

Simulação do processo de produção de etanol de arroz BRS AG usando Aspen Plus

Isabela Castro de Almeida¹, Sílvia Belém Gonçalves², Fabricio Machado³

Resumo

A simulação computacional é uma ferramenta bastante utilizada na resolução de equações que descrevem sistemas na Engenharia Química, bem como na otimização e acompanhamento de processos. O software Aspen Plus[®] é um simulador da AspenTech, líder de simulação de processos da indústria química, presente há mais de 35 anos no mercado. Pode ser empregado com o intuito de se obter melhora nos rendimentos e na produtividade, bem como redução de custos operacionais. Esse software é abrangente para a indústria química, podendo ser usado para modelagem em processos em batelada e contínuos, desde a inovação até as etapas de operação. Outra finalidade para esse simulador é a análise de segurança e de design de equipamentos. O presente trabalho tem como objetivo utilizar o simulador Aspen Plus[®] para modelagem e simulação do processo de produção de etanol, utilizando como matéria-prima a cultivar de arroz BRS AG. Com a simulação avaliou-se o fluxo mássico e as frações mássicas das correntes de entrada e saída de cada etapa. Para isso, os parâmetros adotados para a simulação foram as quantidades e os rendimentos obtidos em um estudo preliminar de fermentação dessa cultivar de arroz feito em escala de bancada. Com a modelagem e simulação proposta, é possível avaliar e propor uma otimização do processo, visando a produção em larga escala.

Palavras-chave: arroz BRS AG, etanol, simulação computacional, Aspen Plus.

Introdução

No século 20, o petróleo, o carvão e o gás natural tornaram-se a principal fonte de energia em todo o mundo e a principal base da indústria química. No entanto, são recursos não renováveis, com forte impacto ambiental (Cinelli et al., 2015). A busca por fontes renováveis de energia aumenta a cada ano. Dessa forma, o etanol é um combustível promissor e tem sido utilizado como fonte de energia por diversos países (Scholz; Riley; Cuello, 2013).

Atualmente, os Estados Unidos e o Brasil, são os maiores produtores de etanol combustível. Os Estados Unidos utilizam o amido do milho como fonte de carboidratos no processo fermentativo. Já o Brasil, utiliza a sacarose presente na cana-de-açúcar para obtenção de etanol. Juntos, esses dois países são responsáveis por produzir 84% do etanol mundial. Só em 2019, os Estados Unidos produziram mais de 15,7 bilhões

¹ Doutoranda em Química, Universidade de Brasília, isabela.almeida@colaborador.embrapa.br

² Engenheira química, doutora em Engenharia Química, pesquisadora da Embrapa Agroenergia, silvia.belem@embrapa.br

³ Engenheiro químico, doutor em Engenharia química, Universidade de Brasília, fmachado@unb.br

de litros de etanol enquanto o Brasil produziu mais de 8,5 bilhões de litros de etanol (Renewable Fuels Association, 2020).

A produção industrial do etanol consiste em um processo de fermentação, com conversão dos açúcares em álcool, por meio de microrganismos. A levedura *Saccharomyces cerevisiae* é mais comumente usada para fermentação de açúcares e produção de etanol. Biomassas vegetais amilácea, como milho, cevada, trigo, mandioca e arroz mostram-se promissoras para a produção de etanol devido a sua viabilidade econômica e disponibilidade (Rani et al., 2010). A Embrapa vem desenvolvendo novas alternativas para a produção de etanol. A Embrapa Clima Temperado desenvolveu uma cultivar de arroz (BRS AG) com finalidade exclusiva para a produção de etanol (Magalhães Júnior et al., 2015). Essa cultivar é produzida em áreas superalagadas, onde outras cultivares não conseguem crescer. Além disso, o arroz BRS AG apresenta grãos muito grandes, não são do tipo longos e finos, e possuem uma baixa relação de amilose-amilopectina, que resulta em uma qualidade inferior no cozimento, não se enquadrando nos padrões da indústria e do consumo brasileiro. Dessa forma, trata-se da primeira cultivar de arroz destinada à produção de etanol ou a alimentação animal, e não ao consumo humano (Magalhães Júnior et al., 2017).

A indústria química utiliza a modelagem e a simulação como ferramentas que oferecem a possibilidade de prever condições operacionais ou simular equipamentos, sem interferir no sistema operante. Além da economia de insumos, simular um processo de produção antes de operá-lo em larga escala também economiza tempo (Silva, 2012). O software Aspen Plus® é um simulador da AspenTech utilizado na indústria química para o desenvolvimento, otimização e acompanhamento de processos, nos quais os componentes, reagentes e produtos, podem estar nos estados sólidos, líquido e gasoso. Além disso, com este simulador é possível avaliar o comportamento de processos químicos (batelada ou contínuo, em estado estacionário ou dinâmico) através dos balanços de massa, energia e quantidade de movimento, termodinâmica, equilíbrios químicos e cinética das reações. O software pode ser utilizado com o objetivo de se obter uma melhora nos rendimentos e na qualidade dos produtos, bem como melhor produtividade e redução de custos operacionais. Além disso, o programa é utilizado na otimização de processos em plantas de larga escala (Aspentech, 2020).

As quantidades empregadas e os rendimentos obtidos da fermentação realizada em batelada com o hidrolisado de arroz BRS AG em escala laboratorial foram utilizadas como parâmetro para modelagem e simulação do processo contínuo, por meio do software Aspen Plus®. O objetivo é avaliar as etapas envolvidas no processo de produção de etanol, bem como avaliar possível utilização do modelo proposto para uma produção de etanol em grande escala.

Material e Métodos

Simulação do processo de fermentação de arroz com Aspen Plus®

Utilizou-se o software Aspen Plus®, simulador da AspenTech para modelagem e simulação do processo contínuo de fermentação da cultivar de arroz BRS AG. Os valores colocados na simulação foram os obtidos da fermentação do hidrolisado de arroz BRS

AG realizada em batelada e em escala laboratorial, em um estudo anterior (Almeida, 2017). Os componentes presentes no modelo proposto estão apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Componentes químicos presentes no processo do modelo proposto com a utilização do Aspen Plus®.

| Nome | Fórmula |
|--------------------|---|
| Água | H ₂ O |
| Amido | (C ₆ H ₁₀ O ₅) _n |
| Dióxido de Carbono | CO ₂ |
| Etanol | C ₂ H ₅ OH |
| Glicerol | C ₃ H ₈ O ₃ |
| Glicose | C ₆ H ₁₂ O ₆ |

Para a simulação do processo contínuo de produção de etanol a partir do arroz BRS AG, utilizou-se a abordagem proposta no fluxograma típico de um processo de produção de etanol em escala industrial. Utilizando como base um processo contínuo de produção de etanol, nos balanços globais descritos considerou-se: j correntes de entrada e saída, bem como os i componentes de entrada e saída para determinar o balanço de massa global (Figura 1).

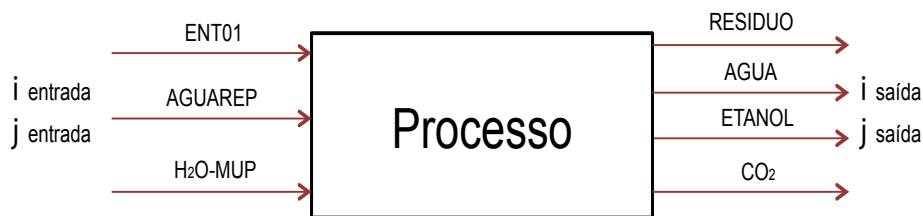


Figura 1. Esquema simplificado do processo contínuo de produção de etanol utilizando arroz BRS AG como matéria-prima.

Levando-se em consideração os componentes (i) e as correntes (j) envolvidas no processo, o balanço global de massa é expresso por:

$$\sum_{j=1}^{NS} \sum_{i=1}^{NC} F_{i,j} \Big|_{Entrada} - \sum_{j=1}^{NS} \sum_{i=1}^{NC} F_{i,j} \Big|_{Saída} = 0 \quad (1)$$

onde, NS corresponde ao número de correntes, NC é o número de componentes e $F_{i,j}$ representa o fluxo do componente i na corrente j.

Dessa forma, simulou-se a produção de etanol para o arroz BRS AG, adotando-se as quantidades e os rendimentos obtidos para a fermentação realizada em um estudo anterior em laboratório e em batelada como parâmetro. No estudo anterior base

experimental para esta simulação, realizado em laboratório, a concentração inicial de amido era 120 g/L. A fermentação transcorreu por 24h, com temperatura de 32 °C e agitação de 150 rpm, a concentração de etanol obtida foi de 29,4 g/L e de glicerol foi de 7,2 g/L. Esses foram os valores utilizados para a simulação destes componentes nas correntes de saída, tornando-se possível a obtenção dos fluxos de massa e das frações mássicas.

Resultados e Discussão

Simulação do processo de obtenção de etanol a partir do arroz BRS AG

Após a simulação do processo de obtenção de etanol utilizando como matéria-prima o arroz BRS AG de acordo com os parâmetros obtidos em escala de bancada e baseando-se no fluxograma proposto na Figura 2, e utilizando a equação (1) de balanço de massa determinou-se o fluxo de massa nas correntes de entrada e saída, conforme Tabela 2, e as frações mássicas, conforme Tabela 3.

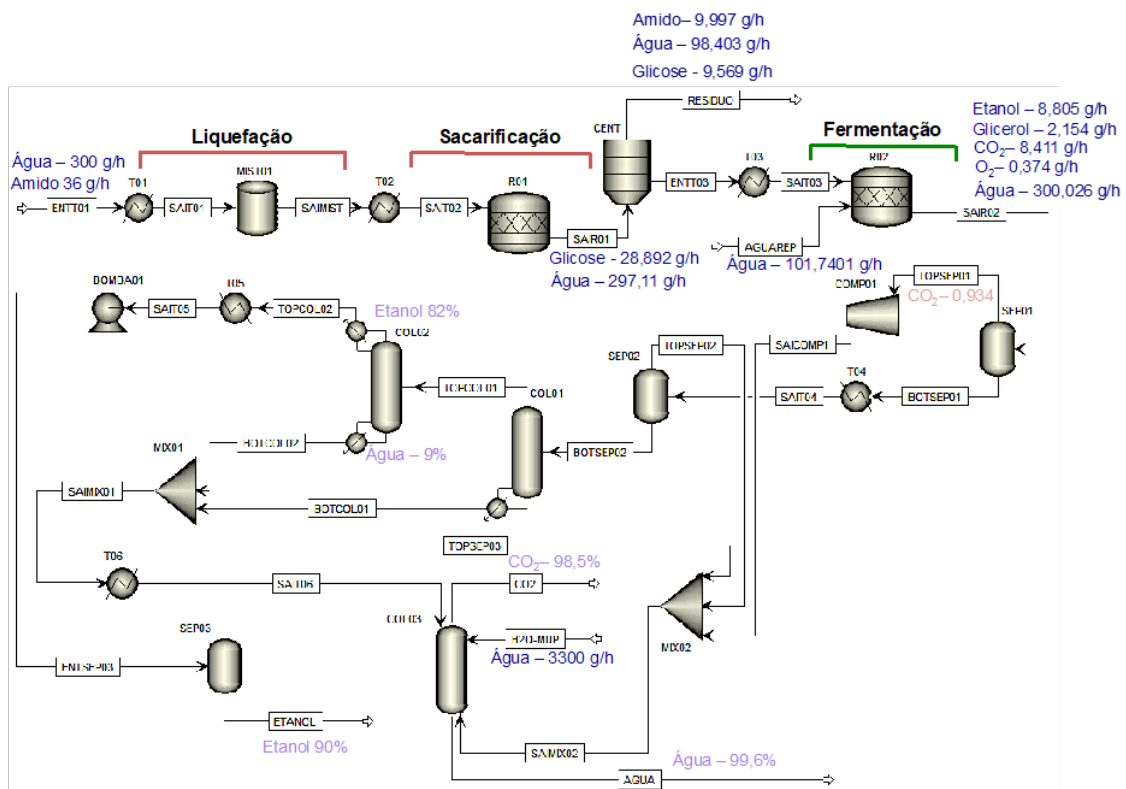


Figura 2. Fluxograma referente ao processo de produção de etanol utilizando arroz BRS AG como matéria-prima, com os respectivos fluxos e frações mássicas das correntes de entrada e saída.

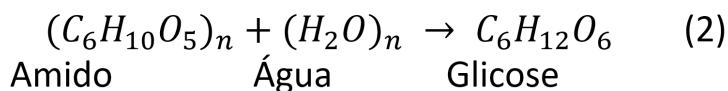
Tabela 2. Fluxo de massa nas correntes de entrada e saída da simulação proposta para o arroz BRS AG.

| Componentes | ENT01 (g/h) | AGUAREP (g/h) | H ₂ O-MUP (g/h) | SAIR01 (g/h) | SAIR02 (g/h) | RESIDUO (g/h) | ÁGUA (g/h) | ETANOL (g/h) | CO ₂ (g/h) |
|------------------|-------------|---------------|----------------------------|--------------|--------------|---------------|------------|--------------|-----------------------|
| ETANOL | 0 | 0 | 0 | 0 | 8,805 | 0 | 5,512 | 3,293 | 2,09E-05 |
| GLICOSE | 0 | 0 | 0 | 28,892 | 0 | 9,569 | 0 | 0 | 0 |
| CO ₂ | 0 | 0 | 0 | 0 | 8,411 | 0 | 8,149 | 0,053 | 0,209 |
| ÁGUA | 300 | 101,74 | 3300 | 297,111 | 300,026 | 98,403 | 3599,72 | 0,309 | 0,0013 |
| GLICEROL | 0 | 0 | 0 | 0 | 2,154 | 0 | 2,154 | 0 | 1,81E-12 |
| AMIDO | 36 | 0 | 0 | 9,997 | 0 | 9,997 | 0 | 0 | 0 |
| O ₂ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,374 | 0 | 0,371 | 0,0014 | 0,0018 |
| Temperatura (°C) | 25 | 32 | 15 | 60 | 32 | 60 | 15,36 | 35 | 15,31 |
| Pressão (atm) | 1 | 1 | 1,5 | 1 | 1 | 1 | 1,2 | 3 | 1,2 |

Tabela 3. Frações mássicas nas correntes de entrada e saída da simulação proposta para o arroz BRS AG.

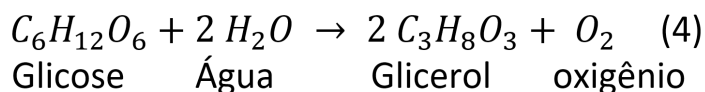
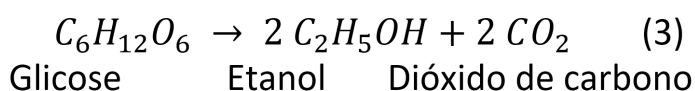
| Componentes | ENT01 | AGUAREP | H ₂ O-MUP | SAIR01 | SAIR02 | RESIDUO | ÁGUA | ETANOL | CO ₂ |
|------------------|-------|---------|----------------------|--------|--------|---------|--------|--------|-----------------|
| ETANOL | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,028 | 0 | 0,002 | 0,901 | 9,88E-05 |
| GLICOSE | 0 | 0 | 0 | 0,086 | 0 | 0,081 | 0 | 0 | 0 |
| CO ₂ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,026 | 0 | 0,0023 | 0,015 | 0,985 |
| ÁGUA | 0,893 | 1 | 1 | 0,884 | 0,938 | 0,834 | 0,996 | 0,085 | 0,0059 |
| GLICEROL | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,007 | 0 | 0,0006 | 0 | 8,53E-12 |
| AMIDO | 0,107 | 0 | 0 | 0,03 | 0 | 0,085 | 0 | 0 | 0 |
| O ₂ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,001 | 0 | 0,0001 | 0,0004 | 0,0086 |
| Temperatura (°C) | 25 | 32 | 15 | 60 | 32 | 60 | 15,36 | 35 | 15,31 |
| Pressão (atm) | 1 | 1 | 1,5 | 1 | 1 | 1 | 1,2 | 3 | 1,2 |

A primeira etapa do processo consiste na hidrólise do amido à glicose, para posterior fermentação. Para as hidrólises enzimáticas realizadas no reator em escala laboratorial, adotou-se que 80% da composição do arroz corresponde amido, o fluxo mássico do componente Amido na corrente de entrada (ENT01 – Figura 2) corresponde a 36 g/h, e a 300 g/h de água (Tabela 2). A mistura é adicionada ao sistema a uma temperatura ambiente, 25 °C e pressão de 1 atm. Para a liquefação do amido, a mistura é aquecida a 90 °C por meio do primeiro trocador de calor (T01). Ao atingir a temperatura de interesse, a enzima Termamyl 2X (fornecida pela Novozymes) é adicionada ao sistema, e a reação transcorre por 1 hora. Para a etapa de sacarificação, a mistura é resfriada para 60 °C por meio do segundo trocador de calor (T02). Adiciona-se a enzima AMG 300 mL (fornecida pela Novozymes) e a reação transcorre por 3 horas. A reação química envolvida no processo de hidrólise é dada por:



Após a liquefação e sacarificação do amido a glicose, o fluxo mássico na corrente de saída do reator (SAIR01) de glicose de 28,892 g/h, de água é de 297,11 g/h e de amido não hidrolisado é de 9,997 g/h. A corrente é adicionada ao sistema de centrifugação (CENT) para remoção do amido não hidrolisado, eliminado pela corrente de saída RESIDUO. O fluxo mássico de amido nessa corrente é de 9,997 g/h. Além disso, 98,403 g/L de água e 9,569 g/h de glicose também são removidas na corrente RESIDUO, apenas para obtenção dos rendimentos das fermentações realizadas anteriormente em reator.

O hidrolisado antes de ser transferido ao reator de fermentação, passa pelo trocador de calor (T03) para diminuição da temperatura de 60 °C, temperatura oriunda da etapa de sacarificação, para 32 °C. Uma corrente nomeada de AGUAREP com 101,740 g/h de água é adicionada ao fermentador (R02) para reposição da água retirada na etapa de centrifugação e para manter o fluxo de água inicial de 300 g/h. As reações envolvidas no processo de fermentação da glicose a etanol e glicerol são:



Após reação de fermentação, a corrente de saída do reator (SAIR02) apresenta fluxo mássico de etanol de 8,805 g/h, 2,154 g/h de glicerol, 8,411 g/L de dióxido de carbono, 0,374 g/h de oxigênio e 300,026 g/h de água. Os fluxos obtidos de etanol e glicerol correspondem aos valores das concentrações de etanol (29,4 g/L) e glicerol (7,2 g/L) para a fermentação do arroz BRS AG. Após o processo fermentativo, a corrente de saída do fermentador (SAIR02) segue para as etapas de separação em vasos flash (SEP01 e SEP02) para recuperação de correntes ricas em CO₂, colunas destilação (COL01 e COL02) para obtenção de uma corrente rica em etanol de concentração próxima ao ponto de azeótropo em misturas etanol/água, e uma torre de absorção para purificação final da corrente global de CO₂ no processo. A Tabela 4 apresenta as frações mássicas, das principais correntes de entrada e saída da simulação proposta para o arroz BRS AG para compreensão das etapas de separação e purificação.

No primeiro vaso de separação flash, nomeado de SEP01, a maior fração de dióxido de carbono (0,934) sai na corrente de topo (TOPSEP01), por ser o componente mais leve, e segue para o compressor (COMP01), seguindo para o processo de purificação do CO₂. A água e o etanol saem do separador SEP01, cuja corrente de fundo (BOTSEP01) também apresenta pequenas frações de CO₂ e glicerol, e seguem até o segundo separador (SEP02). A fração de CO₂ que ainda continha na corrente BOTSEP01, sai pelo topo do vaso flash (SEP02) para o processo de purificação do CO₂, por meio da coluna de absorção (COL03, contendo três estágios teóricos de separação). As frações de água e etanol seguem para a coluna de destilação COL01 (contendo 10 estágios teóricos de separação). A maior fração de água sai na corrente BOTCOL01, da parte inferior da

coluna (COL01), até a coluna de absorção (COL03) para ser utilizada na purificação do CO_2 . O etanol e uma fração menor de água saem do topo da coluna COL01, por meio da corrente TOPCOL01 até a coluna COL02 (contendo 20 pratos teóricos), onde ocorre a separação do etanol pelo topo da coluna com uma fração de 82%, e a água pela parte inferior da coluna, com uma fração mássica de 9%. O etanol segue pela corrente ENTSEP03 até o terceiro separador (SEP03), e é obtido após o processo com uma fração mássica de 90%.

Tabela 4. Fração mássica em algumas correntes de entrada e saída da simulação proposta para o arroz BRS AG.

| Componentes | SAIR02 | TOPSEP01 | BOTSEP01 | BOTSEP02 | TOPCOL02 | ENTSEP03 | ÁGUA | ETANOL | CO2 |
|------------------|--------|----------|----------|----------|----------|----------|-------|--------|----------|
| ETANOL | 0,028 | 0,006 | 0,028 | 0,028 | 0,824 | 0,824 | 0,002 | 0,901 | 9,88E-05 |
| GLICOSE | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| CO2 | 0,026 | 0,934 | 0,001 | 0,001 | 0,09 | 0,09 | 0,002 | 0,015 | 0,985 |
| ÁGUA | 0,938 | 0,02 | 0,964 | 0,964 | 0,077 | 0,077 | 0,996 | 0,085 | 0,006 |
| GLICEROL | 0,007 | 8,95E-10 | 0,007 | 0,007 | 4,05E-67 | 4,05E-67 | 0,001 | 0 | 8,53E-12 |
| AMIDO | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| O2 | 0,001 | 0,039 | 0 | 0 | 0,008 | 0,008 | 0 | 0 | 0,009 |
| Temperatura (°C) | 32 | 32 | 32 | 75 | 80,43 | 50,54 | 15,36 | 35 | 15,31 |
| Pressão (atm) | 1 | 1 | 1 | 2,3 | 1,2 | 3 | 1,2 | 3 | 1,2 |

As correntes com o componente CO_2 se encontram no misturador MIX02 e seguem para a coluna de absorção COL03 por meio da corrente SAIMIX02. Uma corrente com fluxo mássico de 3300 g/h de água é adicionada a COL03 para purificação do CO_2 . Ao final do processo, o CO_2 apresenta fração mássica de 98,5%. A água sai do processo com uma fração mássica de 99,6%.

Nas simulações realizadas com arroz BRS AG, tanto nas colunas de destilação quanto nas colunas de absorção, foram empregados modelos rigorosos de separação usados para a resolução do sistema de equações MESH, que corresponde aos balanços de massa (M), equilíbrio termodinâmico (E), somatório das frações molares (S) e entalpia (H).

A análise preliminar para o processo de obtenção de etanol, utilizando como matéria-prima o arroz BRS AG, por meio da simulação com o simulador Aspen Plus® demonstrou os processos químicos e os balanços de massa envolvidos. Dessa forma, o modelo pode ser adotado objetivando-se a simulação do processo em escalas maiores, bem como para otimização do processo.

Conclusões

O simulador Aspen Plus® mostrou-se eficaz na modelagem e simulação do processo contínuo de produção de etanol utilizando o arroz BRS AG como matéria-prima. O modelo proposto mostrou-se coerente com todo o processo descrito, uma vez que considerou todas as correntes de entrada, trocadores de calor, sistema de centrifugação, fermentador, sistema de separação em vaso flash, coluna de destilação e correntes de

saída. Dessa forma, o modelo pode ser utilizado para simular um processo de produção de etanol em escala industrial, considerando tanto as etapas de hidrólise e fermentação, como as etapas de destilação e purificação.

Os parâmetros utilizados na simulação foram obtidos de um estudo preliminar, no qual realizou-se a fermentação do hidrolisado de arroz BRS AG em escala de bancada. Dessa forma, o valor adotado na corrente de entrada das componentes água e amido corresponderam as quantidades utilizadas na fermentação. Os valores das correntes de saída corresponderam as concentrações finais obtidas de etanol e glicerol na fermentação realizada em laboratório.

A partir dos resultados da simulação foram obtidos os fluxos mássicos e as frações mássicas das correntes de entrada e saída de cada etapa. Dessa forma, o modelo pode ser utilizado para otimização do processo e/ou para avaliação do rendimento e produtividade em escala industrial.

Referências

- ALMEIDA, Isabela Castro de. **Estudos sobre o uso do arroz BRS AG para a produção de etanol**. 2017. xix, 87 f., il. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade de Brasília, Brasília, 2017.
- ASPENTECH. Design and Optimize Chemical Processes with Aspen Plus®. Disponível em: <<https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspem-plus>>. Acesso em: 10 de Setembro de 2020.
- CINELLI, B. A., CASTILHO, L. R., FREIRE, D. M. G., CASTRO, A. M. A brief review on the emerging technology of ethanol production by cold hydrolysis of raw starch. **Fuel**, v. 150, p. 721-729, 2015.
- MAGALHÃES JÚNIOR, A. M. D., FAGUNDES, P. R. R., FRANCO, D. F., MORAIS, O. P. D., SIQUEIRA, F. G. D., STRECK, E. A., AGUIAR, G. A., FACCHINELLO, P. H. K. BRS AG: first cultivar of irrigated rice used for alcohol production or animal feed. **Crop Breeding and Applied Biotechnology**, v. 17, p. 72-77, 2017.
- MAGALHÃES JÚNIOR, A. M., FAGUNDES, P. R. R., FRANCO, D., ANDRES, A., NUNES, C. D. P., JOSÉ A., MARTINS, J. F., MORAES, O. P., MOURA NETO, F. BRS AG: Cultivar de Arroz Irrigado Desenvolvida como Matéria-Prima para Produção de Álcool de Cereais e/ou Alimentação Animal. p. Comunicado Técnico 372, 2015. Disponível em: <<https://ainfo.cnptia.embrapa.br/digital/bitstream/item/127678/1/Comunicado-327-web.pdf>>. Acesso em: 08 de Dezembro de 2015.
- RANI, P., SHARMA, S., GARG, F. C., RAJ, K., WATI, L. **Ethanol Production from Potato Flour by *Saccharomyces cerevisiae***. 2010.
- RENEWABLE FUELS ASSOCIATION. World Fuel Ethanol production. 2020. Disponível em: <<https://ethanolrfa.org/statistics/annual-ethanol-production/>>. Acesso em: 21 de Setembro de 2020.
- SCHOLZ, M. J., RILEY, M. R., CUELLO, J. L. Acid hydrolysis and fermentation of microalgal starches to ethanol by the yeast *Saccharomyces cerevisiae*. **Biomass and Bioenergy**, v. 48, p. 59-65, 2013.
- SILVA, J. L. **Modelagem e simulação de reatores autoclave para produção de PEBD**. 2012. Dissertação (Mestrado em Engenharia, Programa De Pós-Graduação Em Engenharia Química na área de Concentração: Modelagem e Simulação de Processos) - Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2012.