

FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO DO SUL
INSTITUTO DE QUÍMICA - INQUI
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

GUSTAVO DINARDI DE MATOS

**COMPARAÇÃO DA DESTILAÇÃO EXTRATIVA COM ETILENOGLICOL PARA
PRODUÇÃO DE ETANOL ANIDRO UTILIZANDO SIMULADORES DWSIM E
ASPEN PLUS®**

Campo Grande – MS

2023

GUSTAVO DINARDI DE MATOS

**COMPARAÇÃO DA DESTILAÇÃO EXTRATIVA COM ETILENO GLICOL PARA
PRODUÇÃO DE ETANOL ANIDRO UTILIZANDO SIMULADORES DWSIM E
ASPEN PLUS®**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Engenharia Química da Universidade Federal de Mato Grosso do Sul como parte dos requisitos necessários para à obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dra. Janaina dos Santos Ferreira

Coorientador: Prof. Dr. William Costa e Silva

CAMPO GRANDE - MS

2023

GUSTAVO DINARDI DE MATOS

**COMPARAÇÃO DA DESTILAÇÃO EXTRATIVA COM ETILENO GLICOL PARA
PRODUÇÃO DE ETANOL ANIDRO UTILIZANDO SIMULADORES DWSIM E
ASPEN PLUS®**

Trabalho de Conclusão de Curso para obtenção
do título de Bacharel em Engenharia Química
apresentado à Universidade Federal de Mato
Grosso do Sul.

Data da aprovação: 01 de dezembro de 2023.

Prof. Dra. Janaina dos Santos Ferreira

Universidade Federal de Mato Grosso do Sul

Prof. Dr. William Costa e Silva

Universidade Federal de Mato Grosso

Prof. Dr. Celso Murilo dos Santos

Universidade Federal de Mato Grosso do Sul

CAMPO GRANDE - MS

2023

DEDICATÓRIA

Agradeço aos meus pais, Reinaldo José de Matos e Rúbia Cristina Dinardi Matos, pelo apoio incondicional em todos os momentos difíceis da minha trajetória acadêmica. Este trabalho é dedicado a eles.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer meus amigos e colegas de turma, em especial a Isabela de Souza Lima, que me acompanhou durante esses 5 longos anos do curso e foi essencial para minha graduação, me auxiliando em diversas situações e trabalhos, além de ser minha principal fonte para comparações e estudos.

Agradeço também a minha irmã, Brenda Dinardi de Matos, por me auxiliar sempre que precisei, não apenas nesse trabalho, mas também para a vida.

Ademais, gostaria de agradecer meus orientadores, Janaina e William, que me ajudaram muito durante todo o desenvolvimento do trabalho, oferecendo sugestões valiosas e correções necessárias para sua formulação.

Por fim, gostaria de agradecer a Universidade Federal de Mato Grosso do Sul – UFMS, todos os docentes e membros da instituição por me auxiliarem provendo toda a estrutura e apoio durante o decorrer da minha graduação, em especial, o corpo docente do INQUI que sempre esteve disponível para me ouvir e amparar.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Fluxograma do processo com uma torre de destilação extrativa seguida por uma torre de recuperação do solvente.....	13
Figura 2 - Ajuste do modelo UNIFAC aos dados experimentais de Souza et. al.....	15
Figura 3 - Fluxograma da coluna de destilação extrativa e de recuperação do solvente no DWSIM	18
Figura 4 – Fluxograma da coluna de destilação extrativa e de recuperação do solvente no ASPEN PLUS.....	18
Figura 5 - Gráfico do perfil de composição da torre extrativa da fase líquida gerado pelo DWSIM	21
Figura 6 - Gráfico do perfil de composição da fase líquida da torre extrativa gerado pelo ASPEN PLUS®	21
Figura 7 - Gráfico do perfil de composição da fase líquida da torre de recuperação do solvente gerado pelo DWSIM.....	24
Figura 8 - Gráfico do perfil de composição da fase líquida da torre de recuperação do solvente gerado pelo ASPEN PLUS®	25

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Tabela de parâmetros da simulação das colunas de destilação extrativa	16
Tabela 2 - Tabela de parâmetros da simulação das colunas de recuperação de solvente.....	17
Tabela 3 – Principais resultados da torre de destilação extrativa no processo de produção de etanol anidro	20
Tabela 4 - Principais resultados das torres de recuperação de solvente	23

RESUMO

A constante evolução e diversidade dos softwares que simulam processos disponíveis no mercado geram dificuldade de seleção aos ingressantes nos cursos de engenharia química que buscam por ferramentas para a realização de estudos e trabalhos acadêmicos. Nesse contexto, esse trabalho busca solucionar o questionamento acerca da necessidade de utilização de softwares comerciais ou gratuitos para dada atribuição por meio da comparação entre os softwares DWSIM na versão 8.3.1 e ASPEN PLUS® na versão 12.1. Dessa forma, foi simulado em ambos os programas um processo de destilação extrativa da mistura etanol/água para obtenção do etanol anidro, utilizando como solvente o etilenoglicol de forma a solucionar o problema do azeótropo formado, além de uma torre de recuperação do solvente com a finalidade de viabilizar o processo em uma situação real da indústria. A escolha da destilação extrativa para obtenção do etanol anidro foi feita com base na sua importância para a indústria brasileira, em especial na região centro-oeste do Brasil. Com isso, obteve-se resultados diferentes em alguns pontos da simulação como na vazão no topo com 45% e 77,8% nas torres de destilação extrativa e recuperação, respectivamente, e 22,49% na fração de etilenoglicol no fundo das torres de destilação extrativa. Contudo, tais diferenças estão relacionadas as adaptações feitas nos trabalhos utilizados como referência, além dos dados específicos de cada software que precisaram ser adicionados para a realização da simulação. Sendo assim, com o perfil de composição ao longo dos pratos teóricos de ambas as torres de destilação extrativa similares, foi possível concluir que a utilização do software gratuito DWSIM é apropriada para estudos acadêmicos e realização de simulações com um grau de complexidade menor, sem perdas na qualidade do estudo, mesmo com algumas ressalvas em relação a estabilidade e disponibilidade de dados presentes em sua biblioteca comparado ao ASPEN PLUS®.

Palavras-chave: simulação; DWSIM; ASPEN PLUS®; etanol anidro; destilação extrativa;

ABSTRACT

The constant evolution and diversity of software simulating processes available in the market pose a challenge for newcomers to chemical engineering courses seeking tools for academic studies and projects. In this context, this work aims to address the question of whether commercial or free software is necessary for a given task by comparing the DWSIM version 8.3.1 and ASPEN PLUS[®] version 12.1 software. Accordingly, a process of extractive distillation of the ethanol/water mixture to obtain anhydrous ethanol was simulated in both programs. Ethylene glycol was used as a solvent to address the issue of the formed azeotrope, along with a solvent recovery column to make the process feasible in a real industrial situation. The choice of extractive distillation for obtaining anhydrous ethanol was made based on its importance to the Brazilian industry, especially in the Midwest region of Brazil. As a result, different outcomes were obtained in some simulation points, such as a 45% and 77.8% flow rate at the top of the extractive distillation and recovery towers, respectively, and a 22.49% fraction of ethylene glycol at the bottom of the extractive distillation towers. However, these differences are related to the adaptations made to the reference works and the specific data of each software that needed to be added for the simulation. Thus, with a composition profile along the theoretical plates of both similar extractive distillation towers, it was possible to conclude that the use of the free software DWSIM is suitable for academic studies and simulations with a lower level of complexity, without compromising the quality of the study. However, there are some reservations regarding the stability and data availability in its library compared to ASPEN PLUS[®].

Keywords: simulation; DWSIM; ASPEN PLUS[®]; anhydrous ethanol; extractive distillation;

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	8
2. OBJETIVOS	9
2.1. GERAL.....	9
2.2. ESPECÍFICOS	9
3. REFERENCIAL TEÓRICO	9
3.1. MISTURA AZEÓTropa	9
3.2. OBTENÇÃO DE ETANOL ANIDRO	10
3.3. SIMULADORES DE PROCESSO	11
4. MATERIAIS E MÉTODOS	12
4.1. METODOLOGIA	12
4.2. DESTILAÇÃO EXTRATIVA.....	13
4.3. SELEÇÃO DO PACOTE TERMODINÂMICO	14
4.4. DADOS UTILIZADOS	15
5. RESULTADOS E DISCUSSÃO	18
5.1. SIMULAÇÃO DAS TORRES DE DESTILAÇÃO EXTRATIVA	19
5.2. SIMULAÇÃO DAS TORRES DE RECUPERAÇÃO DO SOLVENTE.....	23
6. CONCLUSÃO	27
SUGESTÕES FUTURAS	29
REFERÊNCIAS	30
APÊNDICE – Simulação das torres de recuperação do solvente em mesmas condições operacionais	33

1. INTRODUÇÃO

A constante evolução das ferramentas de simulação disponíveis no mercado propicia uma dificuldade de escolha para os estudantes de engenharia química, na decisão de qual software de simulação é o mais adequado para ser utilizado em suas pesquisas ou trabalhos acadêmicos. Ademais, com a grande variedade de aplicativos disponíveis, entre eles comerciais e gratuitos, surge a dúvida da real necessidade de destinar fundos de pesquisa para aquisição de um desses softwares ou se é possível e eficiente utilizar das ferramentas gratuitas para essa função.

O princípio subjacente à destilação reside na diferença de volatilidade entre os elementos a serem segregados. Entretanto, a presença de azeótropos introduz complicações devido à coincidência de composição nas fases líquida e de vapor. A separação dessas misturas não é viável por meio da destilação convencional, demandando, assim, a aplicação de técnicas modificativas. Na indústria, as técnicas predominantes para separar misturas azeotrópicas são a destilação extrativa e a destilação azeotrópica, ambas fundamentadas na introdução de um agente de separação capaz de alterar a volatilidade relativa do sistema, facilitando a separação desejada (FIGUEIRÊDO, 2009).

O etanol anidro é de grande importância comercial no Brasil, visto que desde março de 2015 a Portaria MAPA nº 75/2015 estipulou que o percentual obrigatório de adição de etanol anidro combustível à gasolina, comum e premium, devendo ser de 27% e 25%, respectivamente. Essa medida tem por objetivo reduzir/limitar as emissões de gases percursoros do efeito estufa. Ademais, o etanol anidro é amplamente utilizado na indústria química como matéria-prima de diversos produtos como: ésteres e éteres, solventes, tintas e vernizes, cosméticos, pulverizadores, dentre outros (FIGUEIRÊDO, 2009). Diante do exposto, o processo de produção de etanol anidro é de suma importância para a indústria química.

Nesse contexto, o presente trabalho tem por objetivo comparar o uso de dois softwares de simulação de processos, DWSIM e ASPEN PLUS[®], sendo um gratuito e outro comercial, respectivamente, no contexto do processo de destilação extrativa da mistura etanol/água, utilizando como solvente o etilenoglicol. Ressalta-se que, além da destilação, também será simulado uma torre de recuperação do solvente para uma melhor comparação em um contexto real de estudo de processos. Dessa forma, será possível analisar suas principais diferenças em

utilização e desempenho, além das principais ferramentas que disponibilizam para análise dos resultados.

2. OBJETIVOS

2.1. GERAL

O objetivo deste estudo foi comparar o software gratuito de simulação de processos DWSIM e o software comercial ASPEN PLUS[®], no contexto de uma destilação extrativa da mistura etanol/água para a obtenção de etanol anidro.

2.2. ESPECÍFICOS

- Coletar dados da literatura.
- Simular a destilação extrativa no DWSIM e ASPEN PLUS[®].
- Avaliar a performance do software gratuito DWSIM frente ao ASPEN PLUS[®] (software comercial de referência) nas operações unitárias de destilação extrativa.

3. REFERENCIAL TEÓRICO

3.1. MISTURA AZEÓTROPICA

Segundo Figueirêdo (2009), um azeótropo é uma combinação de dois ou mais componentes voláteis que, ao ser submetida a um processo de destilação convencional, apresenta composições idênticas nas fases líquida e vapor.

A presença de um azeótropo indica que a mistura se desvia do comportamento ideal, ou seja, não segue a lei de Raoult, referido desvio apresenta-se sob dois tipos, quais sejam, positivo e negativo, de modo que o primeiro ocorre quando o coeficiente de atividade é maior que 1,0, indicando que as moléculas dos componentes do sistema se repelem, resultando em pressões parciais mais elevadas e na formação de um azeótropo de ponto de ebulição mínimo, cuja temperatura de ebulição é menor do que a dos componentes puros. Por outro lado, um desvio negativo sugere que o coeficiente de atividade é menor que 1,0, levando a pressões parciais

mais baixas e à formação de azeótropos de ponto de ebulição máximo. De acordo com McKetta (1993), os azeótropos de ponto de ebulição mínimo são mais comuns nesse contexto.

Ressalta-se que a divergência da Lei de Raoult, por si só, não é o fator determinante para a formação de um azeótropo. É necessário, ademais, que os pontos de ebulição dos componentes puros estejam suficientemente próximos para que a ocorrência de um ponto de ebulição máximo ou mínimo seja possível. Componentes com ebulições próximas, acompanhadas por pequenas discrepâncias em relação à idealidade, têm a capacidade de formar azeótropos. Em contrapartida, substâncias que exibem interações altamente não ideais, devido a grandes diferenças em seus pontos de ebulição, não são capazes de gerar azeotropismo. De modo concreto, a formação de azeótropos é rara quando os pontos de ebulição das substâncias diferem em mais de 30°C (PERRY, 2018).

Outrossim, um azeótropo, seja ele de ponto de ebulição mínimo ou máximo, pode ser classificado como homogêneo ou heterogêneo. De acordo com essa classificação, quando uma mistura azeotrópica resulta em uma única fase líquida em equilíbrio com a fase de vapor, ela é considerada homogênea. Por outro ângulo, se a condição azeotrópica leva a um comportamento com múltiplas fases líquidas, o azeótropo é caracterizado como heterogêneo. Nesse cenário, a composição da fase de vapor corresponde à composição geral das duas ou mais fases líquidas presentes (VAN NESS et al., 2021), refletindo um equilíbrio entre uma fase de vapor e múltiplas fases líquidas.

3.2. OBTENÇÃO DE ETANOL ANIDRO

A desidratação do etanol não é algo recente, de modo que Mariller (1950), a título de exemplo, desenvolveu e aplicou o processo de desidratação contínua do etanol utilizando como agente extrator o glicerol, porém seu método foi abandonado devido a problemas com a degradação do glicerol, equipamentos e processos ultrapassados, além de dificuldades com a automação existente à época, que inviabilizava sua utilização em virtude de problemas na recuperação do solvente.

Nesse contexto, as usinas de Méllé se desenvolveram utilizando por muitos anos o benzeno como solvente do sistema etanol/água. Contudo, por ser um desidratante perigoso e potencialmente cancerígeno, seu uso foi proibido a partir de 1997, sendo necessário a utilização de outras formas de separação. Segundo Dias (2008), as indústrias que utilizavam benzeno

como componente da destilação azeotrópica passaram a utilizar cicloexano por permitir o reaproveitamento da mesma infraestrutura já instalada.

Outra forma de se obter etanol anidro é a partir da redução da pressão na coluna de destilação para valores abaixo de 0,11 atm (PERRY, 2018), técnica por meio do qual o azeótropo entre a mistura etanol-água não é formado, possibilitando assim sua extração na coluna. Todavia, esse processo apresenta inviabilidade econômica por demandar uma alta razão de refluxo, numerosos pratos teóricos, grandes diâmetros para torre, um consumo elevado de vapor na torre, além da dificuldade de condensação a baixas pressões (BLACK, 1980).

Dentre os processos utilizados na obtenção de etanol anidro pelas indústrias em escala global, tem-se: a destilação extrativa, a destilação azeotrópica, a desidratação em peneiras moleculares e pervaporação (KUJAWSKI, 2000; KAMINSKI et al., 2007). Desse modo, com base na necessidade de expor alternativas para o processo de destilação com benzeno, o diretor do Programa Federal de Segurança e Saúde no Trabalho (DSST) convocou uma reunião em 2001, com a presença da Comissão Nacional Permanente do Benzeno (CNPBz), oportunidade na qual emitiu um parecer que determinou a melhor alternativa, do ponto de vista de proteção à saúde do trabalhador, sendo o processo de extração por peneira molecular. Além disso, esse parecer considerou aceitáveis, com base na segurança sanitária, os solventes azeotrópicos como cicloexano, solventes mistos com nome fantasia como SOLBRAX ANB, e UNIVEN 670, além da destilação extrativa com etilenoglicol, mostrando assim que o presente estudo é de relevância.

3.3. SIMULADORES DE PROCESSO

Os simuladores de processo se utilizam de fluxogramas com equações matemáticas moduladas e integradas em cada uma de suas conexões e unidades a fim de simular situações reais em relação às propriedades físicas de entalpia, constantes de equilíbrio e outras propriedades termodinâmicas (PEREIRA, 2018). Para abordar esse amplo conjunto de equações, existem duas categorias de simuladores que empregam diferentes métodos para a simulação de processos, quais sejam, sequencial modular e orientado por equações (BIEGLER et. al., 1997).

A abordagem sequencial modular tem por característica resolver o sistema em etapas, e com isso a informação é transmitida no fluxograma conforme o fluxo mássico do sistema, sendo exemplos de softwares que utilizam essa abordagem: DWSIM, ASPEN PLUS®, COCO (cape-

open). Já os orientados por equação utilizam da convergência simultânea do sistema, resolvendo globalmente a partir de chutes iniciais que possibilitam que qualquer processo seja simulado, desde que já esteja modelado, sendo exemplo de software que utiliza essa abordagem o EMSO (Centro Acadêmico de Engenharia Química – Universidade Estadual de Maringá, 2021).

De acordo com Ullah et. al. (2022), as ferramentas de cálculos e softwares de simulações estão sempre evoluindo no campo da engenharia química, em virtude dos elevados custos e do tempo necessário para que os experimentos sejam realizados experimentalmente. Dessa forma, uma vez que a engenharia de processos é focada em simular, projetar e otimizar as operações em plantas industriais, faz-se necessária a realização de diversas operações de balanço de massa e energia, seleção de equipamentos, processos e estimativa de custos.

Nesse contexto, os simuladores de processos como o ASPEN PLUS[®], ASPEN HYSYS[®], ProSim Plus, e UniSim podem realizar todas essas tarefas sendo necessário a compra de uma licença com alto valor atrelado, o que em determinadas circunstâncias é um fator limitante. Além disso, esses softwares são *closed source*, ou seja, não disponibilizam seu código para ser modificado e interpretado ao público, tornando a resolução de problemas menos acessível. Por outro lado, o software criado por Daniel Wagner Oliveira de Medeiros, DWSIM, possibilitou resolver esses dois problemas por se tratar de um software *open-source*, isto é, que possibilita a alteração e edição do código por ser um simulador gratuito (Ullah et. al. (2022).

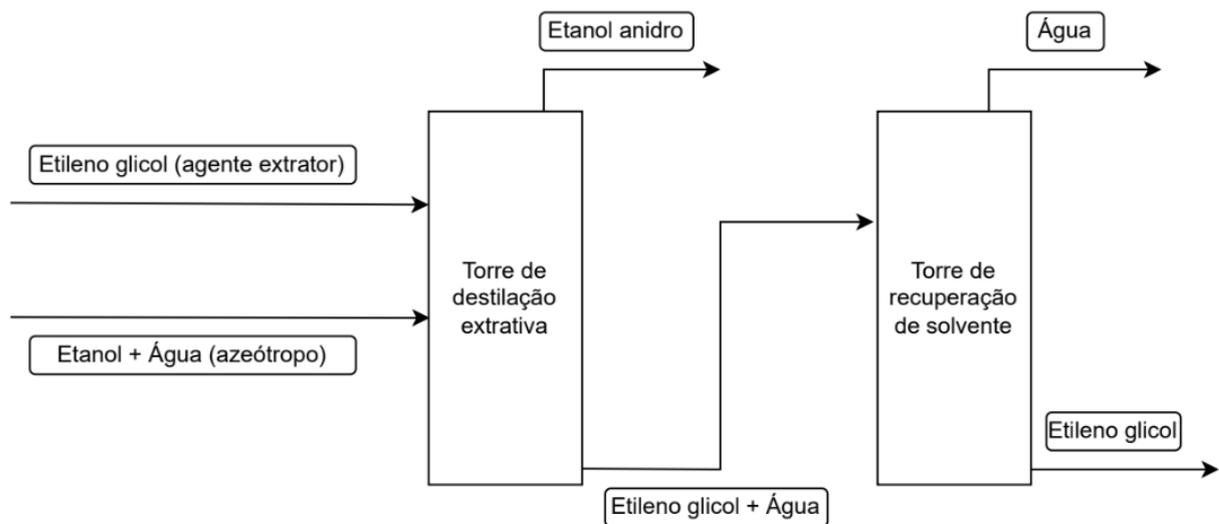
4. MATERIAIS E MÉTODOS

4.1. METODOLOGIA

A metodologia empregada neste estudo possui uma abordagem predominantemente teórico-computacional, envolvendo a utilização de duas ferramentas principais: a versão gratuita do software computacional DWSIM, na sua versão 8.3.1, e o software comercial ASPEN PLUS[®], versão 12.1. Além disso, complementando a análise, foi realizada uma pesquisa bibliográfica abordando aspectos teóricos relacionados às vantagens e desvantagens de ambos os softwares. Essa abordagem permitiu uma compreensão mais abrangente das capacidades e limitações de cada plataforma segundo Ullah et. al. (2022).

Nesse presente trabalho o uso dos simuladores teve por objetivo avaliar o desempenho do sistema de separação para uma mistura de água e etanol, com a introdução de etilenoglicol como solvente, considerando as particularidades e enfoque teórico associados a cada software no contexto da destilação extrativa descrita conforme o fluxograma do processo apresentado na Figura 1 a seguir.

Figura 1 - Fluxograma do processo com uma torre de destilação extrativa seguida por uma torre de recuperação do solvente



Fonte: autoria própria.

4.2. DESTILAÇÃO EXTRATIVA

A destilação extrativa é um processo de vaporização parcial que envolve a presença de um agente não volátil de separação, com um elevado ponto de ebulição, conhecido como solvente ou agente separador. Esse solvente é adicionado a uma mistura azeotrópica com o propósito de modificar a volatilidade relativa do componente principal, sem induzir a formação de novos azeótropos, conforme discutido em fontes como Perry (2018) e Black et al. (1972). O princípio subjacente à destilação extrativa reside na introdução de um solvente seletivo que interage de maneira distinta com cada um dos componentes da mistura original, demonstrando tipicamente uma afinidade mais acentuada pelo componente desejado. Esse conceito é corroborado em estudos como os de Lee and Gendry (1997) e Doherty and Malone (2001).

De maneira geral, o processo inicia com a adição do solvente na parte superior da coluna, acima da corrente de alimentação. O solvente retém uma concentração substancial à medida que atravessa a fase líquida e é posteriormente retirado na parte inferior da coluna como

produto de fundo, o qual, por fim, é enviado para uma coluna de recuperação para que retorne ao processo.

4.3. SELEÇÃO DO PACOTE TERMODINÂMICO

De acordo com (LABVIRTUAL, 2023), quando não se têm à disposição dados experimentais para a função de energia livre de Gibbs, ou seja, os coeficientes de atividade dos componentes na mistura, é crucial contar com maneiras alternativas que permitam, ao menos, uma estimativa. Com frequência, recorremos aos métodos de contribuição de grupos para essa finalidade. Uma maneira amplamente utilizada para estimar os coeficientes de atividade é o UNIFAC (Universal Functional Activity Coefficient), desenvolvido por Fredenslund et al. em Berkeley (1975).

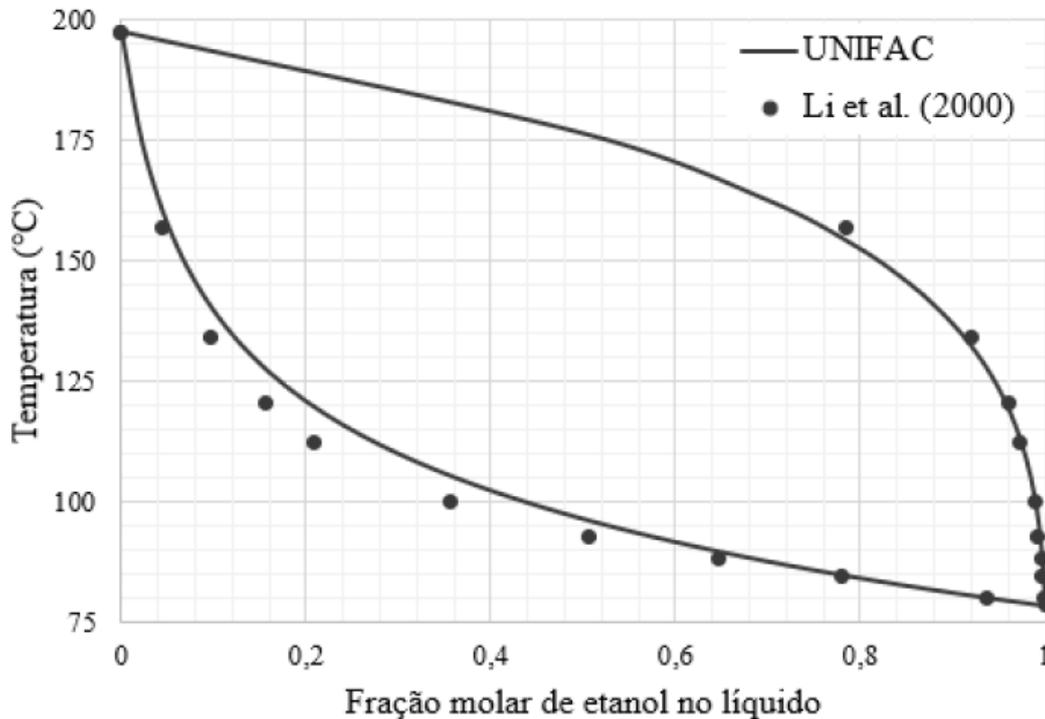
O modelo UNIFAC assume que o coeficiente de atividade de um componente “i” de uma mistura líquida resulta de duas contribuições sendo elas entrópica e residual de acordo com a fórmula apresentado na Equação 1 a seguir:

$$\ln\gamma_i = \ln\gamma_i^C + \ln\gamma_i^R \quad (1)$$

A contribuição γ_i^C entrópica, que diz respeito à diferença de tamanho e forma das moléculas, é calculada a partir das propriedades da substância pura, enquanto a contribuição γ_i^R residual, é calculada a partir das propriedades das misturas, que resulta das forças intermoleculares que dependem das áreas dos grupos moleculares e suas interações. O método UNIFAC parte do princípio de que a mistura líquida pode ser representada como uma solução de unidades estruturais, conhecidas como grupos e subgrupos, em vez de ser tratada como uma combinação direta das próprias moléculas (LABVIRTUAL, 2023).

A utilização do modelo UNIFAC foi validado para a extração azeótropa dos componentes utilizados no trabalho por meio da comparação com dados de equilíbrio na ferramenta "Δ Data" do software ChemSep, feita por Souza et. al. (2020), conforme o diagrama de fases mostrado na Figura 3 a seguir.

Figura 2 - Ajuste do modelo UNIFAC aos dados experimentais de Souza et. al.



Fonte: Souza et. al. 2020.

Como destacado por Dias (2016), um desvio máximo de 6,10% representa um ajuste adequado aos dados experimentais. Sendo os limites obtidos por Souza et. al. (2020) menores que 5,00% e 0,03%, o modelo UNIFAC mostra-se apropriado. Portanto, para o presente trabalho o pacote termodinâmico selecionado é o UNIFAC.

4.4. DADOS UTILIZADOS

Este estudo se baseia na aplicação do modelo termodinâmico UNIFAC, que é empregado na predição dos coeficientes de atividade em diversas misturas líquidas não eletrolíticas, sejam elas binárias ou multicomponentes. É importante destacar que o modelo UNIFAC foi desenvolvido considerando compostos com tamanhos moleculares semelhantes, o que pode resultar em imprecisões quando aplicado a misturas contendo componentes com tamanhos moleculares significativamente distintos, como alertado por Muzenda (2013).

Estudos anteriores, conduzidos por Gil et al. (2014) e Neves et al. (2016), apontaram uma configuração de coluna composta por um total de 18 a 20 estágios, com a alimentação do solvente ocorrendo acima da corrente de etanol hidratado. Neste trabalho, a simulação foi

realizada em uma coluna com 20 estágios, seguindo o modelo proposto por Souza et al. em 2021.

Os parâmetros iniciais apresentados na Tabela 1 a seguir foram ajustados com base na pesquisa conduzida por Gil et al. (2014). A corrente de alimentação da mistura azeotrópica foi introduzida com uma vazão de 100 kmol/h, composta por 88% de etanol e 12% de água em base molar. Quanto à corrente de agente extrator, a vazão de alimentação adotada foi de 80 kmol/h. Os demais parâmetros relevantes para a simulação estão detalhados na Tabela 1.

Tabela 1 - Tabela de parâmetros da simulação das colunas de destilação extrativa

Parâmetros	Valores
Vazão de alimentação do azeótropo (Kmol/h)	100
Vazão de alimentação do agente separador (Kmol/h)	80
Fração molar de etilenoglicol	1
Fração molar de etanol	0,88
Fração molar de água	0,12
Temperatura de alimentação azeótropo (°C)	25
Temperatura de alimentação do agente separador(°C)	70
Razão de refluxo molar na coluna extrativa	1,4
Número de estágios	20
Estágio de alimentação do azeótropo	11
Estágio de alimentação do agente separador	3
Pressão na coluna extrativa (mmHg)	760
Razão de solvente/alimentação (S/F)	0,8

Fonte: autoria própria.

Os dados utilizados para as colunas de recuperação de solvente foram adaptados do trabalho de Gil et al. (2014) e estão dispostos na Tabela 2 a seguir.

Tabela 2 - Tabela de parâmetros da simulação das colunas de recuperação de solvente

Parâmetros	Valores
Número de estágios teóricos para a coluna de recuperação	8
Pressão na coluna de recuperação (mmHg)	150
Estágio de alimentação da mistura água-etilenoglicol	4
Razão de refluxo na coluna de recuperação	0,92

Fonte: autoria próprio.

No âmbito das simulações realizadas, foi identificada a necessidade de fornecer dados específicos a cada software, visando a assegurar o funcionamento adequado das simulações. No caso do DWSIM, um dos parâmetros cruciais que exigiu atenção foi a razão de trabalho do refeedor. Para a primeira coluna, essa razão foi mantida em 1,4, e o mesmo valor foi adotado para o refluxo. Para a segunda coluna, a razão de trabalho do refeedor foi mantida em 0,92, em conformidade com o mesmo princípio.

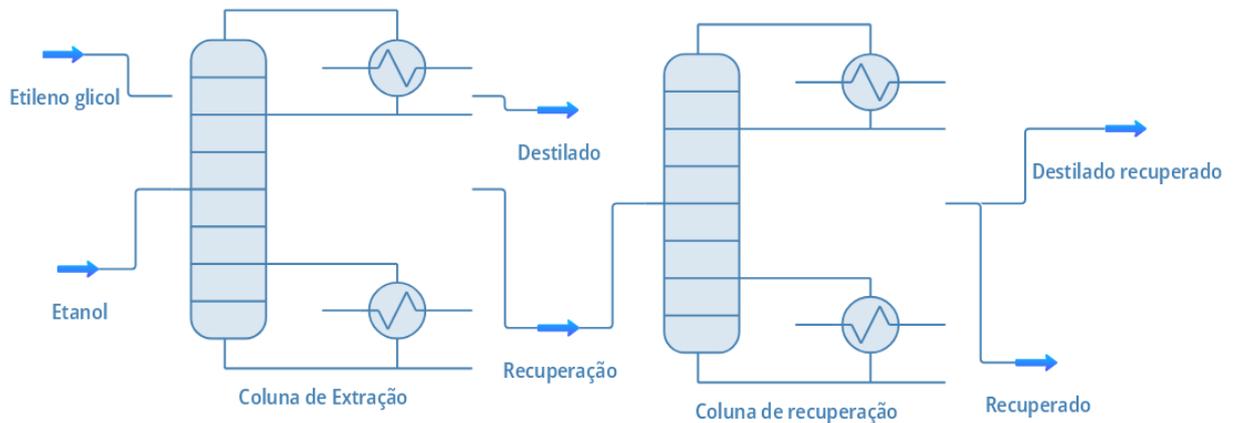
Por sua vez, no software ASPEN PLUS[®], outro parâmetro crítico foi a proporção de destilado. Nesse contexto, para a primeira coluna, essa proporção foi ajustada para 86,8 Kmol/h, enquanto para a segunda coluna, um valor de 10 Kmol/h foi estabelecido. Essas configurações foram fundamentadas nos resultados de estudos anteriores conduzidos por Gil et al. (2014), proporcionando uma base sólida para os modelos de simulação.

A seguir, é apresentado detalhadamente nas Figuras 3 e 4 imagens que exibem os fluxogramas completos do processo. É importante destacar que, durante a condução das simulações, recorreremos a ferramentas específicas em cada um dos softwares utilizados. No DWSIM, empregamos a ChemSep Column para modelar a coluna, enquanto no ASPEN PLUS[®], a coluna RadFract Fract1 foi selecionada para a mesma finalidade.

A utilização da coluna ChemSep Column no DWSIM se deu pela possibilidade de editar os parâmetros pelo acesso a interface CAPE-OPEN de maneira semelhante as referências utilizadas, além de sua resolução mais rápida dos balanços de calor e massa. Já a utilização da coluna RadFract no ASPEN PLUS[®] se deu pelo seu método de simulação rigorosa, aplicado a

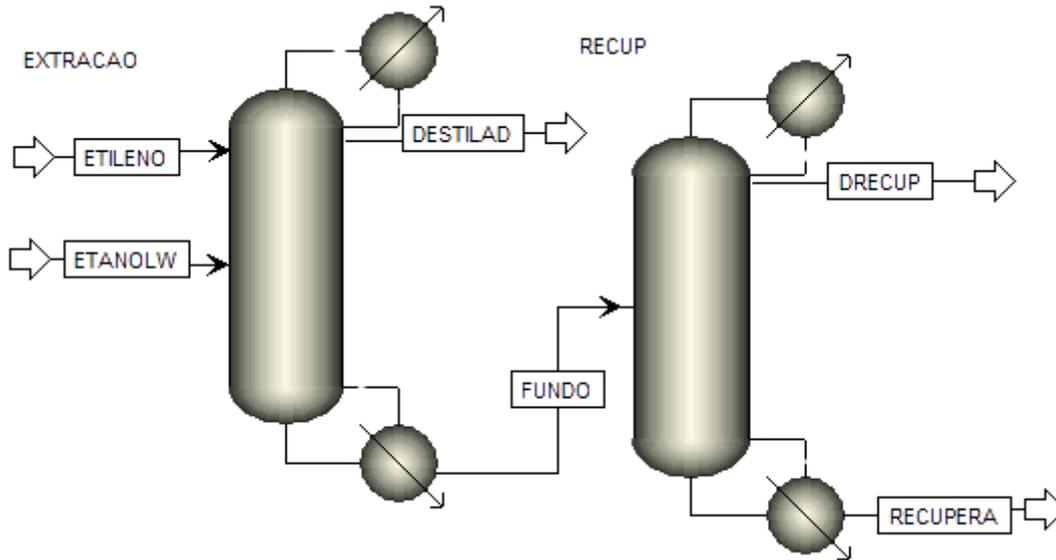
todos os tipos de fracionamento multi-andares de extração líquido-vapor, segundo Bernardo (1998).

Figura 3 - Fluxograma da coluna de destilação extrativa e de recuperação do solvente no DWSIM



Fonte: autoria própria.

Figura 4 – Fluxograma da coluna de destilação extrativa e de recuperação do solvente no ASPEN PLUS®



Fonte: autoria própria.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A comparação entre o DWSIM e o ASPEN PLUS® revela diferenças significativas em termos de aplicação e usabilidade. O DWSIM, um simulador de processos de código aberto, se destaca por sua interface amigável e intuitiva, tornando-o uma escolha atrativa para fins

didáticos e acadêmicos. Sua capacidade de simular uma ampla gama de processos químicos é notável, o que o torna uma ferramenta extensamente adotada por estudantes e profissionais na indústria química, como destacado por Tangsriwong et. al. (2020). A simplicidade e acessibilidade do DWSIM o posicionam de maneira favorável em cenários de menor complexidade.

Por outro lado, o ASPEN PLUS[®], um simulador de processos comercial, oferece uma interface mais avançada e complexa. Sua capacidade de modelagem o tornam uma escolha preferencial para empresas de grande porte envolvidas em projetos e otimização de processos complexos. A riqueza de recursos e a capacidade de representar com fidelidade sistemas industriais de grande envergadura tornam o ASPEN PLUS[®] uma ferramenta de eleição para aplicações de alta complexidade (ASPENTECH[®], 2023).

Ademais, um ponto de interesse observado é a relativa susceptibilidade do DWSIM a interrupções durante a execução das simulações, em contraste com o ASPEN PLUS[®], que demonstrou uma maior robustez operacional. Essa diferença de comportamento pode ser potencialmente problemática, especialmente se o usuário não salvar as alterações em sua simulação com frequência, uma vez que interrupções no software podem resultar na perda de dados e no aumento de tempo dedicado às simulações.

Diante disso, a presente comparação evidencia que o DWSIM e o ASPEN PLUS[®] têm suas funções bem definidos no domínio da simulação de processos. Enquanto o DWSIM se destaca em situações mais simples e desempenha um papel crucial no ensino e em aplicações acadêmicas, como destacados por Ullah et. al. (2022), o ASPEN PLUS[®] destaca-se em ambientes industriais de grande escala, onde a precisão e a complexidade são essenciais para projetos e otimizações complexas.

5.1. SIMULAÇÃO DAS TORRES DE DESTILAÇÃO EXTRATIVA

Como resultados das simulações das colunas de destilação extrativa de ambos os softwares, DWSIM e ASPEN PLUS[®], tem-se os dados apresentados na Tabela 3 a seguir:

Tabela 3 – Principais resultados da torre de destilação extrativa no processo de produção de etanol anidro

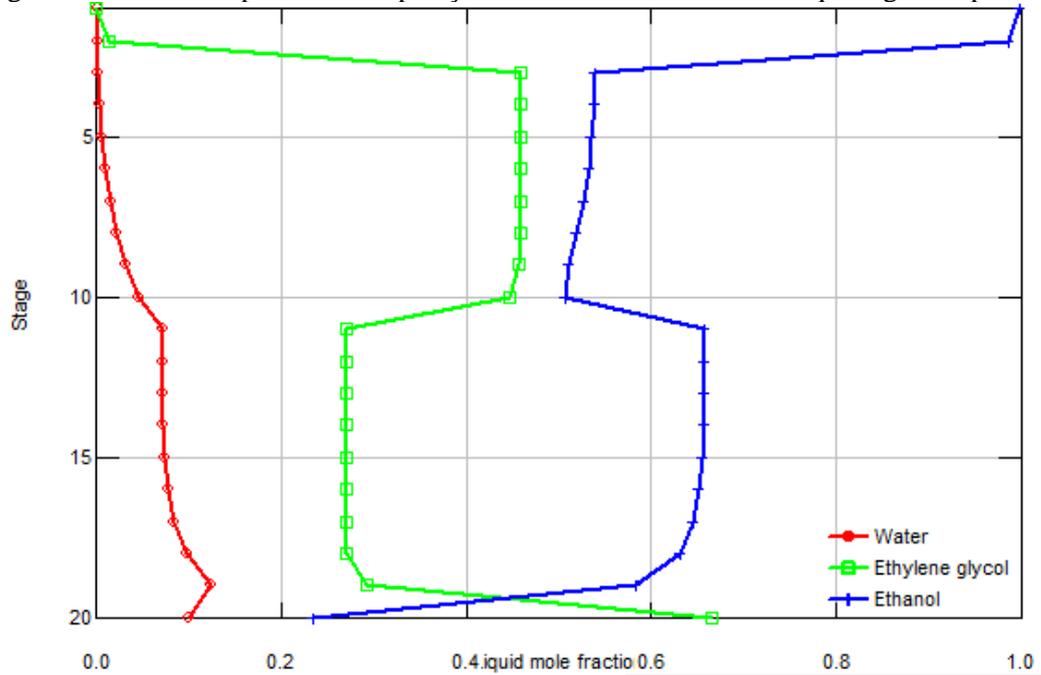
Parâmetros	ASPEN PLUS®	DWSIM
Vazão da corrente de topo da coluna (Kmol/h)	86,8	59,8456
Fração molar de etanol no topo	0,9965	0,9985
Fração molar de água no topo	0,003	0,0013
Fração molar de etilenoglicol no topo	6,20E-05	8,20E-05
Vazão da corrente de fundo da coluna (Kmol/h)	93,2	120,155
Fração molar de etanol no fundo da coluna	0,016	0,235
Fração molar de água no fundo	0,125	0,099
Fração molar de etilenoglicol no fundo	0,858	0,665
Temperatura no topo (°C)	78,29	78,6494
Temperatura no fundo (°C)	153,053	112,298
Pressão no topo (mmHg)	760	760
Pressão no fundo (mmHg)	760	760
Carga térmica do refeedor (kW)	2795,3	2861,9

Fonte: autoria própria.

As Figuras 5 e 6 apresentam a fração molar dos componentes nos diferentes pratos teóricos da torre, dessa forma é possível notar que para ambos os gráficos a partir do ponto 11, prato de alimentação da mistura azeótropa, a concentração dos componentes começa a variar. Para o etilenoglicol, do estágio 11 até o fundo da coluna, sua concentração aumenta após o contato com o etanol e a água, e diminui drasticamente após o estágio 3, prato de alimentação de etilenoglicol, em direção ao topo chegando a próximo de 0. Já para o etanol, sua concentração até o fundo da coluna diminui após o contato com o etilenoglicol e sua concentração até o topo aumenta drasticamente chegando a próximo de 1. A concentração de água sofre um aumento discreto do topo da coluna, onde está próximo de 0, até o ponto 11, tendendo a aumentar até o

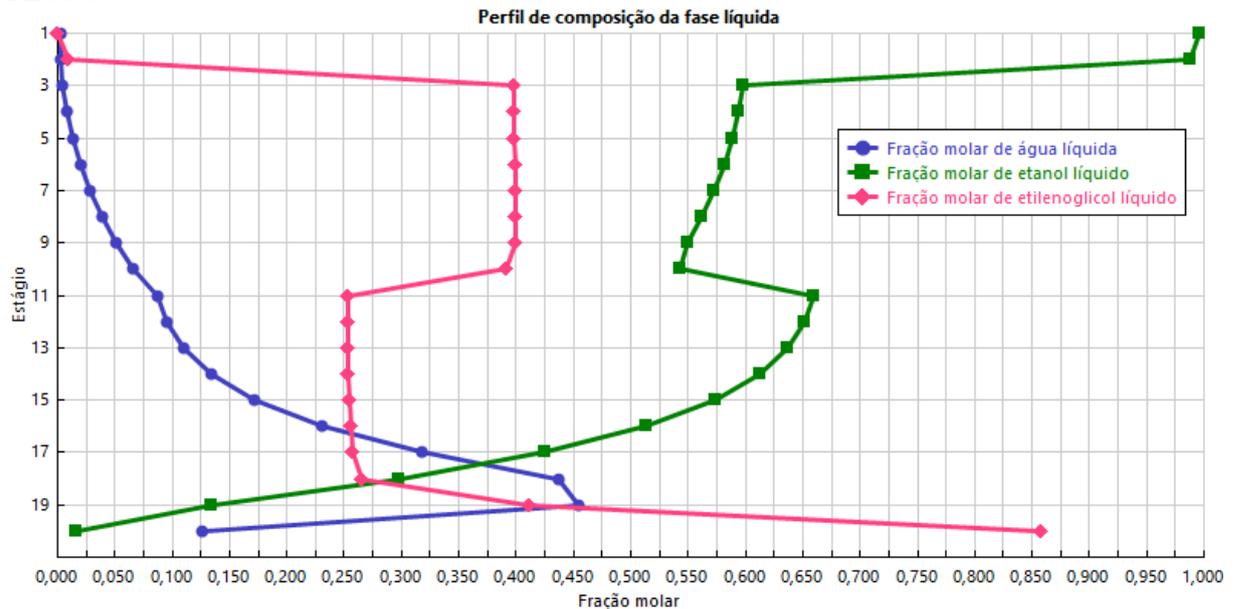
fundo da coluna com uma sútil diminuição próximo do estágio 20 devido à presença do refeedador.

Figura 5 - Gráfico do perfil de composição da torre extrativa da fase líquida gerado pelo DWSIM



Fonte: autoria própria.

Figura 6 - Gráfico do perfil de composição da fase líquida da torre extrativa gerado pelo ASPEN PLUS®



Fonte: autoria própria.

É possível destacar a semelhança entre os gráficos do perfil de composição dos dois softwares, o que demonstra que, embora alguns resultados variem, a simulação seguiu os mesmos padrões e as torres se comportaram de formas similares. Além disso, o ASPEN PLUS® apresenta uma melhor nitidez nos seus gráficos gerados, porém, para fins de estudo, ambos os gráficos servem o mesmo propósito.

A comparação dos resultados obtidos nas simulações de duas torres de destilação extrativa revelou diferenças. No DWSIM, a vazão de topo foi registrada em 59,84 Kmol/h, com uma alta fração molar de etanol no topo (0,9985) e uma fração molar mínima de água (0,0013). A fração molar de etilenoglicol no topo foi de 8,20E-05. No entanto, no ASPEN PLUS®, a vazão de topo foi de 86,8 Kmol/h, com uma fração molar de etanol no topo de 0,9965 e uma fração molar mínima de água (0,003). A fração molar de etilenoglicol no topo foi de 6,20E-05. Essas diferenças representam uma variação de aproximadamente 45% na vazão de topo e cerca de 0,2% na fração molar de etanol no topo entre os dois softwares.

No DWSIM, a vazão de fundo foi de 120,155 Kmol/h, com uma fração molar de etanol no fundo de 0,235 e uma carga térmica do refeedor de 2861,9 kW, enquanto a fração molar de água no fundo foi de 0,099, e a fração molar de etilenoglicol no fundo foi de 0,665. No ASPEN PLUS®, a vazão de fundo foi de 93,2 Kmol/h, com uma fração molar de etanol no fundo de 0,016, e a fração molar de água no fundo foi de 0,125 com uma carga térmica do refeedor de 2795,3 kW. A fração molar de etilenoglicol no fundo foi ligeiramente maior, chegando a 0,858, representando uma diferença de aproximadamente 22,49% na fração molar de etilenoglicol no fundo entre os dois softwares. As temperaturas no topo e no fundo e as pressões em ambos os estágios foram mantidas constantes em 760 mmHg.

Essa comparação ilustra as variações nos resultados obtidos entre os dois softwares, com diferenças de cerca de 45% na vazão de topo, aproximadamente 2,33% de diferença entre a carga térmica do refeedor, cerca de 0,2% na fração molar de etanol no topo e uma diferença de 22,49% na fração molar de etilenoglicol no fundo. A diferença nas temperaturas de topo e fundo corresponderam a 0,46% e 26,63%, respectivamente. Essas divergências podem ser atribuídas às abordagens algorítmicas distintas e às características específicas de cada software, com as maiores diferenças, vazão de topo, fração molar de etilenoglicol no fundo e temperatura no fundo da coluna, relacionadas as adaptações feitas. A diferença de 26,63% na temperatura de fundo da coluna pode ser atribuída a consideração do mesmo valor da razão de refluxo para o refeedor no DWSIM, levando a menores temperaturas, e conseqüentemente, uma menor concentração de etilenoglicol nessa parte da coluna devido a maior proporção dos componentes mais voláteis. Já a atribuição de uma proporção de destilado no ASPEN PLUS®, necessária

para a realização da simulação, justifica essa diferença de 45% na vazão de topo, uma vez que foi determinado um valor fixo a ser atingido pela simulação.

5.2. SIMULAÇÃO DAS TORRES DE RECUPERAÇÃO DO SOLVENTE

Como resultados das simulações das colunas de recuperação do solvente de ambos os softwares, DWSIM e ASPEN PLUS[®], tem-se os dados apresentados na Tabela 4 a seguir:

Tabela 4 - Principais resultados das torres de recuperação de solvente

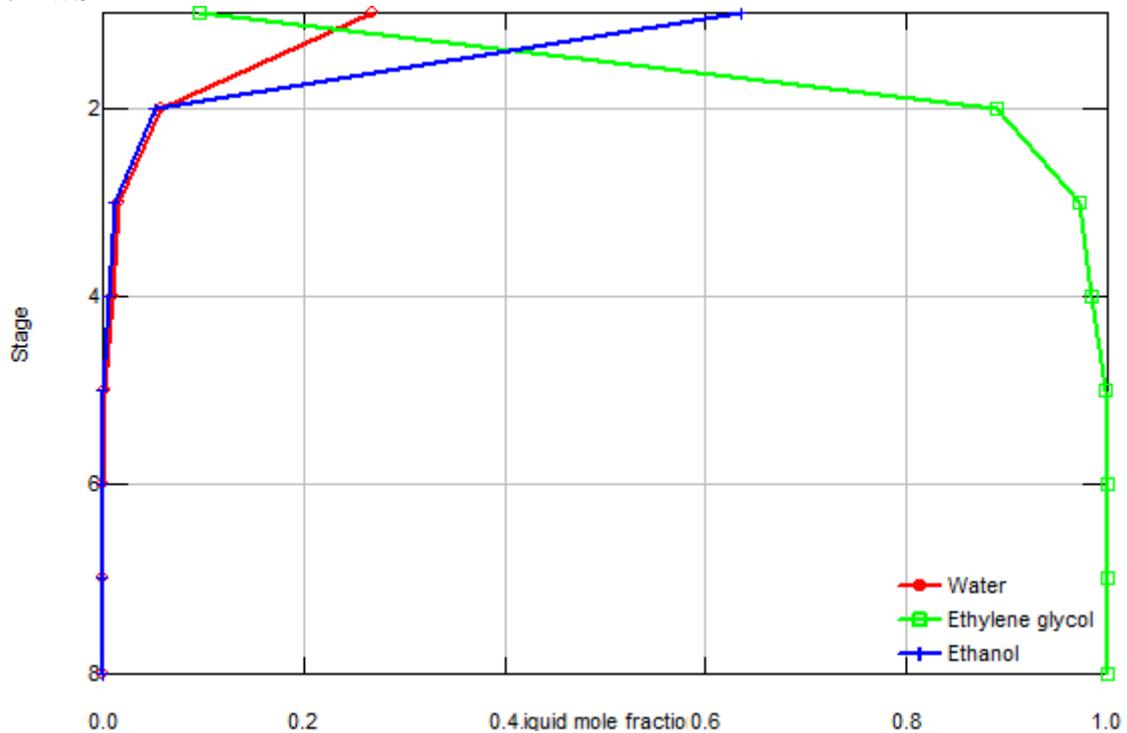
Parâmetros	ASPEN PLUS[®]	DWSIM
Vazão da corrente de topo da coluna (Kmol/h)	10	44,4188
Fração molar de etanol no topo	0,1475	0,6357
Fração molar de água no topo	0,85192	0,26835
Fração molar de etilenoglicol no topo	5,6E-04	0,09589
Vazão da corrente de fundo da coluna (Kmol/h)	83,2	75,7357
Fração molar de etanol no fundo	0,00024	7,5466E-07
Fração molar de água no fundo	0,038	7,467E-09
Fração molar de etilenoglicol no fundo	0,961	0,9999
Temperatura no topo (°C)	47,1687	45,013
Temperatura no fundo (°C)	132,2	149,626
Pressão no topo (mmHg)	150	150
Pressão no fundo (mmHg)	150	150
Carga térmica do refeedor (kW)	122,6	492,1

Fonte: autoria própria.

Os gráficos apresentados nas Figuras 7 e 8 destacam a similaridade dos perfis de concentração dos componentes no decorrer da coluna de recuperação de solvente. O etanol

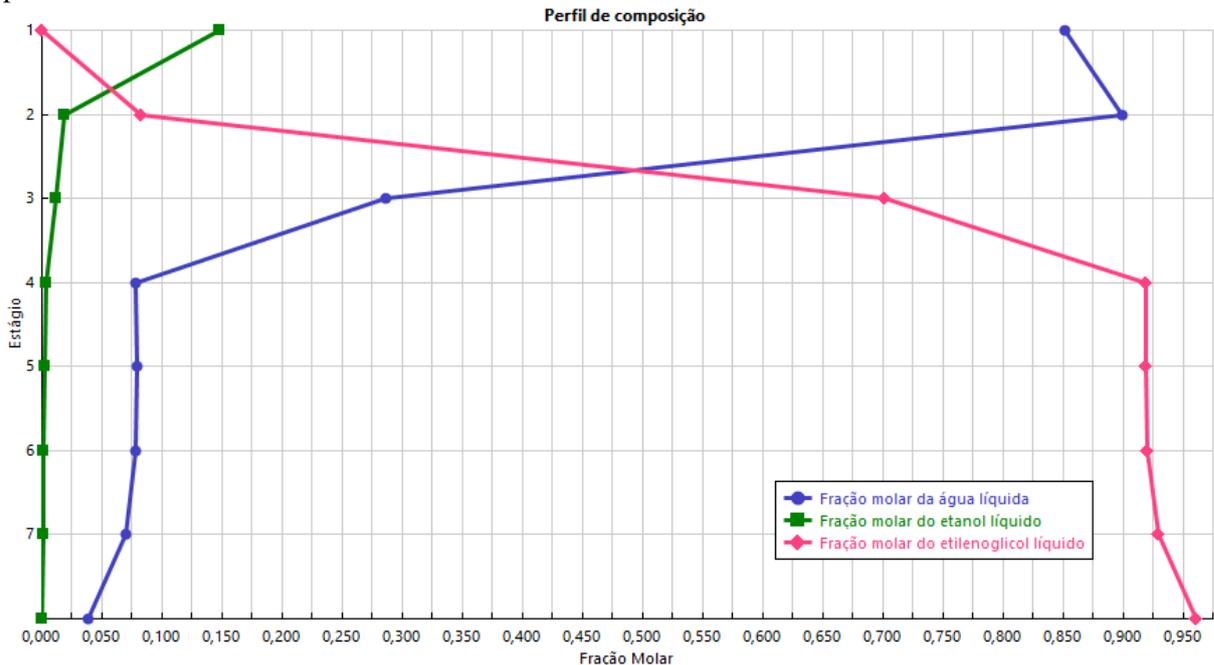
residual, não retirado na coluna de destilação extrativa, se concentra no topo da coluna e apresenta concentração próxima a 0 nos pratos abaixo da bandeja de alimentação 4 devido à temperatura superior ao seu ponto de ebulição. Já o etilenoglicol, por possuir um ponto de ebulição elevado em relação ao etanol e a água, apresenta concentrações próximas a 0 no topo da coluna e concentrações próximas a 1 no fundo da coluna, aumentando drasticamente a partir do prato de alimentação 4. Para a água, sua concentração aumenta em direção ao topo da coluna e diminui em direção ao fundo para valores próximos de 0 a partir do estágio 4.

Figura 7 - Gráfico do perfil de composição da fase líquida da torre de recuperação do solvente gerado pelo DWSIM



Fonte: autoria própria.

Figura 8 - Gráfico do perfil de composição da fase líquida da torre de recuperação do solvente gerado pelo ASPEN PLUS®



Fonte: autoria própria.

Como mencionado anteriormente, além do aspecto visual entre os gráficos gerados por ambos os softwares, a similaridade do perfil de composição das torres de recuperação se manteve, o que mostra que, para fins de estudo ou atividades acadêmicas, ambos os softwares possuem ferramentas adequadas para análises dos dados.

Já para as colunas de recuperação, tem-se uma discrepância nos resultados das simulações entre o DWSIM e o ASPEN PLUS®. No DWSIM, a vazão de topo foi registrada em 44,41 Kmol/h, apresentando uma fração molar de etanol no topo de 0,63, com a fração molar de água no topo alcançando 0,268, e a fração molar de etilenoglicol atingindo 0,09589. A vazão de fundo no DWSIM foi de 75,73 Kmol/h, com uma fração molar de etanol no fundo de 7,54E-07, uma fração molar de água no fundo de 7,467E-09 e uma fração molar de etilenoglicol no fundo de 0,9999 com uma carga térmica do refeedor 492,1 kW. As temperaturas no topo e no fundo foram de 45,013°C e 149,626°C, respectivamente, com pressões constantes de 150 mmHg tanto no topo quanto no fundo.

Por outro lado, o ASPEN PLUS® apresentou uma vazão de topo de 10 Kmol/h, com uma fração molar de etanol no topo de 0,1475 e uma fração molar de água no topo de 0,85192. A fração molar de etilenoglicol no topo foi de 5,6E-04. A vazão de fundo no ASPEN PLUS® foi de 83,2 Kmol/h, com uma fração molar de etanol no fundo de 0,00024, uma fração molar de água no fundo de 0,038, e uma fração molar de etilenoglicol no fundo de 0,961 com uma

carga térmica do refeedor de 122,6 kW. As temperaturas no topo e no fundo foram de 47,1687°C e 132,2°C, respectivamente, com pressões constantes de 150 mmHg tanto no topo quanto no fundo.

Essa comparação evidencia uma variação significativa de aproximadamente 77,8% na vazão de topo, cerca de 79,6% na fração molar de etanol no topo e uma diferença de aproximadamente 3,89% na fração molar de etilenoglicol no fundo entre os dois softwares. A discrepância nas temperaturas de topo e fundo corresponderam a 4,57% e 11,65%, respectivamente e de 75,08% na carga térmica do refeedor. No entanto, a diferença na vazão de topo e no fundo das colunas de recuperação do solvente também está associada a coluna de destilação extrativa, uma vez que, por conta do DWSIM apresentar uma menor vazão no topo, ele apresenta uma maior vazão de fundo com uma concentração maior de etanol e menor de etilenoglicol.

Desse modo, a vazão de entrada na coluna de recuperação de solvente, além das concentrações dos componentes, apresentam diferenças que justificam a maior vazão de saída no topo apresentada pelo DWSIM. Consoantemente, a diferença na fração molar de etanol no topo da coluna de recuperação está associada a maior fração molar de etanol no fundo da coluna de extração do DWSIM devido a suposição da carga térmica discutida anteriormente. No mesmo sentido, como o refeedor da coluna de recuperação do DWSIM possui um maior volume, além de maior fração molar de etanol para evaporar, a temperatura de fundo dessa coluna tende a aumentar, justificando assim a diferença encontrada na temperatura de fundo entre as colunas.

Ademais, com uma vazão maior de entrada na coluna de destilação do DWSIM, contendo uma fração maior de etanol e por conta da utilização do mesmo valor de razão de refluxo para o refeedor, uma diferença no valor da carga térmica do refeedor entre os dois programas é de ser esperada. Dessa forma, demais divergências podem ser parcialmente atribuídas às adaptações feitas no trabalho de Gil et al. (2014) para as colunas de recuperação de solvente, uma vez que, seu trabalho foi feito com base em dados experimentais para as interações binárias dos componentes, além de utilizar um pacote termodinâmico diferente (NRTL), e foi realizado no simulador ASPEN PLUS® com uma mistura de dois componentes de separação, etilenoglicol e glicerol.

Com isso, é possível afirmar que a utilização do software gratuito de simulação de processos, DWSIM, é uma escolha válida para a realização de estudos acadêmicos e simulações menos complexas, podendo ser usado para reduzir custos de pesquisa e como material didático

aos estudantes de graduação, oferecendo uma interface mais intuitiva e uma maior liberdade para modificação por conta do seu caráter *open source*.

6. CONCLUSÃO

Nesse sentido, devido a ampla variedade de softwares disponíveis na atualidade, a comparação entre dois deles, entre eles um comercial e outro gratuito, pode vir a auxiliar os recém ingressados nos cursos de engenharia química que procuram uma ferramenta para seus estudos e pesquisa. Sendo assim, foi realizado a simulação do processo de destilação extrativa do etanol anidro, utilizando etilenoglicol como agente extrator, seguido por uma torre de recuperação de solvente nos softwares DWSIM e ASPEN PLUS[®], tendo por objetivo específico determinar se é possível utilizar o software gratuito DWSIM em pesquisas e trabalhos acadêmicos sem perdas na qualidade no lugar de um software comercial como o ASPEN PLUS[®].

Desse modo, diante dos resultados apresentados, é possível notar que mesmo com as divergências apresentadas nos resultados, muitas delas justificadas pelas adaptações feitas durante o trabalho, os gráficos de composição ao longo da coluna apresentaram a mesma tendência, ressaltando assim que as maiores diferenças, entre elas a vazão e concentração no topo e no fundo de ambas as colunas, tanto de recuperação quanto de destilação extrativa, ocorrem por diferenças na forma em que os softwares trabalham, sendo a adaptação direta e considerações feitas nesse trabalho os principais responsáveis por essas divergências, concluindo portanto que o software gratuito DWSIM pode ser utilizado para estudos e trabalhos acadêmicos sem perdas na qualidade. Sendo assim, pela comparação entre os softwares gratuito e comercial, respectivamente, DWSIM e ASPEN PLUS[®], em um processo de destilação extrativa do etanol, utilizando etilenoglicol como solvente, com base em dados da literatura, é possível afirmar que todos os objetivos desse trabalho foram atingidos.

Ademais, durante o desenvolvimento deste estudo, ficou evidente que a utilização do software ASPEN PLUS[®], embora mais complexa em sua natureza, demonstrou fluidez superior quando comparada à do DWSIM. Isso se deve, em grande parte, à riqueza da biblioteca de dados disponíveis no ASPEN PLUS[®], a qual abrange um amplo espectro de componentes químicos e propriedades termodinâmicas, otimizando a realização das simulações. Em contraste, o DWSIM demanda a inserção de um conjunto considerável de dados, muitos dos quais não se encontram disponíveis em seu banco de dados padrão. Essa necessidade de dados

adicionais foi particularmente notável durante a escolha do tópico de destilação extrativa com etilenoglicol, uma vez que este tema possui uma rica literatura disponível, permitindo suplementar as informações essenciais para a condução das simulações.

SUGESTÕES FUTURAS

Como sugestão para futuros trabalhos tem-se a realização de um balanço de energia nas duas colunas, de destilação extrativa e recuperação do solvente, do ASPEN PLUS® para a determinação da razão de trabalho do refeedor, para que seja possível inserir o mesmo valor no DWSIM de modo que os dois softwares estejam nas mesmas condições para a realização dessa comparação.

Ademais, outra sugestão é da realização das mesmas simulações adaptando a razão de refluxo do refeedor do DWSIM para que seja alcançado os mesmos valores de vazão do ASPEN PLUS®, dessa forma seria possível comparar como os simuladores diferenciam um do outro nas concentrações e energia necessária para alcançar determinada vazão.

Além disso, a realização dessas comparações utilizando outros pacotes termodinâmicos, como o NRTL, utilizando valores de interações binárias experimentais pode gerar resultados importantes na análise da robustez do DWSIM.

Por fim, a comparação utilizando a versão comercial do software DWSIM pode enriquecer o trabalho pela possibilidade de utilizar outras ferramentas não disponíveis em sua versão gratuita, sendo possível comparar a diferença com outros softwares comerciais da área como o próprio ASPEN PLUS® junto com sua versão gratuita.

REFERÊNCIAS

ASPEN TECHNOLOGY. **Aspen Plus User Guide**. Cambridge, MA, USA: Aspen Technology, Inc., 2000.

ASPENTECH®: Over 40 Years of Innovation. AspenTech. Disponível em: <https://www.aspentech.com/en/about-aspentech/history>. Acesso em: 15 nov. 2023.

BERNARDI-GIL, Gabriela. **BREVE INTRODUÇÃO AO ASPEN PLUS**. Instituto Superior Técnico. Disponível em: <http://web.ist.utl.pt/gbernardo.gil/ebi/Aspen/ASPEN6.pdf>. Acesso em: 1 nov. 2023.

BIEGLER, Lorenz T.; GROSSMANN, Ignacio E.; WESTERBERG, Arthur W. **Systematic methods for chemical process design**. 1997.

BLACK, C. and Distler, D., **Dehydration of aqueous ethanol mixtures by extractive distillation**. Extractive and azeotropic distillation. Advances in Chemistry Series, 115, p. 1-15 1972.

BLACK, C. **Distillation modeling of ethanol recovery and dehydration processes for ethanol and gasohol**. Chemical Engineering Process, p. 78-85, 1980.

CASTRO, E.; TEIXEIRA, N.; EMMI, M. **Simulação do processo de produção de biodiesel de óleo de palma utilizando os softwares ASPEN HYSYS e DWSIM**. 14 Encontro de Profissionais de Química de Amazônia, 2015, 796-803.

CENTRO ACADÊMICO DE ENGENHARIA QUÍMICA – UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ. **Simuladores de processos**. LinkedIn. Disponível em: <https://www.linkedin.com/pulse/simuladores-de-processos-caeq-uem/?originalSubdomain=pt>. Acesso em: 15 nov. 2023.

CHANTASIRIWAN, Somchart. **Simulation and Optimization of Vapor Absorption Refrigeration System Using Dwsim**. Chemical Engineering Transactions, v. 100, p. 613-618, 2023.

DIAS, M. O. S. **Simulação do processo de produção de etanol a partir do açúcar e do bagaço, visando a integração do processo e a maximização da produção de energia excedentes do bagaço**. Campinas, 2008. Tese de Doutorado. [sn].

DIAS, Rafael Macedo. **Estudo de equilíbrio líquido-vapor de soluções hidroetanólicas contendo frutose**. 2016.

DOHERTY, Michael F.; MALONE, Michael F. **Conceptual design of distillation systems**. (No Title), 2001.

FIGUEIRÊDO, Marcella Feitosa de *et al.* **Obtenção de etanol anidro via destilação extrativa: simulação e otimização**. 2009.

GIL, I. D.; GARCÍA, L. C.; RODRÍGUEZ, G. J. B. J. **Simulation of ethanol extractive distillation with mixed glycols as separating agent**. Brazilian Journal of Chemical Engineering, v. 31, p. 259-270, 2014.

JARDIM, H. A.; MOURA, L. F.; CRUZ, A. J. **Produção de etanol anidro via destilação extrativa utilizando glicerol**. Blucher Chemical Engineering Proceedings, v. 1, n. 2, p. 14972-14979, 2015.

KAMINSKI, Wladyslaw; MARSZALEK, Joanna. **Pervaporation for drying and dewatering**. *Drying technology*, v. 24, n. 7, p. 835-847, 2006.

KUJAWSKI, W. **Application of pervaporation and vapor permeation in environmental protection**. *Polish Journal of Environmental Studies*, v. 9, n. 1, p. 13-26, 2000.

MARILLER, Charles. **Destilación y Rectificación de los Líquidos industriales**. Librería Hachette, 1950.

LEE, F.; GENTRY, J. **Don't overlook extractive distillation**. *Chemical Engineering Progress*, p.56-64 (1997).

MCKETTA, J. J.; MUJUMDAR, A. S. *Unit Operations Handbook*. Volumes 1 and 2. **Drying Technology**, v. 11, n. 7, p. 1909-1910, 1993.

MUZENDA, Edison. **From UNIQUAC to modified UNIFAC Dortmund: a discussion**. 2013.

NEVES, T. G. *et al.* **Obtenção de bioetanol anidro via destilação extrativa utilizando glicerol e etilenoglicol como solventes**. In: XXI Congresso brasileiro de engenharia química. 2016.

PEREIRA, Ana. **AVALIAÇÃO DE SIMULADORES DE PROCESSO LIVRES DE LICENÇA PARA A SIMULAÇÃO DE PROCESSOS TÍPICOS DE ENGENHARIA QUÍMICA**. In: 27º ENCONTRO ANUAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA 7º ENCONTRO ANUAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA JÚNIOR. Maringá, 2018.

PERRY, R.H.; GREEN, D.W.; SOUTHARD, M.Z. **Perry's Chemical Engineering Handbook**. United States of America. McGraw-Hill. 9th Ed. 2018.

PORTAL LABORATÓRIO VIRTUAL DE PROCESSOS QUÍMICOS. **MODELOS USADOS NA SIMULAÇÃO INTERACTIVA**. Labvirtual. Disponível em: http://labvirtual.eq.uc.pt/siteJoomla/index.php?option=com_content&task=view&id=197&Itemid=362#:~:text=O%20método%20UNIFAC%20supõe%20que,uma%20mistura%20das%20próprias%20moléculas. Acesso em: 1 nov. 2023.

SILVA, Fernando Luiz Gomes da *et al.* **Valorização da glicerina como solvente da destilação extrativa para separação de azeótropo etanol-água**. 2009.

SOUZA, Alvaro Eduardo Costa *et al.* **Simulação do processo de destilação extrativa para produção de etanol anidro utilizando etilenoglicol como agente de separação**. *Research, Society and Development*, v. 10, n. 4, p. e45610414228-e45610414228, 2021.

TANGSRIWONG, Kwanchanok *et al.* **Modeling of chemical processes using commercial and open-source software: A comparison between Aspen Plus and DWSIM.** In: IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. IOP Publishing, 2020. p. 012057.

ULLAH, Kaleem; ZEESHAN UL HAQ, Muazzam Arshad. **Comparative analysis of chemical process simulation using open source and commercial software.** SUSTAINABILITY IN PROCESS INDUSTRY (SPI-2022) October 19-20, 2022, p. 116, 2022.

VAN NESS, H.C., SMITH, J. M.; ABBOTT, M. M. **Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics.** 9^a ed. New York: MacGraw-Hill LLC, 2021.

APÊNDICE – Simulação das torres de recuperação do solvente em mesmas condições operacionais

Devido as diferenças encontradas nos valores da torre de recuperação de solvente foi realizado uma nova simulação em ambos os softwares utilizando os mesmos valores de entrada e saída de topo e fundo da coluna de recuperação de solvente do ASPEN PLUS[®] conforme mostra a Tabela 5 a seguir.

Tabela 5 - Parâmetros para simulação da torre de recuperação de solvente em condições iguais nos dois softwares

Parâmetros	Valores
Número de estágios teóricos para a coluna de recuperação	8
Pressão na coluna de recuperação (mmHg)	150
Estágio de alimentação da mistura água-etilenoglicol	4
Razão de refluxo na coluna de recuperação	0,92
Vazão de entrada (kmol/h)	93,2
Vazão de destilado (kmol/h)	10
Fração molar de etanol na entrada	0,016
Fração molar de etilenoglicol na entrada	0,858
Fração molar de água na entrada	0,126

Fonte: Autoria própria.

É importante destacar que para atingir esse valor de vazão de destilado no DWSIM foi utilizado a razão de trabalho do refeedor em 0,405. Sendo assim, os resultados obtidos para a nova simulação em condições iguais estão apresentados na Tabela 6 a seguir.

Tabela 6 - Resultado das simulações das torres de recuperação de solvente em condições iguais nos dois softwares

Parâmetros	ASPEN PLUS®	DWSIM
Vazão da corrente de topo da coluna (Kmol/h)	10	10
Fração molar de etanol no topo	0,1475	0,149
Fração molar de água no topo	0,85192	0,851
Fração molar de etilenoglicol no topo	5,6E-04	6,67E-06
Vazão da corrente de fundo da coluna (Kmol/h)	83,2	83,2
Fração molar de etanol no fundo	0,00024	5,26-05
Fração molar de água no fundo	0,038	0,038
Fração molar de etilenoglicol no fundo	0,961	0,961
Temperatura no topo (°C)	47,1687	47,1709
Temperatura no fundo (°C)	132,2	132,2
Pressão no topo (mmHg)	150	150
Pressão no fundo (mmHg)	150	150
Carga térmica do refeedor (kW)	122,6	158,7

Fonte: Autoria própria.

Dessa forma, é possível perceber que quando operados nas mesmas condições ambos os softwares apresentaram valores próximos, ressaltando assim que o software gratuito DWSIM pode ser utilizado como alternativa aos softwares comerciais para a realização de trabalhos acadêmicos em casos de simulações mais simples, desde que as informações utilizadas nas simulações sejam condizentes e realizadas nas mesmas condições, sendo as adaptações feitas no trabalho as maiores fontes de erros.