.9	4.9	8.0		
Pressão de saída (atm)	0.19	0.54	1.50	1.00	1.00		
Tanques	R-101	F-101	D-401				
Temperatura (°C)	37	37	69				
Pressão (atm)	1	0.064	1				
Fração de vapor	0.01	0.071	-				
Volume (m ³)	500	50	50				