

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA – UNESP
Instituto de Química - Câmpus de Araraquara

MARIANA TATAGIBA

**Otimização de processo alternativo para refino de etanol combustível com CO_2
como gás de arraste**

Araraquara
2026

MARIANA TATAGIBA

**OTIMIZAÇÃO DE PROCESSO ALTERNATIVO PARA REFINO DE ETANOL
COMBUSTÍVEL COM CO₂ COMO GÁS DE ARRASTE**

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado à Universidade Estadual
Paulista (UNESP), Instituto de Química,
Araraquara, para obtenção do título de
Bacharel em Engenharia Química.

Orientador(a): Prof. Dr. Elias de
Souza Monteiro Filho

Araraquara

2026

T216o	Tatagiba, Mariana Otimização de processo alternativo para refino de etanol combustível com CO₂ como gás de arraste / Mariana Tatagiba. -- Araraquara, 2026 62 p. : tabs. Trabalho de conclusão de curso (Bacharelado - Engenharia Química) - Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química, Araraquara Orientador: Elias de Souza Monteiro Filho 1. Alcoóis. 2. Termoquímica. 3. Operações unitárias (Engenharia química). I. Título.
-------	--

MARIANA TATAGIBA

**OTIMIZAÇÃO DE PROCESSO ALTERNATIVO PARA REFINO DE ETANOL
COMBUSTÍVEL COM CO₂ COMO GÁS DE ARRASTE**

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado à Universidade Estadual Paulista
(UNESP) Instituto de Química, Araraquara, para
obtenção do título de Bacharel em Engenharia
Química.

Data da defesa: 30/06/2026

Banca Examinadora:

Documento assinado digitalmente
 **ELIAS DE SOUZA MONTEIRO FILHO**
Data: 10/07/2026 14:06:30-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Elias de Souza Monteiro Filho

Documento assinado digitalmente
 **GEISA ALBINI**
Data: 13/07/2026 08:21:49-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dra. Geisa Albini

Documento assinado digitalmente
 **ERICA REGINA FILLETTI NASCIMENTO**
Data: 13/07/2026 07:43:54-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Érica Regina Filletti Nascimento

Dedico este trabalho às mulheres
da minha vida.

AGRADECIMENTOS

Ao Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC) que me proporcionou o auxílio no desenvolvimento do trabalho.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Elias de Souza Monteiro Filho, por me apoiar e dar todas as ferramentas que fizeram essa tese virar realidade.

À minha Unesp Araraquara, por me tornar Engenheira Química, mulher e me mostrar que o mundo é muito maior do que eu jamais poderia imaginar.

À minha mãe, por ser meu maior exemplo de propósito, sucesso e amor.

Ao meu pai e Igor por mostrarem ao mundo como bons homens ainda existem.

Aos meus amigos de Barão (Iohan, Rafaella e Virginia) por estarem do meu lado nas minhas maiores aventuras que é crescer.

Ao meu irmão, Leonardo, por me ensinar a ter coragem para questionar e explorar o mundo.

Ao amor da minha vida, Gabriela. Por suas fortes e amorosas palavras. Seu existir é meu farol guia.

Por fim, a mim mesma, por não aceitar atalhos.

“Quando me dizem: Vem por aqui!
Eu olho-os com olhos lassos.
Há, nos olhos meus, ironias e cansaços.
E cruzo os braços e nunca vou por ali,
A minha glória é esta.
Criar desumanidades,
Não acompanhar ninguém.
Que eu vivo com o mesmo sem-vontade,
Com que rasguei o ventre à minha mãe.
Não, não vou por aí!
Só vou por onde me levam meus próprios
passos.”

(Maria Bethânia, 2016.)

RESUMO

A produção de etanol combustível é tradicionalmente realizada por destilação, processo associado a elevado consumo energético. Neste trabalho, avaliou-se a viabilidade técnica de um processo alternativo de purificação de etanol utilizando dióxido de carbono como gás de arraste. O sistema foi modelado nos *softwares* DWSIM e ChemSep, contemplando etapas de absorção, esgotamento, retificação, recuperação térmica e reciclo de dióxido de carbono. A modelagem termodinâmica empregou o modelo NRTL associado à equação de Hayden-O'Connell e à Lei de Henry para representação do equilíbrio de fases. Os resultados indicaram que o processo produziu etanol hidratado com fração mássica de etanol de 93,0%, acima do mínimo de 92,5% exigido pela legislação brasileira (BIASI et al., 2021). A recuperação global de etanol atingiu 99,97%, com perdas de apenas 0,03% para a vinhaça e inferiores a 0,01% para a corrente de purga. A integração térmica permitiu recuperar aproximadamente 22,8 MW de energia, reduzindo a necessidade de aquecimento externo. A razão volumétrica entre vinhaça e etanol foi de 8,6 L/L, valor inferior à faixa de 10 a 13 L/L normalmente observada em processos convencionais de destilação (BATISTA et al., 2012). A utilização de dióxido de carbono como gás de arraste constitui uma alternativa tecnicamente viável para a purificação de etanol, apresentando desempenho comparável ou superior ao processo convencional descrito por Bessa et al. (2012): fração mássica de etanol equivalente (93,0% frente a ~93,0%) e recuperação global de etanol superior (99,97% frente a 99,20%).

Palavras-chave: etanol combustível; dióxido de carbono; simulação de processos; purificação de etanol; recuperação de etanol.

ABSTRACT

Fuel ethanol production is traditionally based on distillation, a process associated with high energy consumption. This study evaluated the technical feasibility of an alternative ethanol purification process using carbon dioxide as a stripping gas. The process was modeled using DWSIM and ChemSep *software* and included absorption, stripping, rectification, heat recovery, and carbon dioxide recycle stages. Thermodynamic calculations were performed using the NRTL model combined with the Hayden–O'Connell equation and Henry's law to describe phase equilibrium behavior. Simulation results showed that the proposed configuration produced hydrous ethanol with an ethanol mass fraction of 93.0%, exceeding the 92.5% minimum required by Brazilian regulations (BIASI et al., 2021). Overall ethanol recovery reached 99.97%, with losses of only 0.03% in vinasse and less than 0.01% in the recycle purge stream. Heat integration enabled the recovery of approximately 22.8 MW of thermal energy, reducing the demand for external heating. The vinasse-to-ethanol volumetric ratio was 8.6 L/L, lower than the 10–13 L/L range typically reported for conventional distillation processes (BATISTA et al., 2012). The results indicate that carbon dioxide stripping is a technically viable alternative for ethanol purification, showing performance comparable to or better than the conventional process reported by Bessa et al. (2012): an equivalent ethanol mass fraction (93.0% versus ~93.0%) and a higher overall ethanol recovery (99.97% versus 99.20%).

Keywords: fuel ethanol; carbon dioxide; process simulation; ethanol purification; ethanol recovery.

Sumário

1 INTRODUÇÃO	10
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	13
2.1 PRODUÇÃO DE ETANOL NO BRASIL	13
2.2 PROCESSO CONVENCIONAL DE DESTILAÇÃO ALCOÓLICA	14
2.3 PROCESSO ALTERNATIVO: ABSORÇÃO COM CO ₂	16
2.3.1 Fundamentos da absorção e esgotamento	17
2.3.2 Mecanismo de seletividade do gás de arraste	18
2.3.3 Disponibilidade e recirculação do gás de arraste	18
2.4 SIMULAÇÃO DE PROCESSOS	19
2.5 MODELAGEM TERMODINÂMICA	20
2.5.1 Equilíbrio líquido-vapor e seus desafios	21
2.5.2 Aplicação na fase vapor	22
2.5.3 Aplicação na fase líquida	23
2.5.4 Lei de Henry e CO ₂ supercrítico	24
3 METODOLOGIA	26
3.1 MODELAGEM TERMODINÂMICA	26
3.2 DESENVOLVIMENTO DA SIMULAÇÃO	26
3.3 COMPONENTES E CORRENTES DE ALIMENTAÇÃO	29
3.4 MODELAGEM TERMODINÂMICA	30
3.5 CONFIGURAÇÕES DO PROCESSO	31
3.5.1 Critérios de desempenho do processo	33
3.5.2 Critérios de consistência numérica	33
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	35
4.1 MODELAGEM TERMODINÂMICA	35
4.1.1 Parâmetros NRTL	36
4.1.2 Parâmetros da lei de Henry	39

4.2 CONSISTÊNCIA DA SIMULAÇÃO	40
4.3 DESEMPENHO DA SIMULAÇÃO	41
4.3.1 Alimentação gerada pela fermentação	41
4.3.2 A concentração progressiva nas colunas	44
4.3.3 O produto final	52
4.3.4 A saída do processo pela vinhaça	53
4.3.5 Fechamento do reciclo de CO ₂	56
4.4 Desempenho em perspectiva	58
5 CONCLUSÃO	59
6 REFERÊNCIAS	61

1 INTRODUÇÃO

A produção de etanol combustível no Brasil representa uma das trajetórias mais consolidadas da bioenergia mundial. Desde a criação do Programa Nacional do Álcool (Proálcool) em 1975, o país construiu uma cadeia sucroalcooleira que hoje responde por volumes superiores a 37 bilhões de litros anuais, posicionando o Brasil como segundo maior produtor global do biocombustível (EPE, 2025). Esse protagonismo, no entanto, é crescentemente acompanhado de uma demanda que vai além do volume produzido: a necessidade de tornar esse processo ambientalmente mais responsável e energeticamente mais eficiente.

Relatórios do IPCC (2023) e da IEA (2023) apontam que a descarbonização do setor energético é condição necessária para a contenção do aquecimento global, e que biocombustíveis como o etanol desempenham papel estratégico nessa transição. Sendo assim, otimizar as etapas internas do processo de refino não é apenas uma questão de competitividade econômica, mas uma responsabilidade que acompanha a posição de referência que o Brasil ocupa nesse setor.

O principal gargalo energético do refino é um desafio constantemente abordado na indústria: a destilação alcoólica, operação unitária dominante na concentração do etanol, é responsável por aproximadamente 49% do consumo energético mundial de processos de separação (BIASI et al., 2021) e representa a etapa de maior demanda energética em toda a produção de bioetanol. No Brasil, a configuração das colunas de destilação permanece essencialmente inalterada há décadas (BIASI et al., 2021). Apesar de alternativas investigadas na literatura como integração energética de duplo efeito e compressão mecânica de vapor demonstrem potencial expressivo de redução de consumo, esbarram em investimentos de capital elevados e maior complexidade operacional (BORGES FILHO; DETTMER, 2025). Há, portanto, um espaço real e relevante para abordagens que combinem ganho energético com viabilidade de implementação.

É nesse espaço que se encaixa a proposta central deste trabalho. O uso do gás carbônico (CO_2) como gás de arraste na etapa de concentração inicial do etanol, substituindo a primeira coluna de destilação por uma coluna de absorção, representa uma alternativa tecnicamente fundamentada e com um diferencial sustentável importante. O CO_2 necessário pode ser obtido diretamente da fermentação alcoólica, etapa anterior ao refino, onde é gerado em larga escala e atualmente descartado sem

aproveitamento nas usinas brasileiras (SONEGO et al., 2014). A produção de 1 litro de etanol é acompanhada pela geração de aproximadamente 425 litros de CO_2 nas condições típicas do processo (SONEGO et al., 2014), o que transforma um resíduo de processo em potencial insumo de operação. Rodrigues et al. (2025) demonstraram que sistemas fechados com recirculação desse CO_2 atingem eficiência de recuperação de etanol de 98,3%, valor comparável ao de instalações industriais convencionais, porém sem dependência de gás externo.

Tal proposta do presente trabalho nasce de uma questão central: Como provar, por meio de modelagem termodinâmica e simulação computacional, que o esgotamento com CO_2 é uma alternativa viável e otimizável ao processo convencional de destilação do etanol combustível? A simulação computacional assume papel central nessa investigação por razões que vão além da praticidade. O uso de simuladores de código aberto neste trabalho, o DWSIM, democratiza o acesso à análise de processos, elimina barreiras de licenciamento, permite ampla reprodutibilidade dos resultados e abre caminho para extensões, testes paramétricos e variações de configuração sem qualquer custo financeiro adicional.

Esse caráter aberto não se limitou à escolha do software. O desenvolvimento deste trabalho foi apoiado por um ecossistema de conhecimento técnico de acesso livre, que incluiu aulas publicadas no YouTube e repositórios disponibilizados no GitHub pelo Dr. Nicolas Spogis, pesquisador visitante da Faculdade de Engenharia Química da UNICAMP, cobrindo desde a configuração de simulações no DWSIM até a aplicação de conceitos avançados de modelagem termodinâmica (SPOGIS, 2024a, 2024b). A combinação entre uma ferramenta open source e recursos didáticos especializados e gratuitos ilustra, na prática, o que a democratização do conhecimento em Engenharia Química pode significar: pesquisa de qualidade conduzida com recursos acessíveis e reproduzível por qualquer pesquisador com acesso à internet.

Para garantir uma base de comparação sólida, a simulação toma como ponto de partida os dados operacionais da Usina de Santa Adélia, utilizados por Bessa et al. (2012) e Batista et al. (2012) como referência de um processo industrial real e validado. A corrente de entrada, o vinho alcoólico proveniente da fermentação, com aproximadamente 8,3% em massa de etanol, é a mesma adotada nos trabalhos de referência, permitindo que os resultados obtidos neste TCC sejam diretamente comparáveis aos da literatura e ao processo convencional. Essa ancoragem em dados

industriais reais é o que confere ao estudo relevância além do ambiente computacional.

O presente trabalho, parte dos resultados iniciais obtidos em iniciação científica anterior (TATAGIBA, 2022) e avança na direção de um sistema com reciclo fechado de CO₂ e integração das correntes térmicas, buscando avaliar se essa configuração alternativa é capaz de entregar um produto dentro das especificações legais do bioetanol hidratado combustível — graduação mínima de 92,5% em massa de etanol (BIASI et al., 2021) — com perdas controladas e um balanço energético favorável.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 PRODUÇÃO DE ETANOL NO BRASIL

O Brasil é pioneiro na utilização em larga escala de etanol combustível desde o fim da década de 1970. Atualmente, destaca-se como um dos principais consumidores e o segundo maior produtor mundial desse biocombustível (ANP, 2024).

Esse protagonismo teve início com a implementação do Programa Nacional do Álcool (Proálcool), criado em 1975 como resposta à crise do petróleo, consolidando o etanol como alternativa energética estratégica no país (EPE, 2025).

Ao longo de quase cinco décadas, os impactos do programa foram expressivos tanto do ponto de vista energético quanto econômico. Estima-se que o uso de etanol tenha proporcionado ao Brasil uma economia equivalente a mais de 2,5 bilhões de barris de petróleo, resultando em aproximadamente 205 bilhões de dólares em redução de gastos com importação de combustíveis fósseis (MINISTÉRIO DE MINAS E ENERGIA - BRASIL, 2024).

Paralelamente, o setor sucroenergético consolidou-se como um dos pilares do agronegócio nacional, impulsionando investimentos, desenvolvimento tecnológico e geração de empregos. A produção de etanol expandiu-se significativamente, atingindo volumes superiores a 37 bilhões de litros anuais, com crescente diversificação de matérias-primas, como o milho, que já representa parcela relevante da produção nacional (EPE, 2025).

No contexto do comércio internacional, o Brasil consolidou-se como exportador relevante de etanol, com volumes próximos a bilhões de litros por ano, ainda que sujeitos a variações em função da demanda interna e das condições de mercado (UNICA, 2024). A ampla adoção de veículos *flex fuel* no país contribuiu para a expansão do consumo interno e para a maior flexibilidade na matriz de combustíveis do setor de transportes (EPE, 2025).

Esse incentivo do governo brasileiro para a produção de etanol coincide com um momento em que a preocupação global com as mudanças climáticas e a necessidade de redução das emissões de gases de efeito estufa têm impulsionado a busca por fontes de energia mais limpas e renováveis.

Relatórios internacionais destacam que a descarbonização do setor energético é essencial para limitar o aumento da temperatura global, sendo a substituição de

combustíveis fósseis por biocombustíveis uma das estratégias mais relevantes no setor de transportes (IPCC, 2023).

Com isso, etanol destaca-se não apenas como alternativa energética, mas também como vetor estratégico de sustentabilidade. Do ponto de vista ambiental, sua utilização contribui significativamente para a redução das emissões de gases de efeito estufa ao longo do ciclo de vida, quando comparado aos combustíveis fósseis, especialmente no setor de transportes (IEA, 2023).

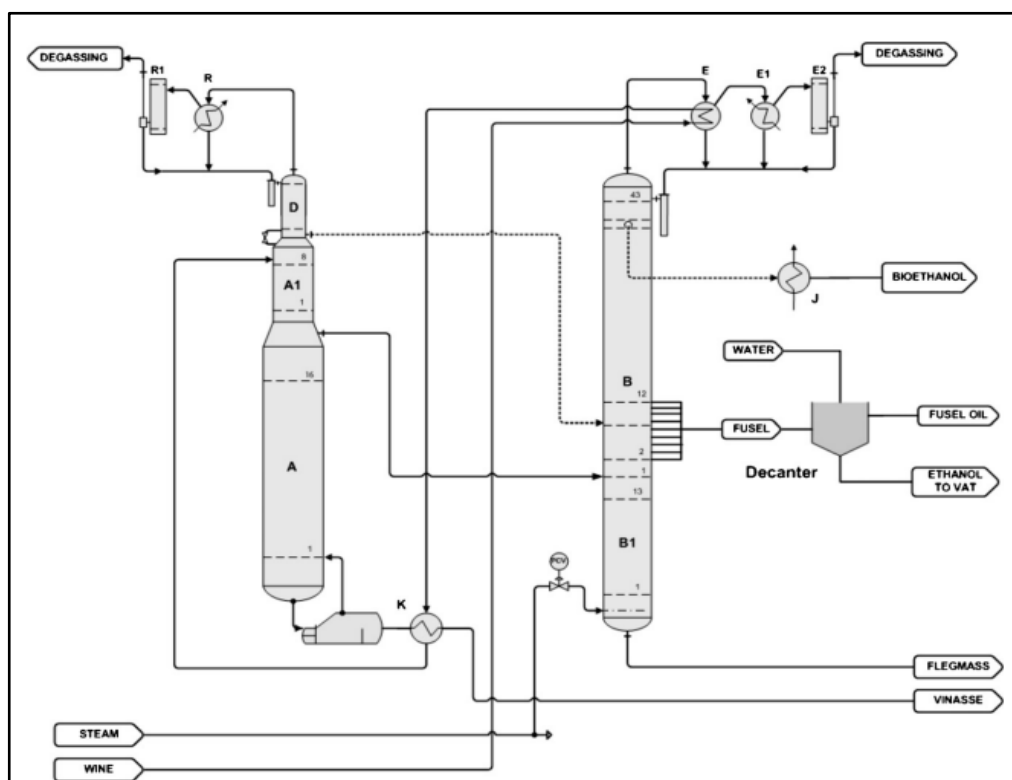
Além dos benefícios ambientais, o setor sucroenergético exerce papel relevante no desenvolvimento socioeconômico do país, promovendo a geração de empregos diretos e indiretos, o fortalecimento de cadeias produtivas regionais e a dinamização de economias locais, sobretudo em áreas rurais (UNICA, 2024). Nesse sentido, a consolidação do etanol na matriz energética brasileira representa não apenas um avanço tecnológico, mas também um instrumento de desenvolvimento sustentável, integrando ganhos econômicos, sociais e ambientais.

2.2 PROCESSO CONVENCIONAL DE DESTILAÇÃO ALCOÓLICA

A destilação é uma operação unitária tradicionalmente utilizada na indústria química para a separação de misturas líquidas, sendo responsável por aproximadamente 49% do consumo energético mundial de processos de separação (BIASI et al., 2021). No contexto da produção de bioetanol, essa operação representa a etapa de maior demanda energética de todo o processo, constituindo um dos principais alvos de estudos voltados à otimização e redução de custos operacionais (BESSA et al., 2012).

No Brasil, a produção de bioetanol hidratado combustível utiliza predominantemente duas colunas de destilação organizadas em cinco seções, cuja configuração permanece essencialmente a mesma há décadas (BIASI et al., 2021). A matéria-prima do processo de destilação é o vinho alcoólico, obtido após a fermentação do caldo de cana-de-açúcar ou de uma mistura de caldo e melaço, seguida de centrifugação para remoção da levedura. Esse vinho apresenta composição típica de aproximadamente 7–9% em massa de etanol, sendo o restante composto majoritariamente por água e por pequenas concentrações de compostos minoritários, como acetaldeído, acetona, acetato de etila, álcoois superiores e ácido acético, entre outros (BATISTA et al., 2012).

Figura 1 – Fluxograma de um típico processo de destilação de bioetanol



Fonte: (BATISTA et al., 2012).

O fluxograma típico do processo industrial brasileiro, conforme descrito por Batista et al. (2012) foi validado experimentalmente em duas usinas paulistas: a Usina Santa Adélia, em Pereira Barreto, e a Müller Bebidas, em Pirassununga. O processo é composto pelas seguintes seções principais: a seção A, responsável pelo esgotamento do vinho; a seção A1, que realiza a extração do óleo fúsel; a seção D, destinada à retificação do etanol; e as seções B e B1, que promovem a concentração e purificação finais do produto (BIASI et al., 2021).

O princípio de operação baseia-se na diferença de volatilidade entre o etanol e a água. Na seção de esgotamento (seção A), o vinho é alimentado e o vapor ascendente arrasta o etanol para as seções superiores, enquanto a vinhaça, corrente aquosa com teor mínimo de etanol, é retirada pelo fundo da coluna. A seção de retificação (seção D) concentra o etanol no vapor ascendente, que, ao atingir o topo da coluna, apresenta composição próxima à do azeótropo binário etanol-água, cujo ponto ocorre em aproximadamente 95,6% em massa de etanol a 1 atm e 78,1 °C (BESSA et al, 2012). A legislação brasileira estabelece que o bioetanol hidratado combustível deve apresentar graduação mínima de 92,5% em massa de etanol (BIASI

et al., 2021), o que significa que o processo convencional opera próximo do limite azeótropo.

Diversas alternativas para a redução desse consumo têm sido investigadas na literatura, incluindo integração energética de duplo e triplo efeito, compressão mecânica de vapor e destilação por variação de pressão. Borges Filho e Dettmer (2025) demonstraram que estratégias rigorosas de integração energética podem reduzir o consumo de vapor entre 30 e 80% em relação ao processo convencional; contudo, os autores ressaltam que tais métodos frequentemente implicam maior necessidade de capital e elevada complexidade operacional. Ou seja, embora o potencial de economia energética seja expressivo, a viabilidade prática dessas soluções esbarra em investimentos em equipamentos e em uma operação mais difícil de controlar e manter em escala industrial.

Além desse desafio a própria complexidade da mistura processada se soma a equação. O vinho alcoólico não é uma mistura simples de etanol e água, mas um sistema multicomponente contendo dezenas de compostos minoritários e gases dissolvidos como o CO_2 que, apesar de presentes em concentrações muito baixas na alimentação, podem se concentrar significativamente em regiões específicas das colunas e exercer influência relevante sobre o consumo de vapor e a qualidade do produto.

Nesse contexto, a simulação computacional emerge como ferramenta estratégica: permite investigar configurações alternativas de processo com rigor termodinâmico e representação multicomponente, sem demandar os elevados investimentos de capital associados à implementação física de novas configurações industriais. É precisamente essa abordagem que norteia o presente trabalho, no qual a substituição da primeira coluna de destilação por uma coluna de absorção com CO_2 como gás de arraste, processo proposto por Bessa, et al. (2012) e simulado originalmente no Aspen Plus, é reproduzida e otimizada no simulador de código aberto DWSIM, buscando avaliar o potencial energético dessa alternativa de forma acessível e reprodutível.

2.3 PROCESSO ALTERNATIVO: ABSORÇÃO COM CO_2

Embora alternativas como a integração de duplo-efeito demonstrem potencial significativo de redução do consumo de vapor (BESSA et al, 2012), sua implementação industrial envolve investimentos de capital elevados e maior

complexidade operacional, conforme ressaltado por Borges Filho e Dettmer (2025). Nesse contexto, o processo alternativo com CO_2 como gás de arraste surge como uma abordagem que busca reduzir o consumo energético da etapa de concentração do etanol sem necessariamente recorrer a configurações de colunas de alto custo.

2.3.1 Fundamentos da absorção e esgotamento

A absorção é uma operação unitária de transferência de massa baseada no contato entre uma fase gasosa e uma fase líquida, na qual um ou mais componentes presentes na fase gasosa são seletivamente transferidos para a fase líquida. O processo inverso, denominado *stripping* ou esgotamento, consiste na transferência de componentes voláteis da fase líquida para uma corrente gasosa de arraste (TREYBAL, 1981).

No processo estudado no presente trabalho, a primeira etapa de separação ocorre em uma coluna de absorção operada em contracorrente, na qual uma corrente rica em dióxido de carbono e etanol entra em contato com uma corrente líquida proveniente do vinho alcoólico. Durante essa operação, o etanol é transferido preferencialmente da fase rica em CO_2 para a fase líquida, reduzindo sua concentração na corrente gasosa ascendente e promovendo seu enriquecimento na fase líquida. Essa transferência é favorecida pelas condições de equilíbrio entre as fases e pelas interações termodinâmicas presentes no sistema ternário etanol-água- CO_2 .

A força motriz da absorção é a diferença entre a composição real do componente em uma das fases e a composição de equilíbrio correspondente na interface líquido-vapor. Quanto maior o afastamento das condições de equilíbrio, maior será a taxa de transferência de massa entre as fases (TREYBAL, 1981). Dessa forma, o contato entre as correntes ao longo dos estágios da coluna favorece a absorção do etanol, permitindo sua recuperação da corrente rica em CO_2 e contribuindo para a eficiência global do processo de purificação.

Além da transferência de etanol, parte do dióxido de carbono é absorvida pela fase líquida em função de sua solubilidade no meio, enquanto a maior parcela permanece na fase vapor e segue para as etapas subsequentes do processo. O desempenho da coluna depende, portanto, do equilíbrio de fases, das condições operacionais de temperatura e pressão e da eficiência de contato entre as correntes líquida e gasosa.

2.3.2 Mecanismo de seletividade do gás de arraste

A escolha do CO₂ como gás de arraste não é arbitrária e pode se basear em dois principais fatores. O CO₂ é produzido em grandes quantidades durante a própria fermentação alcoólica. A produção de 1 litro de etanol é acompanhada pela geração de aproximadamente 425 litros de CO₂ nas condições de temperatura e pressão do processo (SONEGO et al., 2014). Esse CO₂ é atualmente descartado nas usinas brasileiras sem aproveitamento, representando um recurso disponível a custo praticamente nulo e abrindo possibilidades para o desenvolvimento de processos em sistemas abertos e fechados.

Como segundo fator, o CO₂ apresenta maior capacidade de arraste do etanol em relação à água. Sonego et al. (2014) demonstraram experimentalmente que, ao borbulhar CO₂ em uma solução hidroalcoólica, o gás arrasta preferencialmente o etanol — a constante de remoção do etanol (k_E) foi consistentemente superior à da água (k_W) em todas as condições testadas, com razão k_E / k_W variando entre 8,9 e 13,5 dependendo da temperatura e da vazão de CO₂. Esse comportamento é explicado pela maior pressão de vapor do etanol em relação à água na faixa de temperatura do processo (30–34 °C), o que favorece sua transferência preferencial para a fase gasosa.

2.3.3 Disponibilidade e recirculação do gás de arraste

Um grande desafio na simulação de processos que utilizam CO₂ como gás de arraste é determinar uma taxa de recirculação adequada e avaliar em que medida o CO₂ gerado pela fermentação é capaz de suprir a demanda do processo. Sonego et al. (2014) alertaram que, para aplicações industriais, o gás de arraste deve necessariamente ser recirculado, uma vez que a quantidade produzida pela fermentação não é suficiente para a operação de *stripping* de forma contínua e eficiente. Essa limitação foi confirmada e aprofundada por Rodrigues et al. (2025), que compararam sistemas abertos com CO₂ comercial de alta pureza (99,5%) e sistemas fechados — com recirculação do gás gerado na fermentação. Os autores observaram que a recirculação do CO₂ permite reduzir significativamente a demanda por gás externo, mantendo elevados níveis de recuperação de etanol e aumentando a viabilidade operacional do processo.

Embora o fenômeno observado por Sonego et al. (2014) corresponda ao arraste de etanol por uma corrente de CO₂, os mesmos princípios de equilíbrio de

fases e transferência de massa justificam a utilização do dióxido de carbono nas etapas subsequentes de separação e recuperação presentes no processo estudado.

Isso tem uma implicação direta para o processo simulado no presente trabalho: o CO₂ utilizado como gás de arraste na coluna de absorção deve ser tratado como uma corrente estratégica do processo, com recirculação e controle da corrente de purga, de modo a minimizar perdas de etanol e garantir a viabilidade energética do processo (BESSA et al, 2012).

2.4 SIMULAÇÃO DE PROCESSOS

A simulação computacional de processos se consolidou como uma das ferramentas mais relevantes na Engenharia Química moderna, permitindo a investigação rigorosa de configurações de processo, a avaliação de alternativas operacionais e a análise de sensibilidade paramétrica sem a necessidade de implementação física das instalações. No contexto da destilação alcoólica, essa abordagem tem sido adotada na literatura, tanto para a validação de plantas industriais existentes quanto para o desenvolvimento e comparação de configurações alternativas (BATISTA et al., 2012; VALDERRAMA; TOSELLI; FAÚNDEZ, 2012; BIASI et al., 2020).

A confiabilidade de qualquer simulação de processo está diretamente dependente da qualidade da modelagem termodinâmica que a sustenta. Em sistemas multicomponentes como o vinho alcoólico, que contém etanol, água e CO₂, o comportamento do equilíbrio líquido-vapor é não ideal. A adequada representação dessas não idealidades é o que difere uma simulação com valor preditivo real de um exercício meramente ilustrativo (VALDERRAMA; FAÚNDEZ; TOSELLI, 2012; MATUGI et al., 2018).

O DWSIM é um exemplo de simulador de processos químicos de código aberto desenvolvido em plataforma .NET, capaz de realizar simulações em estado estacionário e dinâmico de processos envolvendo operações unitárias complexas, incluindo colunas de destilação e absorção multiestágio. Por sua licença aberta, o DWSIM elimina as barreiras de custo associadas a simuladores comerciais como o Aspen Plus, oferecendo recursos de modelagem termodinâmica compatíveis com as necessidades de estudos envolvendo sistemas hidroalcoólicos. Essa característica confere ao presente trabalho um caráter reprodutível: qualquer pesquisador com

acesso à internet pode instalar o simulador, acessar os arquivos de simulação e verificar ou estender os resultados obtidos.

Do ponto de vista técnico, as colunas de separação podem ser modeladas por meio de solucionadores baseados nas equações *MESH* (*Mass Balance, Equilibrium, Summation e Heat Balance*), empregadas na simulação rigorosa de operações de separação por estágios. A disponibilidade dessas ferramentas e suporte ativo à comunidade torna a integração entre o DWSIM e o *ChemSep* uma alternativa técnica legítima ao Aspen Plus para os fins deste estudo.

Somando-se a esses fatores, a flexibilidade para incorporação de ferramentas externas de cálculo torna o DWSIM particularmente adequado para estudos acadêmicos envolvendo desenvolvimento e validação de modelos de processo, como o sistema etanol-água-CO₂ investigado neste trabalho.

2.5 MODELAGEM TERMODINÂMICA

A disponibilidade de simuladores robustos representa apenas uma condição necessária, mas não suficiente, para que os resultados de uma simulação de processos sejam tecnicamente confiáveis. A qualidade preditiva de qualquer simulação está condicionada às escolhas termodinâmicas que a sustentam. O modelo de coeficiente de atividade adotado, os parâmetros de interação binária utilizados e a forma como componentes de comportamento atípico são tratados influenciam diretamente os resultados obtidos. Negligenciar essa dimensão equivale a empregar um instrumento de medição de alta precisão com uma escala de referência incorreta: a ferramenta opera com rigor, mas os resultados não correspondem à realidade física do processo.

É nesse contexto que a escolha criteriosa dos modelos termodinâmicos, e não apenas do simulador, torna-se uma decisão metodológica central. No presente trabalho, as simulações foram conduzidas em dois ambientes computacionais complementares: o *DWSIM*, utilizado como plataforma principal de simulação global do processo, e o *ChemSep*, integrado ao DWSIM por meio da interface *CAPE-OPEN* para o cálculo das colunas de separação multiestágio. Essa arquitetura de simulação, comum em estudos que demandam cálculo rigoroso de colunas complexas (VALDERRAMA; TOSELLI; FAÚNDEZ, 2012), exigiu que a configuração termodinâmica fosse definida de forma consistente em ambos os ambientes.

Schwarz (2024) demonstrou que mesmo para o par etanol-água, cujo comportamento de fase é o mais estudado na Engenharia Química de destilação alcoólica, a origem dos dados que alimentaram o ajuste dos parâmetros carrega uma incerteza que se propaga diretamente para as previsões de composição do produto, da vinhaça e do consumo energético. Para um processo como o estudado neste trabalho, no qual a especificação legal de pureza do bioetanol hidratado combustível é de 92,5% em massa de etanol (BIASI et al., 2021), essa margem de incerteza termodinâmica não é trivial e justifica o cuidado metodológico na seleção e validação do pacote termodinâmico adotado.

2.5.1 Equilíbrio líquido-vapor e seus desafios

O equilíbrio líquido-vapor descreve o estado termodinâmico em que duas fases coexistem sem transferência líquida de massa entre elas. Segundo Silva (2020), um sistema está em equilíbrio quando não se observam quaisquer modificações em seu estado, ou seja, não há transferência líquida de massa entre as fases e as propriedades macroscópicas do sistema permanecem constantes ao longo do tempo. Em termos termodinâmicos, essa condição é governada pelo critério de isofugacidade: para cada componente i presente na mistura, a fugacidade na fase vapor deve ser igual à fugacidade na fase líquida, conforme expresso pela equação fundamental de equilíbrio de fases.

$$f_i^V = f_i^L \quad (1)$$

A fugacidade de um componente em uma mistura depende da temperatura, pressão e composição da mesma. A fugacidade pode ser entendida como uma medida da "tendência de escape" de um componente de uma determinada fase, ou seja, quanto maior a fugacidade, maior a tendência daquele componente de migrar para a outra fase. O equilíbrio é atingido exatamente quando essa tendência se iguala nas duas fases para todos os componentes simultaneamente.

O desafio central da modelagem termodinâmica está no fato de que a fase vapor e a fase líquida são fisicamente muito diferentes entre si, e essa diferença exige que a fugacidade de cada componente seja calculada de maneiras diferentes dependendo da fase em questão.

Na fase vapor, as moléculas estão relativamente afastadas umas das outras e suas interações são predominantemente de curto alcance; o comportamento dessa fase pode ser descrito com razoável precisão por equações de estado, relacionando

pressão, volume molar e temperatura do sistema. Já na fase líquida o comportamento é outro: as moléculas estão em contato próximo e contínuo, e as forças intermoleculares como ligações de hidrogênio, interações dipolo-dipolo, forças de dispersão têm influência sobre o comportamento termodinâmico da mistura, reforçando a necessidade de uma abordagem distinta para cada fase.

Essa distinção é representada pela abordagem *Gamma-Phi* (γ - ϕ), aplicada neste trabalho tanto na simulação global no DWSIM quanto nas colunas calculadas pelo *ChemSep*.

Nessa abordagem, a condição de equilíbrio para um componente condensável i é expressa como:

$$y_i \phi_i P = x_i \gamma_i P_i^{\text{sat}} \quad (2)$$

Onde y_i e x_i são, respectivamente, as frações molares nas fases vapor e líquida. P é a pressão total do sistema; P_i^{sat} é a pressão de vapor pura do componente à temperatura de equilíbrio; ϕ_i é o coeficiente de fugacidade na fase vapor; e γ_i é o coeficiente de atividade na fase líquida. Em pressões próximas da atmosférica — condição prevalente na destilação alcoólica convencional —, a fase vapor se comporta aproximadamente como gás ideal e ϕ_i se aproxima da unidade, simplificando a expressão para a forma da Lei de Raoult modificada (PRAUSNITZ; LICHTENTHALER; AZEVEDO, 1999).

2.5.2 Aplicação na fase vapor

A equação de estado de Peng-Robinson foi empregada para o cálculo das propriedades da fase vapor e das propriedades termodinâmicas auxiliares associadas ao pacote NRTL. A equação cúbica de estado amplamente consolidada na Engenharia Química, expressa na forma:

$$P = \frac{RT}{(V - b)} - \frac{a(T)}{[V(V + b) + b(V - b)]} \quad (3)$$

Onde $a(T)$ e b são parâmetros dependentes das propriedades críticas e do fator acêntrico de cada componente. Seu ótimo resultado em sistemas contendo hidrocarbonetos e compostos polares em condições moderadas de pressão justifica sua ampla adoção em simuladores de processos químicos (PENG; ROBINSON, 1976).

Nas colunas de separação calculadas pelo *ChemSep*, a equação de estado de Hayden-O'Connell (1975) foi escolhida para corrigir não idealidades da fase vapor

decorrentes de fenômenos de associação molecular. Essa característica é particularmente relevante para sistemas contendo elevadas concentrações de água e etanol, como ocorre nas regiões superiores das colunas simuladas neste trabalho.

O modelo incorpora correções baseadas no segundo coeficiente virial para representar interações específicas entre moléculas associativas, culminando em uma descrição mais realista da fase vapor em misturas hidroalcoólicas. Além de sua fundamentação física adequada ao sistema estudado, o modelo apresentou comportamento numérico mais estável durante a convergência das colunas simuladas, contribuindo para a robustez dos cálculos realizados no *ChemSep*.

2.5.3 Aplicação na fase líquida

Para o cálculo dos coeficientes de atividade na fase líquida, o modelo NRTL (*Non-Random Two-Liquids*), proposto por Renon e Prausnitz (1968), foi adotado em toda a simulação. Sua premissa fundamental é a de composição local: a vizinhança molecular imediata de cada componente difere da composição global da mistura, refletindo as preferências energéticas de interação entre espécies distintas.

No modelo NRTL, o parâmetro α mede o quanto essa preferência de vizinhança existe na mistura, enquanto os parâmetros τ quantificam o custo energético de cada componente por estar no "ambiente molecular do outro". Essa premissa é fisicamente mais realista do que a hipótese de mistura aleatória e confere ao modelo a capacidade de representar os desvios positivos da idealidade característicos do par etanol-água. Isso o torna uma das escolhas mais consolidadas para sistemas hidroalcoólicos na engenharia de separações (GMEHLING et al., 2019; TAVARES; SEGTOVICH; MEDEIROS, 2023).

Os parâmetros de interação binária utilizados neste trabalho foram obtidos por regressão de dados experimentais realizada no *software* DWSIM. Dessa forma, os valores utilizados nas simulações não correspondem a estimativas preditivas fornecidas automaticamente pelos simuladores, mas sim a parâmetros ajustados especificamente a dados experimentais de equilíbrio líquido-vapor. Essa abordagem busca reduzir as incertezas associadas à modelagem termodinâmica e aumentar a capacidade preditiva das simulações desenvolvidas.

2.5.4 Lei de Henry e CO₂ supercrítico

Enquanto o componente pode existir como líquido puro nas condições do processo, o NRTL opera dentro do seu domínio de validade e produz resultados termodinamicamente consistentes. O problema surge quando essa referência simplesmente não existe.

Esse é o caso do CO₂ nas condições de operação da coluna de absorção deste trabalho. A temperatura crítica do CO₂ é de 304,2 K (aproximadamente 31 °C), valor próximo ou inferior às temperaturas de operação consideradas. Acima da temperatura crítica, não existe uma fase líquida pura estável para o dióxido de carbono, independentemente da pressão aplicada. Nessas condições, a aplicação direta do *NRTL* ao CO₂ exigiria extrapolações além das capacidades originais do modelo, reduzindo a consistência física dos resultados. Como o modelo foi desenvolvido tomando como referência o estado líquido puro dos componentes, sua utilização para um componente em condição supercrítica torna-se conceitualmente limitada e dificulta a interpretação física dos parâmetros ajustados (PRAUSNITZ; LICHTENTHALER; AZEVEDO, 1999; GMEHLING et al., 2019).

A questão que se coloca, portanto, não é se o NRTL é um bom modelo, já foi demonstrado que sim. A questão é que o CO₂ supercrítico em contato com uma fase líquida hidroalcoólica configura um problema termodinâmico de natureza diferente: o de um soluto supercrítico dissolvido em um solvente condensável.

Para esse tipo de sistema, a termodinâmica clássica oferece uma ferramenta específica e bem fundamentada: a Lei de Henry. Diferentemente do NRTL, a Lei de Henry não exige a existência de um líquido puro de referência para o soluto. Ela descreve diretamente a relação de equilíbrio entre a fugacidade do componente supercrítico na fase vapor e sua fração molar na fase líquida. Cada par soluto-solvente é característico e demonstrada pela constante de Henry H_i . Que concentra em um único parâmetro toda a energia de interação entre o CO₂ e os componentes da fase líquida nas condições do processo.

$$f_i^v = H_i \cdot x_i \quad (4)$$

Essa constante tem uma interpretação física direta e relevante para o processo estudado. Valores elevados de H_i indicam baixa solubilidade do CO₂ na fase líquida, pois mesmo uma pequena concentração no líquido já gera uma fugacidade elevada na fase vapor. Isso favorece a transferência do gás de arraste para a fase vapor e, conseqüentemente, sua eficiência como agente de esgotamento.

No sistema etanol-água-CO₂, a constante de Henry do CO₂ é consideravelmente menor em soluções ricas em etanol do que em água pura, reflexo da maior afinidade entre o CO₂ apolar e a cadeia carbônica do etanol. Este comportamento contribui para a seletividade do processo de absorção (SONEGO et al., 2014; PRAUSNITZ; LICHTENTHALER; AZEVEDO, 1999).

A inclusão da Lei de Henry para o CO₂ na coluna de absorção (CSCOL-1), portanto, não é uma opção de modelagem entre outras: é a consequência direta do reconhecimento da natureza supercrítica desse componente nas condições do processo e da necessidade de manter a consistência termodinâmica interna da simulação. Os parâmetros da Lei de Henry utilizados neste trabalho foram obtidos por regressão de dados experimentais conduzida no *software* Aspen Plus durante trabalho de iniciação científica anterior (TATAGIBA, 2022), sendo posteriormente transferidos para o ambiente de simulação do *DWSIM* e do *ChemSep*.

Essa validação cruzada entre plataformas reforça a confiabilidade dos parâmetros empregados, assegurando que a distribuição do CO₂ entre as fases ao longo de todos os estágios da coluna seja calculada com base em dados experimentais ajustados e não em estimativas preditivas automáticas dos simuladores.

3 METODOLOGIA

Após pesquisa e entendimento dos fundamentos teóricos apresentados no capítulo anterior, foi desenvolvida uma metodologia de simulação capaz de representar o processo de recuperação e purificação de etanol.

Em uma visão geral do processo a metodologia aplicado na simulação pode ser resumida em três etapas, que serão aprofundadas e, seções futuras.

A primeira etapa consiste na definição da base termodinâmica da simulação, incluindo a seleção dos modelos utilizados para representar o equilíbrio entre as fases e a obtenção dos parâmetros necessários aos cálculos.

Na segunda etapa, foi realizada a implementação do processo no ambiente computacional, isto é, a construção do fluxograma, a definição das correntes de alimentação e a configuração das operações unitárias.

Por fim, foi estabelecida a estratégia de simulação e avaliação do processo, incluindo os procedimentos de convergência, fechamento dos reciclo e definição dos critérios utilizados para análise do desempenho do sistema.

3.1 MODELAGEM TERMODINÂMICA

A modelagem e simulação do processo foram realizadas utilizando o *software DWSIM*, um simulador de processos em estado estacionário amplamente empregado em aplicações acadêmicas e industriais.

Para o cálculo rigoroso das operações de separação, especialmente das colunas de estágios de equilíbrio, foi empregado o módulo *ChemSep* integrado ao *DWSIM* por meio da interface *CAPE-OPEN*. Essa integração possibilita a utilização de solucionadores específicos para colunas de destilação, absorção e esgotamento. Isto garante a resolução simultânea das equações de balanço de massa, balanço de energia, equilíbrio entre fases e somatório de frações molares.

A combinação entre *DWSIM* e *ChemSep* permitiu a representação detalhada das operações unitárias do processo, fornecendo dados adequados para avaliação do desempenho da recuperação e concentração de etanol em sistemas contendo água e dióxido de carbono.

3.2 DESENVOLVIMENTO DA SIMULAÇÃO

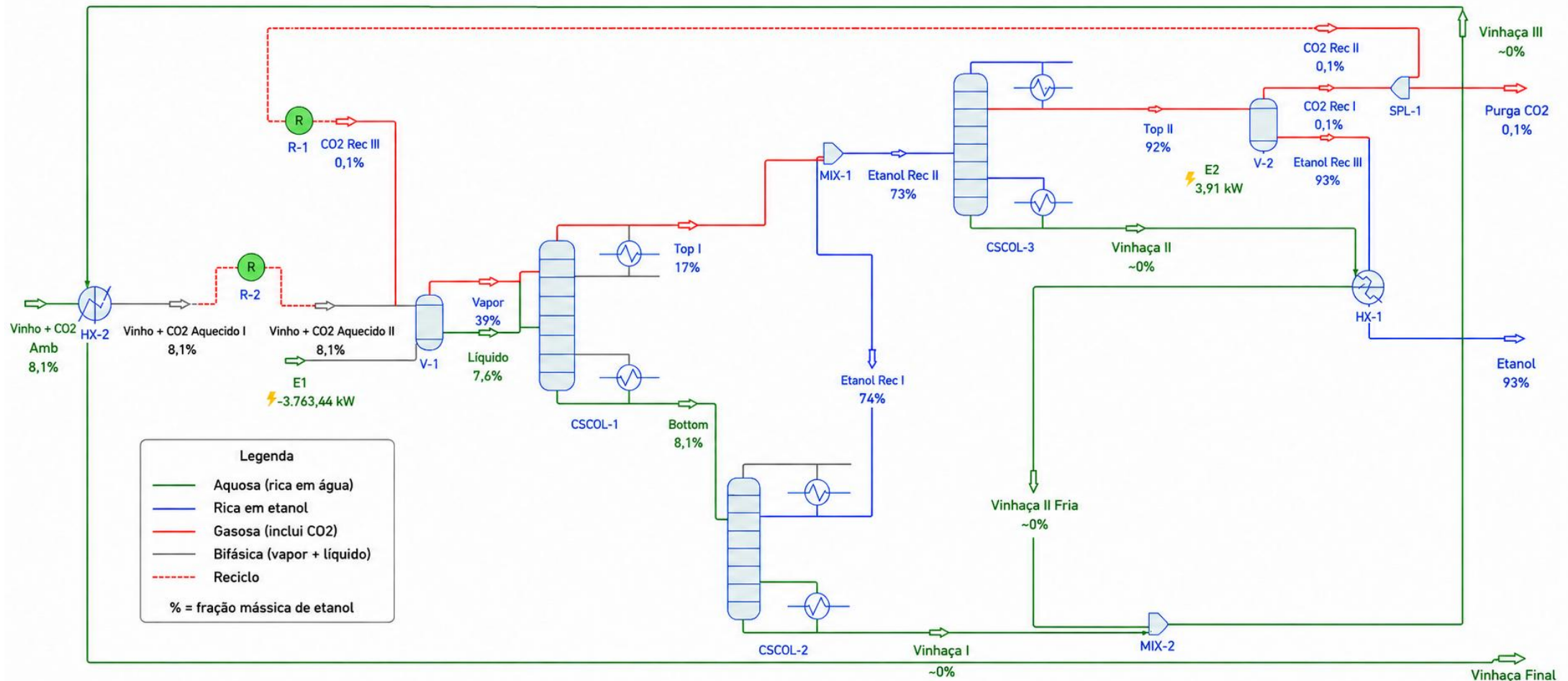
A configuração de entrada do processo foi baseada na proposta de Bessa (2012), previamente apresentada durante a seção de revisão bibliográfica, para

recuperação de etanol utilizando dióxido de carbono proveniente da fermentação alcoólica. A partir dessa configuração de referência, adaptações foram feitas para adequar o modelo às ferramentas computacionais utilizadas neste trabalho.

A simulação foi desenvolvida em regime permanente. O fluxograma completo inclui uma coluna de absorção, três colunas de separação, um sistema de separação em baixa temperatura para recuperação do dióxido de carbono e as correntes auxiliares necessárias para o fechamento dos balanços globais de massa.

A Figura 2 apresenta o fluxograma geral utilizado na simulação, destacando as principais operações unitárias, correntes de processo e interligações consideradas para representação do processo de recuperação e purificação do etanol.

Figura 2 – Fluxograma geral do processo simulado.



Fonte: Elaborado pela autora (2026).

3.3 COMPONENTES E CORRENTES DE ALIMENTAÇÃO

A definição dos componentes (água, etanol e dióxido de carbono) e das condições de alimentação é uma etapa fundamental para a representação adequada dos fenômenos de equilíbrio e transferência de massa simulados.

A escolha desses componentes está relacionada à composição típica do vinho, produto da fermentação alcoólica.

Tabela 1 – Componentes considerados na simulação

Componente	Fórmula química
Água	H ₂ O
Etanol	C ₂ H ₅ OH
Dióxido de carbono	CO ₂

Fonte: Elaborado pela autora (2026).

As condições de alimentação utilizadas na simulação foram adicionadas ao DWSIM e correspondem ao resultado da fermentação. Os dados de alimentação foram retirados do estudo de Bessa 2012, que usou dados reais da Usina de Santa Adélia.

Tabela 2 – Condições da corrente de alimentação utilizada na simulação

Propriedade	Valor
Vazão mássica (kg/h)	200.000,0
Temperatura (°C)	32,0
Pressão (bar)	1,013
Fração mássica de água (g/g)	$9,178 \times 10^{-1}$
Fração mássica de etanol (g/g)	$8,10 \times 10^{-2}$
Fração mássica de CO ₂ (g/g)	$1,20 \times 10^{-3}$

Fonte: Elaborado pela autora (2026).

3.4 MODELAGEM TERMODINÂMICA

A modelagem termodinâmica da simulação foi definida considerando o sistema ternário, adotando uma abordagem combinada para representação do equilíbrio líquido–vapor (VLE) ao longo das operações de separação.

Nas três colunas simuladas (absorção, recuperação e retificação), o equilíbrio líquido–vapor foi calculado utilizando a abordagem *Gamma–Phi*, com o modelo NRTL aplicado à fase líquida e a correção de Hayden–O’Connell utilizada na fase vapor. O cálculo da pressão de vapor dos componentes puros foi realizado pela equação de Antoine e as propriedades energéticas foram determinadas utilizando o modelo de entalpia ideal disponível no ambiente de simulação.

Como diferencial da etapa de absorção (CSCOL-1), foi ativada a aplicação da Lei de Henry para o dióxido de carbono, permitindo representar o comportamento do CO₂ dissolvido na corrente de alimentação durante o contato com a fase líquida.

Para as etapas de recuperação e purificação do etanol (CSCOL-2 e CSCOL-3), foi mantida a abordagem *Gamma–Phi* associada ao modelo NRTL e à correção de Hayden–O’Connell.

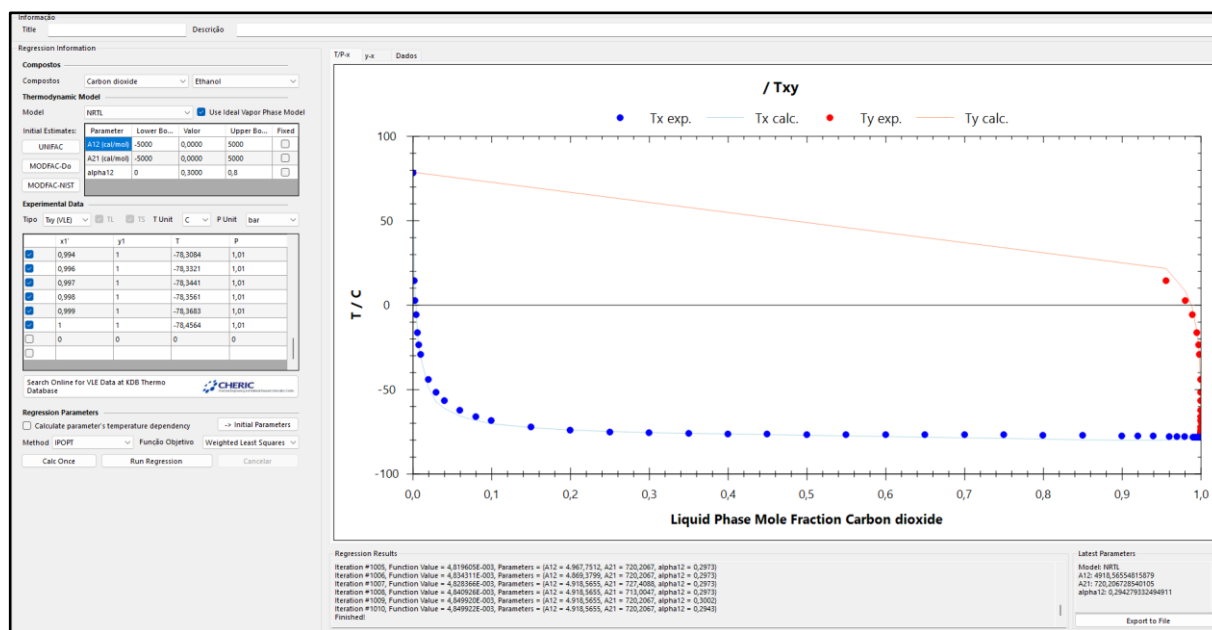
Após a definição da estratégia de modelagem termodinâmica apresentada faz-se necessário o cálculo dos parâmetros para aplicação dos modelos no simulador.

Para os sistemas binários contendo dióxido de carbono, foram utilizados dados de equilíbrio líquido–vapor obtidos por meio da plataforma *VLE-Calc*. Os dados selecionados foram utilizados no ambiente de regressão de parâmetros do *DWSIM* para determinação dos parâmetros de interação necessários ao modelo NRTL.

Estes dados experimentais foram aplicados ao módulo de regressão do *software*, seguida da execução iterativa do algoritmo de ajuste. Antes de começar a regressão em si, valores iniciais sugeridos automaticamente pelo próprio programa foram utilizados. Após convergência numérica, os parâmetros resultantes foram adicionados manualmente às configurações termodinâmicas utilizadas na simulação, tanto na configuração geral do simulador como no *ChemSep*.

Para o sistema binário água–etanol parâmetros internos disponibilizados pelo *DWSIM* foram utilizados, sem necessidade de ajuste adicional, considerando tratar-se de um sistema amplamente estudado e já consolidado na literatura termodinâmica e nas bases de dados do *software*.

Figura 3 – Procedimento de regressão dos parâmetros no ambiente do DWSIM.



Fonte: Elaborado pela autora (2026).

Para aplicação da Lei de Henry na etapa de absorção, foram utilizados parâmetros previamente calculados por regressão de dados experimentais em trabalho de iniciação científica anterior (TATAGIBA, 2022). A regressão foi conduzida no *software* Aspen Plus e os parâmetros posteriormente transferidos e implementados no ambiente de simulação do *DWSIM* e do *ChemSep* para utilização neste trabalho.

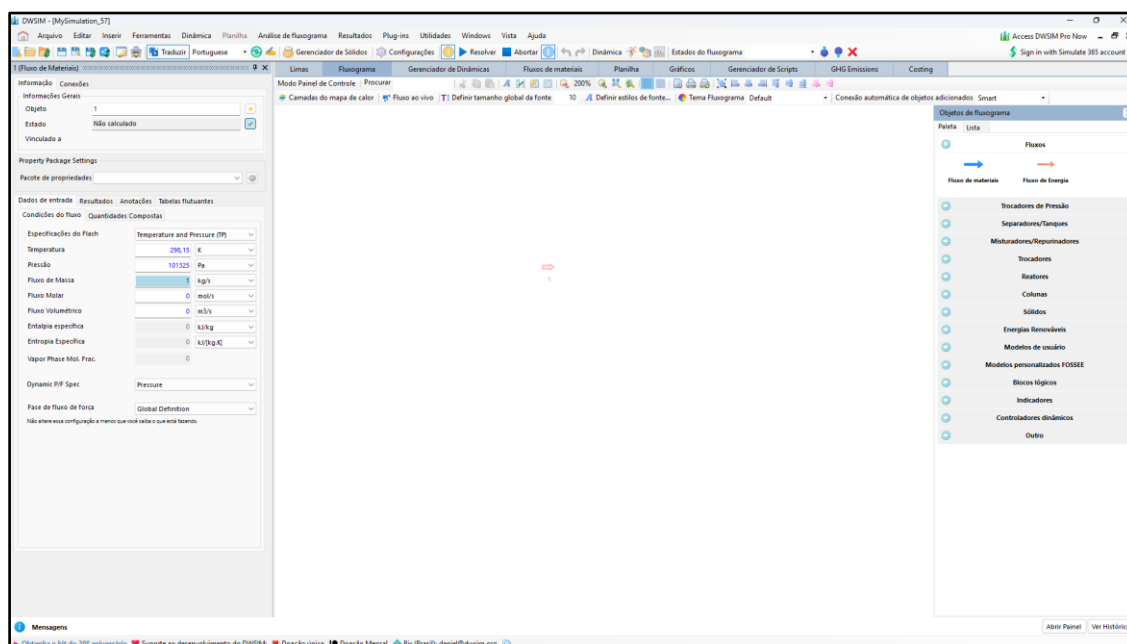
3.5 CONFIGURAÇÕES DO PROCESSO

Com as condições de alimentação, modelos termodinâmicos e parâmetros definidos, o próximo passo é a configuração do no simulador. O objetivo dessa etapa foi estruturar as operações unitárias necessárias para representar o processo de recuperação e purificação do etanol utilizando dióxido de carbono.

A construção do fluxograma foi feita de forma sequencial, começando pela definição das correntes de alimentação e pela adição das operações responsáveis pelo contato entre fases e de separação. Após a construção do esqueleto do processo, foram adicionados os equipamentos auxiliares necessários para fechamento dos balanços e estabelecimento das correntes de reciclo.

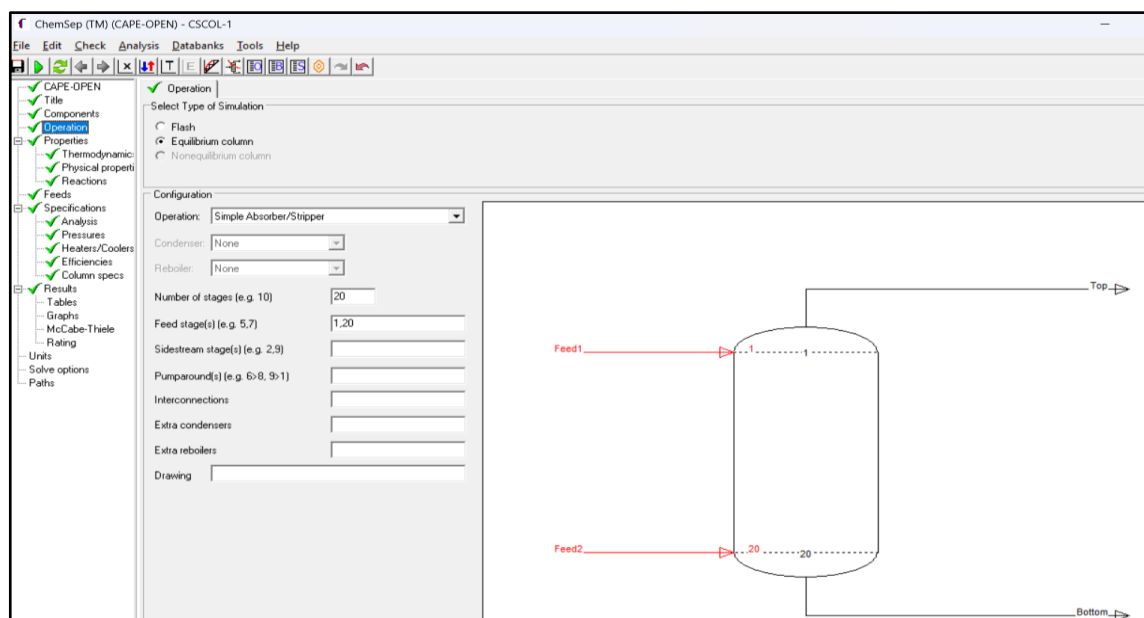
As Figuras 4 e 5 ilustram as telas que o usuário encontrará nas respectivas etapas.

Figura 4 – Ambiente inicial do DWSIM.



Fonte: Elaborado pela autora (2026).

Figura 5 – Configuração das operações de separação no módulo ChemSep.

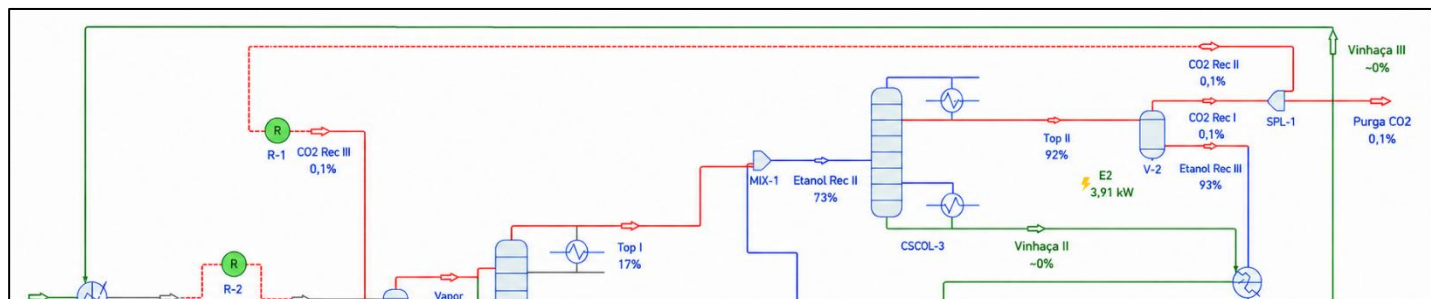


Fonte: Elaborado pela autora (2026).

Como etapa final, foram criadas as correntes internas para implementar o circuito de recuperação parcial do dióxido de carbono. Este processo é essencial para

o reaproveitamento do gás ao longo da simulação e o fechamento do modelo para execução dos cálculos.

Figura 6 – Reciclo do dióxido de carbono no ambiente de simulação.



Fonte: Elaborado pela autora (2026).

3.5.1 Critérios de desempenho do processo

Após a verificação da consistência numérica, foram definidos os indicadores para avaliação do desempenho do processo. Os critérios adotados foram baseados em Bessa et al. (2012), permitindo comparar o comportamento da simulação com valores de referência.

O primeiro indicador considerado foi a recuperação de etanol (ER), utilizada para quantificar a fração de etanol recuperada na corrente de produto em relação ao etanol alimentado ao sistema. Como referência, foram considerados os valores próximos de 99,2% de recuperação, reportados por Bessa et al. (2012).

Além desses indicadores, foi acompanhada a fração mássica de etanol na corrente final, adotando como referência a obtenção de etanol hidratado com composição próxima de 93% em massa, valor utilizado pelos autores como especificação operacional do produto.

Por fim, foi monitorada a perda de etanol na vinhaça, utilizando como referência perdas inferiores a 0,02%, conforme adotado por Bessa et al. (2012) durante o ajuste das condições operacionais da simulação.

Os indicadores apresentados foram utilizados posteriormente para análise e discussão dos resultados obtidos.

3.5.2 Critérios de consistência numérica.

Inicialmente, foi adotada a verificação automática dos balanços globais de massa e energia disponibilizada pelo simulador DWSIM. Para o balanço de massa, foi

utilizada a configuração de interrupção da execução em caso de inconsistência (*Throw Exception*), com tolerância relativa de 1×10^{-4} . Para o balanço energético, foi adotado o monitoramento por aviso (*Show Warning*), também com tolerância relativa de 1×10^{-4} . Esses limites foram empregados para identificar desvios acumulados ao longo do fluxograma e garantir consistência entre correntes de entrada e saída.

Também foi verificada a convergência das operações de separação implementadas no módulo *ChemSep*. Foram considerados válidos apenas os cenários em que as colunas atingiram solução estável para os balanços simultâneos de massa, energia e equilíbrio entre fases, sem ocorrência de interrupções do algoritmo numérico.

Além da convergência matemática, foi realizada uma verificação de coerência física das variáveis calculadas. Foram observadas a compatibilidade entre temperaturas, pressões, composições e direções esperadas de transferência de massa, considerando o comportamento dos sistemas.

Somente os cenários que atenderam simultaneamente aos critérios descritos foram considerados aptos para avaliação na etapa de Resultados e Discussão.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este capítulo apresenta e discute os resultados obtidos na simulação do processo alternativo de refino de etanol com CO₂ como gás de arraste. A análise está organizada em etapas. Primeiro, verifica-se se a simulação atingiu um estado numericamente consistente, condição primordial para que os resultados possam ser interpretados com segurança.

Em seguida, os indicadores de desempenho do processo são avaliados: a qualidade do produto obtido, a recuperação de etanol e as perdas nas correntes de saída.

Por fim, o comportamento do CO₂ ao longo do sistema é discutido, com foco no fechamento do reciclo e nas implicações para a viabilidade operacional do processo.

Em cada etapa, os resultados são comparados com os valores de referência reportados por Bessa et al. (2012), que servem de base para avaliar se a configuração simulada é capaz de entregar um desempenho equivalente ao processo convencional.

4.1 MODELAGEM TERMODINÂMICA

A confiabilidade dos resultados de uma simulação depende diretamente da qualidade dos modelos termodinâmicos que a sustentam. Antes de analisar o desempenho do processo, portanto, este item documenta a configuração adotada, os parâmetros obtidos por regressão e a evidência de que esses parâmetros representam bem o comportamento real do sistema. A Tabela 3 apresenta os equipamentos do fluxograma e os modelos associados a cada um.

Tabela 3 – Configuração dos equipamentos e modelos termodinâmicos do processo simulado

Equipamento	Tipo	Função	Modelo termodinâmico
V-1	Vaso flash	Separação de fases entrada	Peng-Robinson
CSCOL-1	Coluna de absorção	Absorção do CO ₂ pelo vinho	NRTL + Hayden-O'Connell + Lei de Henry (CO ₂)
CSCOL-2	Coluna de destilação	Recuperação primária de etanol	NRTL + Hayden-O'Connell
CSCOL-3	Coluna de retificação	Purificação final do etanol	NRTL + Hayden-O'Connell
V-2	Vaso flash	Obtenção do produto	NRTL
SPL-1	Divisor de fluxo	Divisão entre reciclo e purga de CO ₂	Ideal

Fonte: Elaborado pela autora (2026).

As três colunas de separação compartilham a mesma abordagem *Gamma-Phi* ($\gamma\text{-}\phi$): modelo NRTL para a fase líquida e equação de Hayden-O'Connell para a fase vapor. A única diferença entre elas está na coluna de absorção (CSCOL-1), onde a Lei de Henry foi ativada para o CO₂. Essa distinção tem fundamento termodinâmico direto já que nas condições de operação da CSCOL-1, o CO₂ está acima de sua temperatura crítica (304,2 K) e não possui estado líquido puro de referência.

Portanto, o NRTL, desenvolvido a partir dessa referência, perde consistência física para esse componente nessas condições. A Lei de Henry contorna o problema ao descrever o equilíbrio do CO₂ dissolvido sem exigir uma referência que não existe. Nas colunas seguintes, onde o CO₂ aparece apenas em concentrações residuais e a fase líquida é dominada pelo par etanol-água, essa restrição deixa de ser relevante.

4.1.1 Parâmetros NRTL

Para o par etanol-água, foram utilizados os parâmetros internos disponibilizados pelo próprio DWSIM, sem necessidade de regressão adicional. Trata-se de um sistema amplamente estudado na literatura, com base de dados experimental extensa e parâmetros consolidados (GMEHLING et al., 2019). A tabela

a seguir apresenta os parâmetros fornecidos pelo simulador, sem necessidade de regressão linear.

Tabela 4 – Parâmetros de NRTL obtidos diretamente do DWSIM

Par binário	A_{ij} (cal/mol)	A_{ji} (cal/mol)	α_{ij}
Etanol – Água*	-242,51	5195,44	0,2937

* Parâmetros da base de dados interna do DWSIM.

Fonte: Elaborado pela autora (2026).

Entretando, para os pares envolvendo CO₂ o cenário é diferente. Os parâmetros foram obtidos por regressão de dados experimentais de equilíbrio líquido-vapor conduzida no módulo de regressão do DWSIM. A Tabela 5 apresenta os valores resultantes.

Tabela 5 – Parâmetros de interação binária do modelo NRTL por regressão

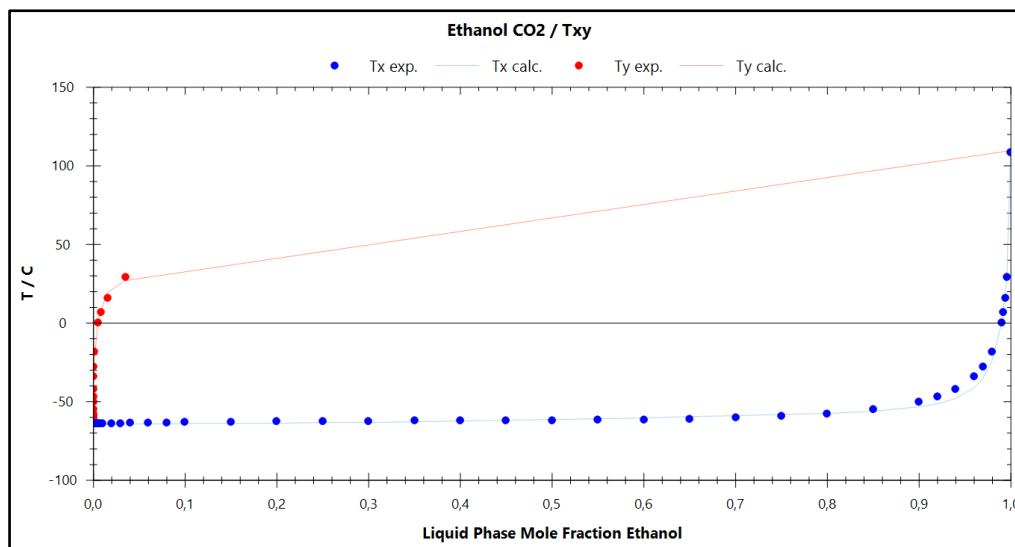
Par binário	A_{ij} (cal/mol)	A_{ji} (cal/mol)	α_{ij}
Etanol – CO ₂	850,00	976,06	0,5941
CO ₂ – Água	1137,83	1482,65	0,6376

* Parâmetros da base de dados interna do DWSIM.

Fonte: Elaborado pela autora (2026).

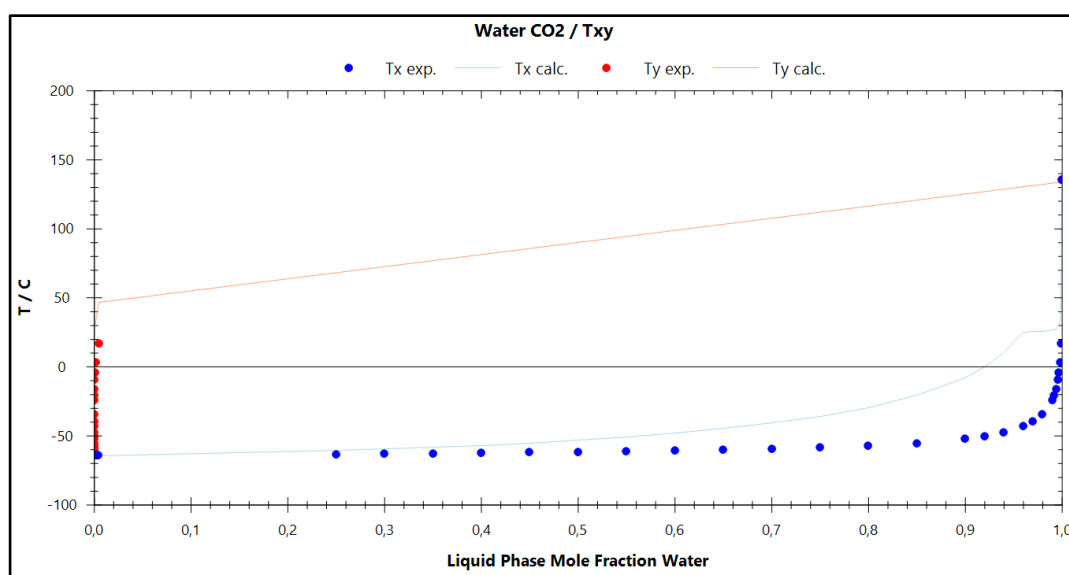
Parâmetros regredidos sem validação são apenas números. O que os transforma em evidência é a comparação entre a curva que o modelo calcula e os dados experimentais reais. Se o modelo consegue reproduzir o que foi medido, ele tem capacidade de prever o que acontece nas condições da simulação, inclusive onde não há dados. As Figuras 7 e 8 mostram essa comparação para os dois pares regredidos neste trabalho. Em cada diagrama Txy, os pontos representam os dados experimentais utilizados na regressão e as linhas representam o que o modelo NRTL calcula com os parâmetros obtidos. O ajuste é avaliado visualmente pela aderência entre pontos e curvas, com atenção especial à faixa de composição e temperatura que corresponde às condições reais de operação das colunas simuladas.

Figura 7 – Diagrama Txy para o sistema etanol–CO₂



Fonte: Elaborado pela autora no *software* DWSIM (2026).

Figura 8 – Diagrama Txy para o sistema CO₂–água



Fonte: Elaborado pela autora no *software* DWSIM (2026)

Em ambos os diagramas, as curvas calculadas acompanham os pontos experimentais sem desvios sistemáticos visíveis na região de interesse do processo. Para o par etanol-CO₂ (Figura 7), o ajuste é satisfatório na faixa de baixa concentração de CO₂ na fase líquida — exatamente a região em que a coluna de absorção opera.

Para o par CO₂-água (Figura 8), o modelo reproduz bem o comportamento na região rica em água ($x^{\text{água}}$ próximo de 1), que corresponde às condições da fase líquida ao longo de todas as colunas simuladas.

Vale notar a assimetria nos parâmetros do par etanol-água: A_{ij} negativo (-242,51) frente a A_{ji} fortemente positivo (5195,44). Essa diferença reflete o custo energético desigual de cada molécula quando inserida no ambiente molecular da outra. Desequilíbrio este que está na raiz do comportamento azeotrópico do sistema e que o NRTL captura por meio do conceito de composição local.

Para os pares com CO_2 , os valores de α elevados (acima de 0,59) indicam maior preferência de vizinhança molecular, reflexo da diferença de polaridade entre o CO_2 e os solventes. Os parâmetros A_{ij} e A_{ji} altos para esses pares traduzem o custo energético de dissolver um componente apolar em um meio polar. Comportamento este que explica a menor solubilidade do CO_2 em água e sua solubilidade relativamente maior em etanol.

4.1.2 Parâmetros da lei de Henry

Os parâmetros da Lei de Henry para o CO_2 foram obtidos por regressão de dados experimentais conduzida no Aspen Plus durante trabalho de iniciação científica anterior a este trabalho (TATAGIBA, 2022) e transferidos para o DWSIM e ChemSep para uso neste trabalho. A Tabela 6 apresenta os valores para os dois pares de solvente.

Tabela 6 – Parâmetros da Lei de Henry para o CO_2

Par (CO_2 – solvente)	A_{ij}	B_{ij}	C_{ij}	D_{ij}
CO_2 – Etanol	89,5831	-508,800	-11,8910	0,00000
CO_2 – Água	159,200	-8477,71	-21,9574	0,00578

Fonte: TATAGIBA (2022).

A constante de Henry do CO_2 em etanol é consideravelmente menor do que em água pura, o que indica maior solubilidade do CO_2 no etanol. Este comportamento é esperado pela maior afinidade entre o componente apolar e a cadeia carbônica do álcool. Esse contraste é o que fundamenta a seletividade do processo de absorção: o CO_2 tende a se dissolver preferencialmente na fase rica em etanol, favorecendo a transferência desse componente para a fase líquida ao longo dos estágios da coluna.

Com a base termodinâmica estabelecida e validada, a próxima seção verifica se a simulação atingiu um estado numericamente consistente antes de analisar o desempenho do processo.

4.2 CONSISTÊNCIA DA SIMULAÇÃO

Essa etapa confirma que os valores calculados podem ser interpretados com confiança, e não são artefatos de convergência incompleta.

Os critérios adotados foram descritos na seção de Metodologia: fechamento dos balanços globais de massa e energia dentro da tolerância relativa de 1×10^{-4} , convergência das colunas de separação no módulo ChemSep e coerência física das variáveis calculadas. Todos esses critérios foram atendidos no cenário final simulado.

A Tabela 7 resume o balanço de massa global do processo, considerando as três correntes de saída do sistema.

Tabela 7 – Balanço de massa global do processo simulado

Corrente	Função	Fluxo mássico (kg/h)	Fração do total (%)
Vinho + CO ₂	Alimentação	200.000,0	100,0
Etanol	Produto principal	17.412,6	8,7
Vinhaça Final	Corrente aquosa de saída	182.453,7	91,2
Purga CO ₂	Purga do sistema de reciclo	133,7	0,1

Fonte: Elaborado pela autora (2026).

O somatório das correntes de saída reproduz com exatidão o valor da alimentação. O desvio absoluto é inferior a 0,1 kg/h para um processo de 200 toneladas por hora, o que representa um erro relativo da ordem de 10^{-4} estando dentro do limite de tolerância adotado.

O mesmo fechamento foi verificado para o etanol isoladamente, conforme mostra a Tabela 8. Esse balanço por componente é importante porque o etanol é o componente de interesse do processo e qualquer perda não contabilizada comprometeria a interpretação dos indicadores de desempenho.

Tabela 8 – Balanço de massa de etanol nas correntes de saída

Corrente	Fluxo mássico de etanol (kg/h)	Fração do total (%)
Alimentação	16.198,9	100,0
Etanol (produto)	16.194,1	99,97
Vinhaça Final	4,64	0,03
Purga CO ₂	0,185	< 0,01

Fonte: Elaborado pela autora (2026)

Quase todo o etanol da alimentação é recuperado na corrente de produto com 99,97% do total. A perda para a vinhaça representa apenas 0,03% da carga, e a quantidade arrastada pela purga de CO₂ é desprezível. Esses números confirmam que a simulação chegou a um estado fisicamente coerente e numericamente fechado.

Os mesmos valores serão retomados na próxima seção, onde são analisados como indicadores de desempenho do processo e comparados com os resultados de referência da literatura.

4.3 DESEMPENHO DA SIMULAÇÃO

A pergunta que justificou a construção desta simulação é objetiva: um processo baseado em CO₂ como gás de arraste consegue entregar etanol e recuperar o componente de forma comparável ao processo convencional de referência?

A resposta não emerge de um número isolado. Ela se constrói ao longo do processo, corrente por corrente, à medida que o etanol é concentrado desde os 8,1% da alimentação até os 93,0% do produto final — e os dados de simulação permitem acompanhar esse percurso com precisão.

4.3.1 Alimentação gerada pela fermentação

O processo recebe 200.000 kg/h de vinho alcoólico a 32°C e pressão atmosférica. A temperatura característica da saída da fermentação, adotada por Bessa et al. (2012) como condição de entrada do processo industrial de referência. Nessa corrente estão dissolvidos 16.198,9 kg/h de etanol, a quantidade que o processo precisa capturar. Esse número é a referência contra a qual toda a análise de recuperação será feita: é o etanol que entra, e é em relação a ele que perdas e eficiências serão medidas.

O vinho não alimenta as colunas a 32°C. Antes de entrar no sistema de separação, ele é aquecido até 94°C. Essa temperatura específica foi identificada na iniciação científica anterior (TATAGIBA, 2022) como a condição ótima de operação da coluna de absorção para esse sistema. Esse aquecimento não representa um consumo energético adicional ao processo: ele é realizado por meio de troca de calor com as próprias correntes de vinhaça que deixam as colunas de separação. As correntes de fundo das colunas CSCOL-2 e CSCOL-3 saem a 133,6°C e 143,7°C, respectivamente.

As correntes de fundo têm temperatura mais que suficiente para elevar o vinho de 32°C aos 94°C requeridos, como demonstram as condições das correntes de vinho aquecido na simulação. Após ceder calor ao vinho, a vinhaça chega combinada ao ponto de saída do processo a 45,8°C. A integração energética entre a vinhaça quente e a alimentação fria é, portanto, parte constitutiva do processo simulado: o subproduto aquoso que o processo rejeita é também o que aquece a matéria-prima que entra.

Com o vinho a 94°C e pressão atmosférica, o sistema de separação começa sua primeira operação. Antes de entrar na coluna de absorção, o vinho passa pelo vaso de expansão V-1, onde a combinação entre temperatura elevada e queda de pressão cria as condições para que as fases se separem espontaneamente. O resultado revela algo sobre a natureza do sistema: na fase vapor que emerge, a concentração de etanol salta para 39,15% em massa sendo quase cinco vezes acima dos 8,1% da alimentação.

Essa fração representa apenas 2.944 kg/h de fluxo total, mas carrega 1.153 kg/h de etanol, ou 7,1% de todo o etanol que entrou no processo. O CO₂ dissolvido no vinho faz o que a termodinâmica prevê: arrasta o componente mais volátil de forma desproporcional à sua concentração.

A Tabela 9 ilustra os dados de troca de calor entre as correntes Vinhaça II e Vinho + CO₂ em temperatura ambiente de fermentação (32°C).

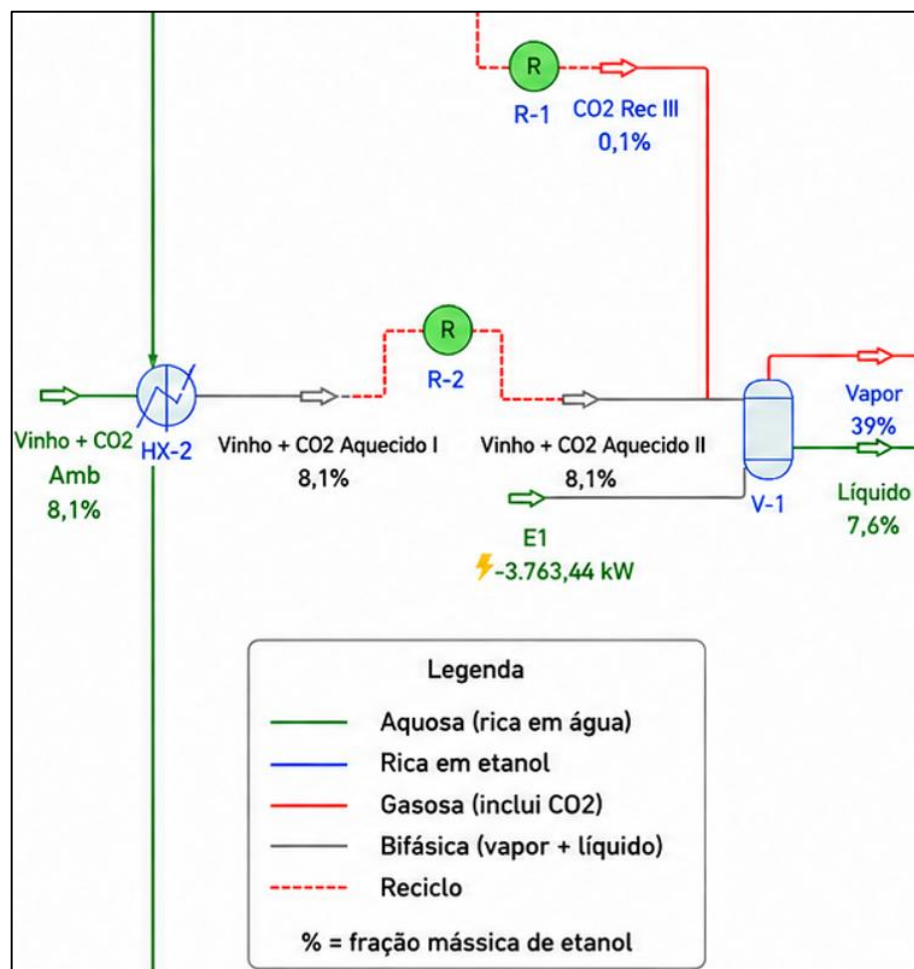
Tabela 9 – Processo de aquecimento do Vinho + CO₂

Propriedade	Vinho + CO2 Amb	Vinhaça III	Vinho + CO2 Aquecido II	Vinhaça Final
Temperatura (°C)	32,0	130,39	94,0	45,81
Pressão (bar)	1,013	3,000	1,013	3,000
Fluxo de Massa (kg/h)	200.000,0	182453,71	200.000,0	182453,71
Fração de Massa de Etanol	$8,10 \times 10^{-2}$	$2,54 \times 10^{-5}$	$8,10 \times 10^{-2}$	$2,54 \times 10^{-5}$

Fonte: Elaborado pela autora (2026).

Na destilação alcoólica tradicional, o vinho é alimentado diretamente à seção A sem uma etapa prévia de separação de fases a seco — o vapor é gerado progressivamente dentro da própria coluna, estágio a estágio, à medida que o calor fornecido pelo fundo promove a vaporização. Sendo assim, o comportamento da simulação alternativa não tem equivalente direto no processo convencional de Bessa et al. (2012). A presença de CO₂ dissolvido no processo alternativo, portanto, cria uma etapa de pré-fracionamento que o processo convencional não possui, e que já inicia o enriquecimento do etanol antes mesmo da primeira coluna.

Figura 9 – Pré-fracionamento em V-1



Fonte: Elaborado pela autora (2026).

A fase líquida que deixa o vaso, com 197.139 kg/h e 7,63% de etanol, mantém os 92,9% restantes do etanol alimentado. Essa corrente, junto com o vapor enriquecido, converge para a coluna de absorção CSCOL-1, onde o CO₂ reciclado entra como gás de arraste.

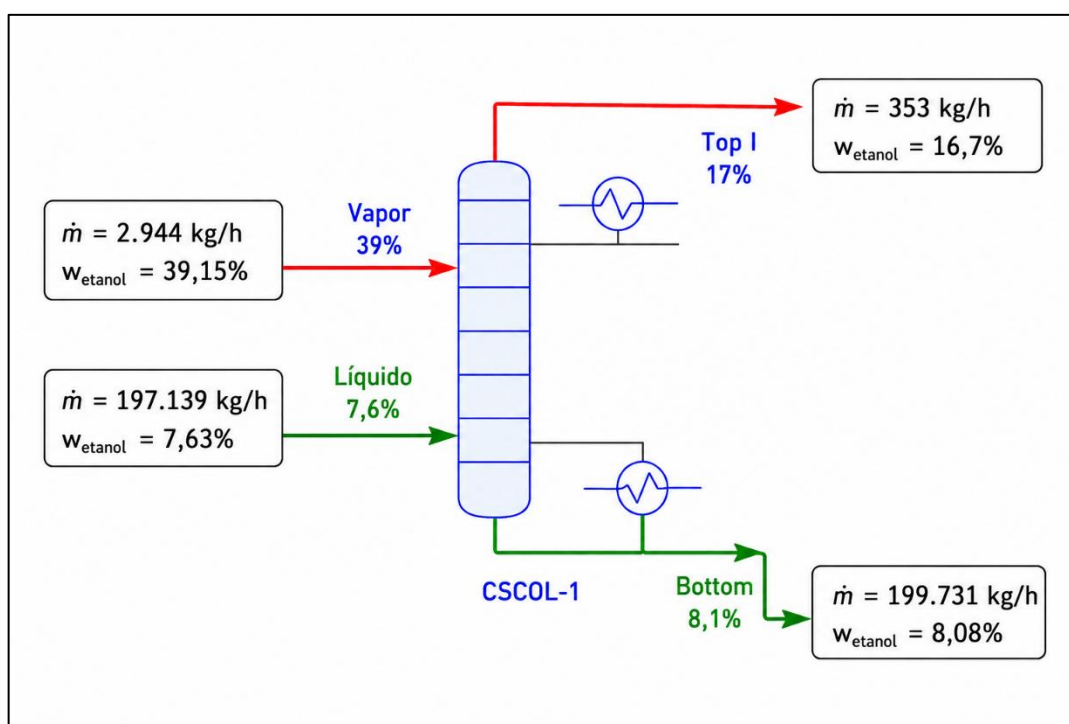
4.3.2 A concentração progressiva nas colunas

O sistema de colunas composto por CSCOL-1, CSCOL-2 e CSCOL-3 opera em pressões entre 1,5 e 4 bar. A elevação de pressão em relação à alimentação serve a um propósito específico: deslocar os pontos de bolha das misturas hidroalcoólicas e criar condições termodinâmicas favoráveis à separação progressiva do etanol da água. É o CO₂ que sustenta essa operação como gás de arraste: sua maior afinidade pelo etanol do que pela água, documentada pelos parâmetros da Lei de Henry e pelos dados de Sonogo et al. (2014), cria a força motriz que conduz o etanol para a fase vapor em cada estágio de contato.

4.3.2.1 CSCOL-1 – Coluna de absorção

A primeira coluna de separação, CSCOL-1, recebe simultaneamente as duas correntes do flash V-1 em regime de contracorrente: a fase vapor entra pela base da coluna enquanto a fase líquida alimenta pelo topo. Essa configuração é o núcleo operacional do processo alternativo proposto: ao ascender ao longo dos estágios da coluna, o CO₂ exerce sua função de gás de arraste, transferindo preferencialmente o etanol da fase líquida descendente para a fase vapor ascendente, conforme demonstrado experimentalmente por Sonego et al. (2014) para o sistema ternário etanol-água-CO₂.

Figura 10 – Parâmetros da CSCOL-1



Fonte: Elaborado pela autora (2026).

O resultado dessa interação entre fases é observado nas duas correntes de saída da CSCOL-1. A comparação entre as condições de saída e as condições de entrada revela o efeito de arraste: a fase vapor que alimentava a coluna com 39,15% de etanol cede massa ao contatar a fase líquida, e parte do etanol contido no líquido é transferida para o vapor. A corrente *Top I*, embora tenha vazão pequena, carrega etanol em concentração dupla em relação à alimentação líquida original, sendo encaminhada ao MIX-1 para processamento na CSCOL-3.

Tabela 10 – Correntes de CSCOL-1

Propriedades	Vapor (entrada)	Líquido (entrada)	Top I (saída)	Bottom (saída)
Temperatura (°C)	93,95	93,95	94,64	91,22
Pressão (bar)	1,100	1,100	2,000	2,500
Fluxo de Massa (kg/h)	2.944,0	197.139,0	352,8	199.731,0
Fração Mássica de Etanol (g/g)	3,92 x 10 ⁻¹	7,63 x 10 ⁻²	1,67 x 10 ⁻¹	8,08 x 10 ⁻²

Fonte: Elaborado pela autora (2026).

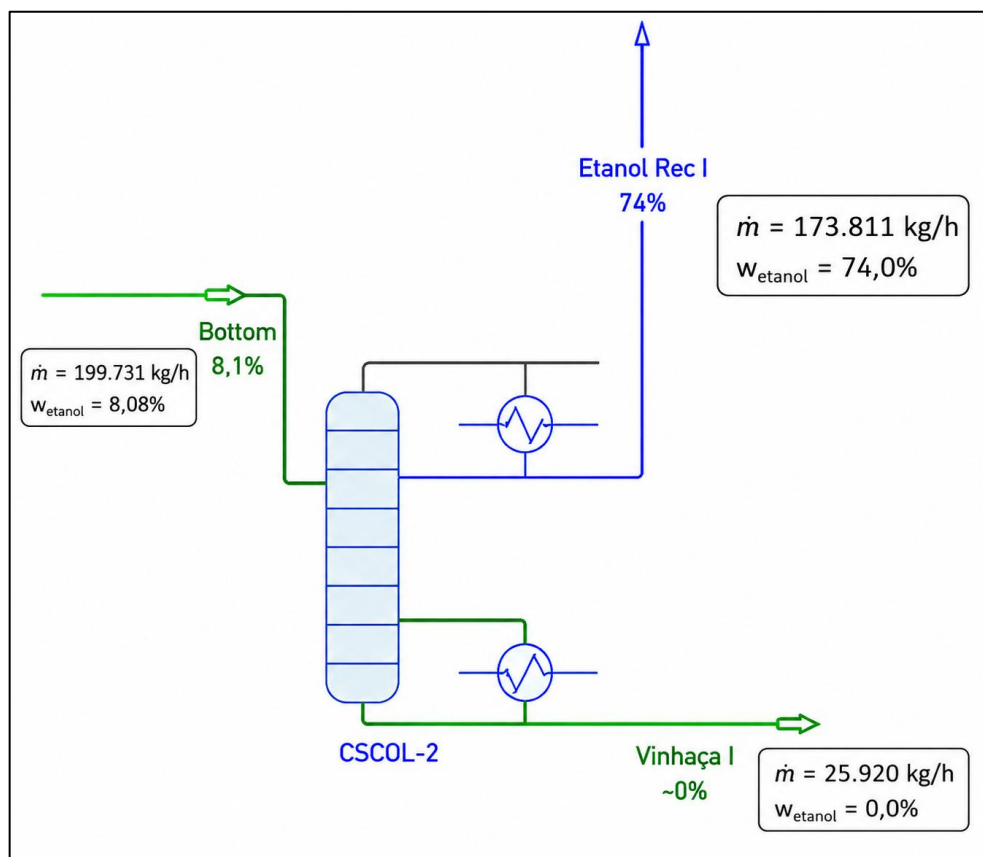
Do ponto de vista da separação total, a CSCOL-1 não é responsável por remover grandes quantidades absolutas de etanol da fase aquosa já que a corrente *Bottom* ainda contém 8,08% em massa de etanol, valor muito próximo ao da alimentação.

O papel da CSCOL-1 é separar o gás de arraste carregado de etanol da massa principal de líquido aquoso, criando uma corrente de vapor concentrada que alimentará a etapa final de retificação, e entregando à CSCOL-2 um líquido volumoso pronto para o esgotamento convencional.

4.3.2.2 CSCOL-2 – Coluna de esgotamento

A segunda coluna recebe a corrente Bottom da CSCOL-1 e realiza a etapa de maior impacto no balanço de massa global do processo: o esgotamento da fase aquosa. Por meio do contato entre o líquido descendente e o vapor ascendente gerado pelo refeedor, o etanol é progressivamente transferido da fase líquida para a fase vapor ao longo dos estágios da coluna.

Figura 11 – Parâmetros da CSCOL-2



Fonte: Elaborado pela autora (2026).

As duas saídas da CSCOL-2 ilustram com clareza a função dessa coluna. Pelo fundo, a corrente denominada Vinhaça I sai com 177.844 kg/h a $133,6 \text{ }^{\circ}\text{C}$ e pressão de 3 bar , com fração mássica de etanol de $2,56 \times 10^{-5}$. Esse valor indica a remoção praticamente completa do etanol, correspondente a menos de 5 kg de etanol em uma corrente de quase 178 toneladas por hora. Esse efluente aquoso, essencialmente água, é encaminhado ao sistema de gestão de vinhaça do processo. Pelo topo (ou corrente de destilado), sai a corrente Etanol Rec I, com 21.886 kg/h a $39,1 \text{ }^{\circ}\text{C}$ e $1,5 \text{ bar}$, e fração mássica de etanol de $0,7373$.

Tabela 11 – Separação em CSCOL-2

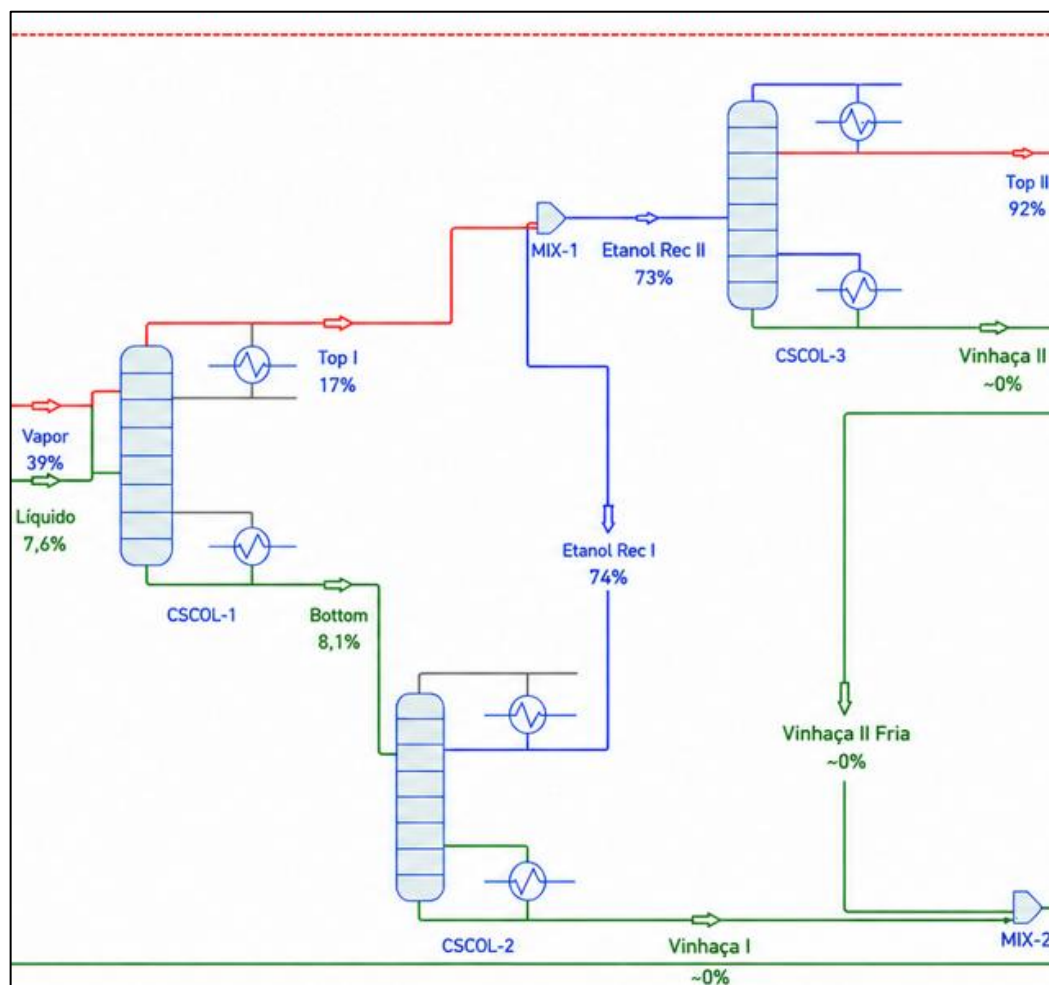
Propriedade	Bottom (entrada)	Etanol Rec I (saída)	Vinhaça I (saída)
Temperatura (°C)	91,20	39,10	134,00
Pressão (bar)	2,500	1,500	3,000
Fluxo de Massa (kg/h)	$2,00 \times 10^5$	$2,19 \times 10^4$	$1,78 \times 10^5$
Fração de Massa de Etanol (g/g)	$8,08 \times 10^{-2}$	$7,37 \times 10^{-1}$	$2,56 \times 10^{-5}$
Fluxo de Massa de Etanol (kg/h)	$1,61 \times 10^4$	$1,61 \times 10^4$	4,55

Fonte: Elaborado pela autora (2026).

A CSCOL-2 é, portanto, responsável pelo salto de concentração mais expressivo do processo: o etanol passa de 8,08% para 73,73% em massa em uma única coluna, enquanto 88,9% da massa de entrada é separada como vinhaça praticamente isenta de etanol. Esse resultado demonstra a capacidade da coluna de esgotamento em realizar a separação bruta entre a fração aquosa majoritária e a fração alcoólica concentrada, preparando esta última para a etapa final de retificação.

A corrente *Etanol Rec I* (73,73%) é então encaminhada ao MIX-1, onde se mistura com a corrente *Top I* proveniente da CSCOL-1 (16,7%), formando a corrente *Etanol Rec II* com 72,82% de etanol em massa e 22.239 kg/h. A diluição resultante da mistura é pequena — reflexo da diferença de escala entre as duas correntes —, e o conjunto segue para a CSCOL-3 já em um nível de concentração consideravelmente superior ao da alimentação original.

Figura 12 – Conexão entre CSCOL-2 e CSCOL-3



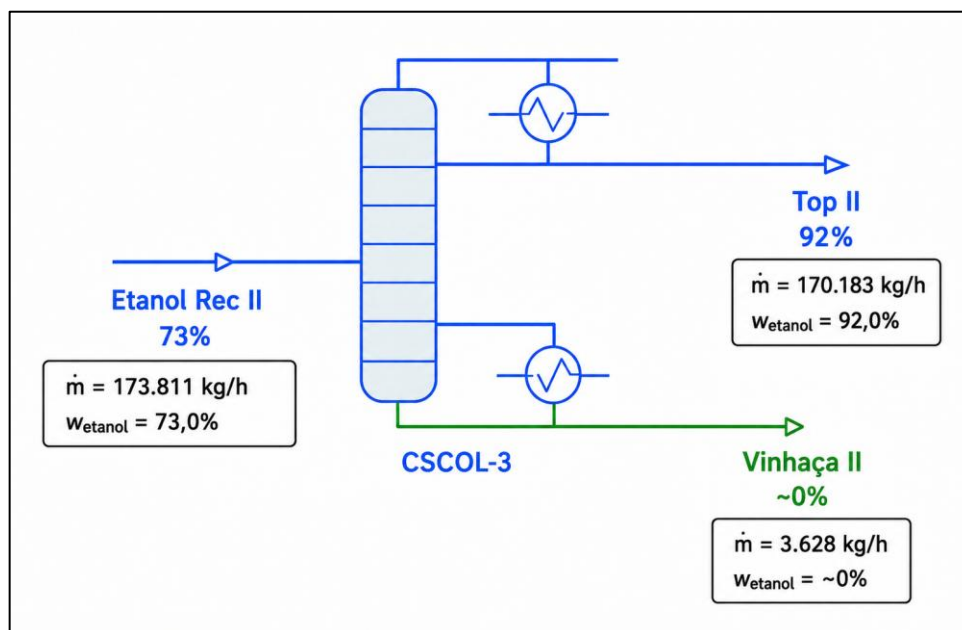
Fonte: Elaborado pela autora (2026).

4.3.2.3 CSCOL-3 — Coluna de retificação

A CSCOL-3 recebe como alimentação a corrente Etanol Rec II, com 22.239 kg/h a 41,8 °C, 1,5 bar e 72,82% de etanol em massa. Sua função é a retificação: concentrar o etanol acima do limite legal de 92,5% em massa estabelecido para o bioetanol hidratado combustível, removendo a fração residual de água e gerenciando o CO₂ dissolvido ainda presente na mistura.

Para melhor entendimento é importante ter uma ilustração de como as correntes estão conectadas.

Figura 13 – Parâmetros da CSCOL-3



Fonte: Elaborado pela autora (2026).

A CSCOL-3 produz duas correntes de saída direta e uma indireta que são muito relevantes para a análise dos resultados da coluna. A corrente de topo, *Top II*, com 352,8 kg/h, sai como vapor rico em CO_2 e é encaminhada ao sistema de recuperação cryogênica de dióxido de carbono.

A corrente de fundo, *Vinhaça II*, com 4.609 kg/h a 143,7 °C e 4 bar, contém a água residual removida durante a retificação e é enviada ao sistema de mistura de vinhaças.

A terceira saída, dessa vez indireta, passa pelo vaso de separação V-2, que corresponde ao produto concentrado em etanol, operado a -28,6 °C, onde o CO_2 ainda dissolvido é removido como corrente gasosa (CO_2 Rec I) e recirculado ao início do processo. Após a separação criogênica, a corrente resultante, *Etanol Rec III*, possui 17.413 kg/h e fração mássica de etanol de 0,9300.

As condições operacionais das três colunas para comparação direta estão sistematizadas na tabela a seguir.

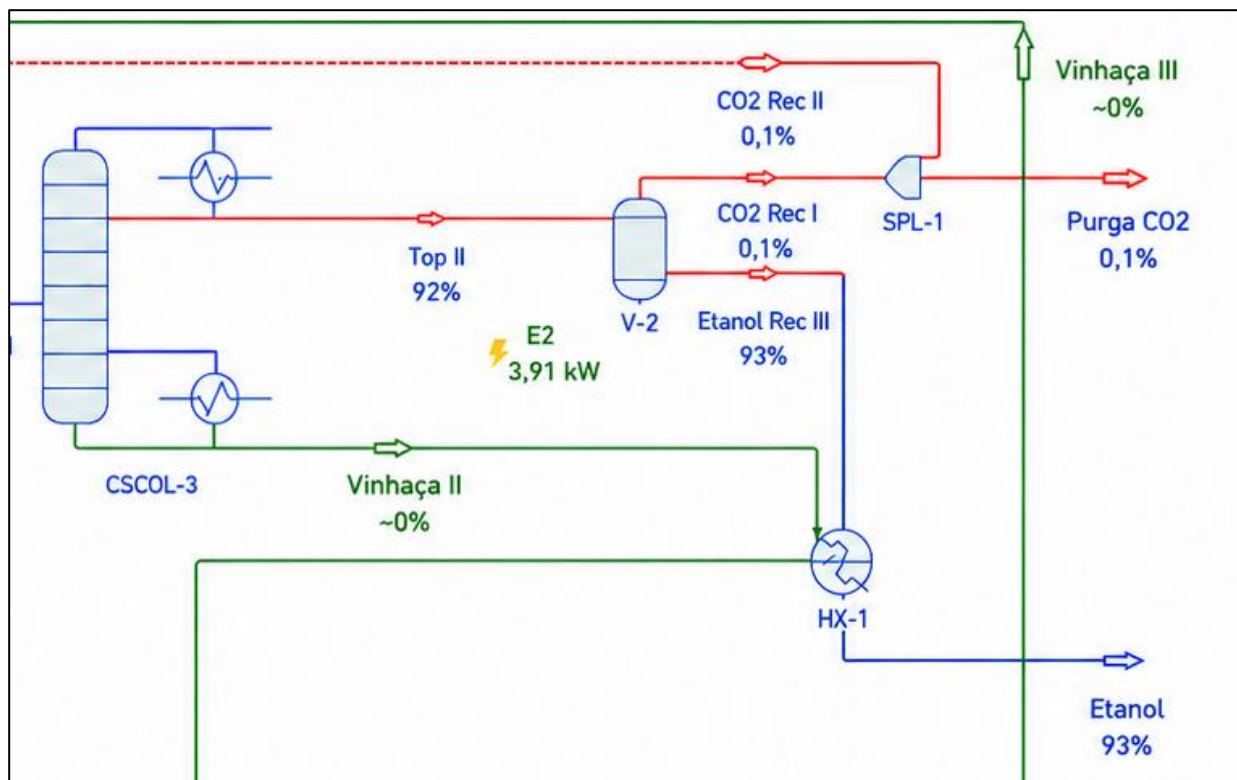
Tabela 12 – Balanço de massa e condições das correntes de reciclo e saída

Propriedade	Etanol Rec II	Top II	Vinhaça II	Etanol Rec III
Temperatura (°C)	41,80	-28,60	144,00	-28,60
Pressão (bar)	1,500	2,000	4,000	1,013
Fluxo de Massa (kg/h)	$2,22 \times 10^4$	$1,76 \times 10^4$	$4,61 \times 10^3$	$1,74 \times 10^4$
Fração de Massa de Etanol	$7,28 \times 10^{-1}$	$9,19 \times 10^{-1}$	$2,05 \times 10^{-5}$	$9,30 \times 10^{-1}$
Fluxo de Massa de Etanol (kg/h)	$1,62 \times 10^4$	$1,62 \times 10^4$	$9,43 \times 10^{-2}$	$1,62 \times 10^4$

Fonte: Elaborado pela autora (2026).

Essa corrente, ainda a $-28,6\text{ }^{\circ}\text{C}$, atravessa o trocador de calor HX-1 em integração com a corrente *Vinhaça II* quente, recuperando energia e atingindo $25\text{ }^{\circ}\text{C}$. O produto final, denominado *Etanol*, sai do processo com 17.413 kg/h , $25\text{ }^{\circ}\text{C}$, pressão atmosférica e fração mássica de etanol de $0,9300$ — valor que supera a especificação mínima de $92,5\%$ estabelecida pela legislação brasileira (BIASI et al., 2021), confirmando a viabilidade técnica do processo simulado.

Figura 14 – Correntes para obtenção do produto final



Fonte: Elaborado pela autora (2026).

O balanço global de etanol entre a alimentação e os produtos permite verificar a consistência da simulação: a corrente de entrada contém 16.199 kg/h de etanol ($200.000 \times 0,0810$), enquanto o produto final carrega 16.194 kg/h ($17.413 \times 0,9300$), com perdas de 4,6 kg/h pela *Vinhaça Final* e 0,19 kg/h pela *Purga CO₂*, totalizando uma recuperação de etanol superior a 99,9%. Esse resultado confirma que o fechamento do reciclo de CO₂ e a integração das correntes térmicas do processo são elementos essenciais não apenas para a viabilidade energética, mas para o controle das perdas de produto.

4.3.3 O produto final

A corrente de etanol produto deixa o sistema a 25°C e pressão atmosférica. Suas condições e composição estão apresentadas na Tabela 13.

Tabela 13 – Condições e composição da corrente de produto (Etanol)

Propriedade	Valor
Temperatura (°C)	25,0
Pressão (bar)	1,013
Fluxo mássico (kg/h)	17.412,6
Fração mássica de etanol (g/g)	$9,30 \times 10^{-1}$
Fração mássica de água (g/g)	$6,42 \times 10^{-2}$
Fração mássica de CO ₂ (g/g)	$5,76 \times 10^{-3}$

Fonte: Elaborado pela autora (2026).

A fração mássica de etanol no produto é de 93,0% em massa, acima do mínimo de 92,5% estabelecido pela legislação brasileira para o bioetanol hidratado combustível (BIASI et al., 2021). O processo entrega um produto dentro da especificação.

O CO₂ residual presente na corrente, na fração de 0,576% em massa, corresponde a dióxido de carbono dissolvido na fase líquida ao longo das operações de separação. Em condições reais de armazenamento e transferência à pressão atmosférica, essa fração degasificaria espontaneamente, sem qualquer efeito sobre a qualidade do combustível. A composição do produto reflete, portanto, um estado ligeiramente conservador em relação ao que seria observado industrialmente após degasificação natural.

4.3.4 A saída do processo pela vinhaça

Todo processo de purificação de etanol, independentemente de sua configuração, gera como subproduto inevitável uma corrente aquosa com teor residual de álcool denominada vinhaça. No processo convencional de destilação, essa corrente corresponde ao fundo da coluna de esgotamento (seção A), e suas características definem parte dos custos operacionais e do impacto ambiental do processo. No processo simulado neste trabalho, a vinhaça tem duas origens distintas, percorre um trajeto de aproveitamento térmico antes de deixar o sistema e apresenta características que podem ser comparadas tanto com o referencial de Bessa et al. (2012) quanto com os parâmetros do processo convencional.

Tabela 14 – Correntes de vinhaça ao longo do processo

Propriedade	Vinhaça I	Vinhaça II	Vinhaça Final
Temperatura (°C)	134,00	144,00	45,80
Pressão (bar)	3,000	4,000	3,000
Fluxo de Massa (kg/h)	$1,78 \times 10^5$	$4,61 \times 10^3$	$1,82 \times 10^5$
Fração de Massa de Etanol	$2,56 \times 10^{-5}$	$2,05 \times 10^{-5}$	$2,54 \times 10^{-5}$
Fluxo de Massa de Etanol (kg/h)	4,55	$9,43 \times 10^{-2}$	4,64

Fonte: Elaborado pela autora (2026).

A primeira e principal corrente de vinhaça, denominada *Vinhaça I*, é produzida no fundo da CSCOL-2. Essa corrente sai a 133,6 °C e 3 bar com vazão de 177.844 kg/h, carregando uma fração mássica de etanol de $2,56 \times 10^{-5}$. Em termos absolutos, isso representa apenas 4,55 kg/h de etanol distribuídos em quase 178 toneladas de água por hora. Essa corrente, operando sob pressão manométrica, reflete o resultado do esgotamento conduzido pela CSCOL-2: de cada 100 kg de etanol que entraram na coluna, apenas 0,0025 kg saem pela vinhaça.

A segunda corrente, *Vinhaça II*, provém do fundo da CSCOL-3, a coluna de retificação. Com 4.609 kg/h a 143,7 °C e 4 bar, trata-se de uma corrente de vazão menor, correspondente à fração aquosa removida durante a etapa de purificação final. Sua fração mássica de etanol é ainda mais baixa do que a da Vinhaça I, refletindo que a CSCOL-3 opera com alimentação já concentrada e, portanto, remove principalmente água residual da mistura.

As temperaturas elevadas em que ambas as vinhaças saem das colunas não representam uma perda imediata do ponto de vista energético. Essas correntes carregam entalpia que será aproveitada antes de deixar o processo, conforme descrito a seguir.

4.3.4.1 Integração térmica e destino da vinhaça

O caminho das correntes aquosas após as colunas evidencia uma das diferenças estruturais entre o processo simulado e a destilação convencional: a recuperação térmica da vinhaça para pré-aquecimento da alimentação. A *Vinhaça II*, ao sair da CSCOL-3, atravessa o trocador de calor HX-1 em contracorrente com a

corrente criogênica *Etanol Rec III* ($-28,6\text{ }^{\circ}\text{C}$), cedendo calor ao produto antes de ser resfriada. Após esse intercâmbio, a corrente resultante sai a $9,1\text{ }^{\circ}\text{C}$ com 4.609 kg/h , sendo então misturada no misturador MIX-2 com a corrente *Vinhaça I* ($133,6\text{ }^{\circ}\text{C}$, 177.844 kg/h).

O resultado dessa mistura é a corrente *Vinhaça III*, com 182.454 kg/h a $130,4\text{ }^{\circ}\text{C}$ e 3 bar . Essa temperatura ainda elevada é aproveitada no trocador de calor HX-2, onde a *Vinhaça III* entra em contracorrente com a alimentação fria *Vinho + CO₂ Amb* ($32\text{ }^{\circ}\text{C}$) e a aquece até $94\text{ }^{\circ}\text{C}$. A partir dos dados de entalpia específica das correntes obtidos na simulação, é possível calcular a carga térmica recuperada nessa etapa:

Eq. Cálculo de carga térmica recuperada nessa etapa.

$$Q_{HX-2} = \dot{m} \times (H_{Vinhaça\ III} - H_{Vinhaça\ Final}) = \quad (5)$$

$$182.454 \times [(-2069,5) - (-2520,1)] = 182.454 \times 450,6 \frac{kJ}{h} \quad (6)$$

$$\approx 22.827\text{ kW} \quad (7)$$

Esse valor representa a demanda de aquecimento da alimentação que é suprida integralmente pela vinhaça quente, sem necessidade de utilidade externa nessa etapa. Após ceder esse calor, a *Vinhaça Final* sai do processo a $45,8\text{ }^{\circ}\text{C}$, 3 bar , com 182.454 kg/h e fração mássica de etanol de $2,54 \times 10^{-5}$.

A redução de temperatura de $130,4\text{ }^{\circ}\text{C}$ para $45,8\text{ }^{\circ}\text{C}$ representa, portanto, não uma perda, mas a recuperação deliberada de aproximadamente $22,8\text{ MW}$ de energia que, no processo convencional, seria descartada com a vinhaça quente diretamente para o sistema de fertirrigação ou para a atmosfera. Nesse sentido, o gerenciamento térmico da vinhaça é parte constitutiva da estratégia de eficiência energética do processo simulado, e não apenas uma etapa de descarte.

4.3.4.2 Razão vinhaça-produto e comparação com o processo

Um indicador habitualmente utilizado para avaliar o impacto operacional e ambiental da vinhaça é a razão volumétrica entre o volume de vinhaça gerada e o volume de etanol produzido (L vinhaça / L etanol). Esse índice influencia diretamente a logística de destinação do efluente, os custos de fertirrigação e o dimensionamento de sistemas de armazenamento.

Para o cálculo desse indicador no processo simulado, utilizou-se a densidade da fase líquida da corrente de produto a $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($812,28\text{ kg/m}^3$, obtida da simulação) e a densidade da *Vinhaça Final* ($989,24\text{ kg/m}^3$):

Eq. Cálculo de razão volumétrica vinhaça/etanol

$$\text{Volume de vinhaça: } 182.454 \text{ kg/h} \div 989,24 \text{ kg/m}^3 = 184,4 \text{ m}^3/\text{h} \quad (8)$$

$$\text{Volume de etanol líquido: } 17.337 \text{ kg/h} \div 812,28 \text{ kg/m}^3 = 21,3 \text{ m}^3/\text{h} \quad (9)$$

$$\text{Razão: } 184,4 / 21,3 \approx 8,6 \text{ L vinhaça / L etanol} \quad (10)$$

No processo convencional de destilação descrito por Batista et al. (2012), a razão volumétrica típica situa-se entre 10 e 13 litros de vinhaça por litro de etanol produzido, a depender da concentração do vinho de alimentação e das condições operacionais das colunas.

O processo simulado neste trabalho apresenta razão de 8,6 L/L, resultado coerente com a configuração alternativa que concentra melhor o etanol nas colunas de separação e evita o arraste excessivo de água para as etapas finais de purificação. Ainda que essa comparação não possa ser feita em bases estritamente idênticas, visto que o processo convencional e o processo com CO₂ têm configurações distintas, o resultado indica que a alternativa simulada não penaliza o indicador de geração de efluente em relação ao processo de referência.

4.3.5 Fechamento do reciclo de CO₂

Até este ponto, a análise demonstrou que o processo foi capaz de produzir etanol hidratado dentro da especificação desejada e recuperar praticamente todo o etanol alimentado. No entanto, a viabilidade da proposta não depende apenas da qualidade do produto obtido. Como discutido na revisão bibliográfica, o dióxido de carbono é o elemento que sustenta a estratégia de separação adotada neste trabalho. Consequentemente, compreender o comportamento do CO₂ ao longo do sistema é fundamental para avaliar se a configuração simulada pode operar de forma contínua.

A necessidade desse acompanhamento se torna evidente quando se observa a própria origem do gás de arraste. Embora a fermentação alcoólica produza grandes quantidades de dióxido de carbono, estudos de Sonego et al. (2014) e Rodrigues et al. (2025) indicam que essa geração não é suficiente para sustentar continuamente as elevadas vazões de gás necessárias para o processo de *stripping*. Por essa razão, sistemas industriais dependem de circuitos de recirculação capazes de recuperar e reutilizar a maior parte do CO₂ empregado na separação.

O circuito de reciclo implementado na simulação. Após atravessar as colunas de separação, o CO₂ é encaminhado ao sistema de recuperação, onde parte do etanol residual é removida antes do retorno ao início do processo. Uma pequena fração é

retirada por meio da corrente de purga, evitando o acúmulo progressivo de componentes indesejados no circuito fechado.

Os resultados mostram que a corrente de purga corresponde a apenas 133,7 kg/h, valor equivalente a aproximadamente 0,07% da vazão mássica total de alimentação do processo. Esse resultado indica que praticamente todo o dióxido de carbono circula repetidamente pelo sistema antes de ser descartado, reduzindo significativamente a necessidade de reposição de gás fresco.

A baixa vazão de purga possui ainda uma segunda implicação importante. Como parte do etanol permanece dissolvida ou arrastada pelo CO₂ ao longo do processo, toda corrente descartada representa também uma potencial perda de produto. No cenário simulado, a quantidade de etanol presente na purga foi de apenas 0,185 kg/h, correspondendo a menos de 0,01% do etanol alimentado. Esse valor é duas ordens de grandeza inferior às perdas observadas na vinhaça e pode ser considerado desprezível para fins industriais.

Observa-se que a maior parte do etanol arrastado pelo CO₂ é recuperada nas etapas subsequentes de separação, retornando ao fluxo principal do processo. Dessa forma, o circuito de recirculação não atua apenas como mecanismo de economia de gás, mas também como etapa auxiliar de recuperação de etanol.

Sob o ponto de vista operacional, esse comportamento é particularmente relevante. Caso o CO₂ fosse descartado após uma única passagem pelo processo, seriam necessárias vazões muito superiores de gás fresco para manter a capacidade de separação. Além do aumento do consumo energético associado à compressão e ao condicionamento do gás, ocorreria também um aumento proporcional das perdas de etanol para a corrente gasosa. O fechamento do reciclo evita ambos os problemas simultaneamente.

Os resultados obtidos indicam, portanto, que o circuito de recuperação e reciclo de CO₂ foi capaz de cumprir sua função dentro da configuração simulada. O sistema operou com perdas reduzidas de gás e de etanol, mantendo a estabilidade dos balanços de massa e contribuindo para que a recuperação global de etanol atingisse 99,97%. Dessa forma, o reciclo deixa de ser apenas um detalhe de processo e passa a ser um dos elementos centrais para a viabilidade técnica da proposta estudada.

4.4 DESEMPENHO EM PERSPECTIVA

Com o produto e a vinhaça caracterizados, os três indicadores centrais de desempenho podem ser calculados e colocados em perspectiva frente à referência de Bessa et al. (2012). A Tabela 15 reúne essa comparação.

Tabela 15 – Comparação de desempenho com a referência bibliográfica

Indicador	Este trabalho	Bessa et al. (2012)
Fração mássica de etanol no produto (g/g)	$9,30 \times 10^{-1}$	$\sim 9,30 \times 10^{-1}$
Recuperação de etanol — ER (%)	99,97	99,20
Fração mássica de etanol na vinhaça (g/g)	$2,54 \times 10^{-5}$	$< 2,00 \times 10^{-4}$

Fonte: Elaborado pela autora (2026).

Os três indicadores superam os valores de referência. A recuperação de 99,97% excede em quase um ponto percentual o valor de 99,2% reportado por Bessa et al. (2012). Em termos absolutos, essa diferença equivale a 124 kg/h a mais de etanol recuperado a cada hora de operação. Isto apresenta um resultado direto da eficiência de contato entre o CO₂ e a fase líquida ao longo dos estágios da coluna de absorção.

A perda de etanol na vinhaça, com fração mássica de $2,54 \times 10^{-5}$ é aproximadamente oito vezes menor do que o limite de $2,0 \times 10^{-4}$ adotado por Bessa et al. (2012). Esse resultado mostra que a eficiência de esgotamento atingida pelo sistema simulado não apenas cumpre o critério de desempenho da referência, mas o supera.

A combinação entre produto dentro da especificação legal, recuperação de etanol superior à referência e perdas na vinhaça significativamente abaixo do limite aceito pela literatura responde com clareza à pergunta que motivou a simulação: o esgotamento com CO₂ é, nos indicadores de produto e recuperação avaliados, uma alternativa tecnicamente comparável. Além disso, nos dois principais indicadores de eficiência, superior ao processo convencional de destilação tomado como referência.

5 CONCLUSÃO

Este trabalho teve como objetivo desenvolver e avaliar, por meio de simulação computacional, um processo alternativo de purificação de etanol utilizando dióxido de carbono como gás de arraste, em substituição parcial à estratégia convencional de destilação alcoólica. Para isso, foi construído um modelo integrado no DWSIM e no ChemSep, contemplando as etapas de absorção, esgotamento, retificação, recuperação de calor e reciclo de CO₂.

Os resultados obtidos demonstraram que a configuração proposta foi capaz de produzir etanol hidratado dentro da especificação estabelecida pela legislação brasileira, alcançando fração mássica de etanol de 93,0%, superior ao mínimo de 92,5% exigido para o combustível comercial. Paralelamente, o processo apresentou recuperação global de etanol de 99,97%, valor superior ao reportado por Bessa et al. (2012) para o processo convencional de referência.

As perdas de etanol nas correntes de descarte também se mostraram reduzidas. A vinhaça final apresentou fração mássica de etanol de $2,54 \times 10^{-5}$, enquanto a perda associada à corrente de purga do reciclo de CO₂ foi inferior a 0,01% da carga de etanol alimentada. Esses resultados indicam elevada eficiência de separação e demonstram a capacidade do sistema em minimizar perdas de produto ao longo das operações unitárias.

Do ponto de vista operacional, verificou-se que o dióxido de carbono desempenha papel central na estratégia de separação proposta. A presença do CO₂ permitiu o enriquecimento precoce do etanol já na etapa de pré-fracionamento realizada no vaso flash V-1, além de atuar como agente de arraste ao longo da coluna de absorção. O fechamento do circuito de reciclo reduziu as perdas de gás e contribuiu para a manutenção da elevada recuperação global de etanol observada na simulação.

A integração térmica implementada entre as correntes de processo também apresentou resultados relevantes. O aproveitamento do calor contido nas correntes de vinhaça permitiu suprir integralmente a demanda de aquecimento da alimentação, recuperando aproximadamente 22,8 MW de energia térmica. Dessa forma, a vinhaça deixou de representar apenas um efluente do processo e passou a atuar como fonte interna de energia para o próprio sistema.

Além disso, a razão volumétrica entre vinhaça e etanol obtida foi de aproximadamente 8,6 L/L, valor inferior à faixa tipicamente reportada para processos

convencionais de destilação, indicando que a alternativa estudada não implica aumento da geração de efluentes e pode contribuir para a redução das demandas associadas ao manejo da vinhaça.

Em conjunto, os resultados demonstram que a utilização de CO₂ como gás de arraste constitui uma alternativa tecnicamente viável para a purificação de etanol, apresentando desempenho comparável ou superior ao processo convencional nos indicadores avaliados. O estudo também evidencia o potencial da simulação computacional como ferramenta para análise e desenvolvimento de novas configurações de processo, reduzindo custos experimentais e permitindo a avaliação prévia de alternativas tecnológicas.

Como continuidade deste trabalho, recomenda-se a realização de estudos voltados à avaliação energética detalhada do processo, à análise econômica da operação com reciclo de CO₂ e à validação experimental das condições simuladas, de modo a aprofundar a compreensão da viabilidade industrial da tecnologia proposta.

6 REFERÊNCIAS

- ANP. AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS. **Etanol**. Brasília, DF, 2024. Disponível em: <https://www.gov.br/anp/pt-br/assuntos/producao-e-fornecimentode-biocombustiveis/etanol>. Acesso em: 27 abr. 2026.
- BANCO DO NORDESTE DO BRASIL. **Produção de etanol no Brasil: panorama recente e perspectivas**. Fortaleza: BNB, 2025. Disponível em: <https://www.bnb.gov.br/revista/cse/article/download/3244/2255/11149>. Acesso em: 27 abr. 2026.
- BATISTA, F. R. M. et al. Computational simulation applied to the investigation of industrial plants for bioethanol distillation. **Computers & Chemical Engineering**, v. 46, p. 1–16, 2012. Disponível em: <https://www.researchgate.net/publication/235801809>. Acesso em: 27 abr. 2026.
- BESSA, L. C. B. A.; BATISTA, F. R. M.; MEIRELLES, A. J. A. Double-effect integration of multicomponent alcoholic distillation columns. **Energy**, v. 45, n. 1, p. 603–612, 2012.
- BIASI, L. C. et al. A new unified model to simulate columns with multiple phase divisions and their impact on energy savings. **Computers & Chemical Engineering**, v. 140, p. 106937, 2020.
- BIASI, L. C. K. et al. Parastillation and metastillation applied to bioethanol and neutral alcohol purification with energy savings. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, v. 162, p. 108334, 2021.
- BORGES FILHO, E. P.; DETTMER, A. Review of ethanol distillation process simulation: evolution, challenges, and perspectives. **Journal of Chemical Technology & Biotechnology**, v. 100, p. 1529–1540, 2025.
- BRASIL. Ministério de Minas e Energia. **Programa Nacional do Alcool completa 49 anos com impactos positivos na economia e no meio ambiente**. Brasília, DF, 2024. Disponível em: <https://www.gov.br/mme/pt-br/assuntos/noticias/programa-nacional-do-alcool-completa-49-anos-com-impactos-positivos-na-economia-e-no-meio-ambiente>. Acesso em: 27 abr. 2026.
- EPE. EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA. **Ethanol supply scenarios and Otto cycle demand: 2026–2035**. Rio de Janeiro: EPE, 2025. Disponível em: <https://www.epe.gov.br/sites-pt/publicacoes-dadosabertos/publicacoes/PublicacoesArquivos/publicacao-255/topico797/ETHANOL%20SUPPLY%20SCENARIOS%20AND%20OTTO2CYCLE%20DEMAND%202026%20-%202035.pdf>. Acesso em: 27 abr. 2026.
- GMEHLING, J. et al. **Chemical Thermodynamics for Process Simulation**. 2. ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2019.
- IPCC. INTERGOVERNMENTAL PANEL ON CLIMATE CHANGE. **Climate Change 2023: synthesis report**. Geneva: IPCC, 2023. Disponível em: <https://www.ipcc.ch/report/ar6/syr/>. Acesso em: 27 abr. 2026.
- IEA. INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. **Renewables 2023: analysis and forecast to 2028**. Paris: IEA, 2023. Disponível em: <https://www.iea.org/reports/renewables-2023>. Acesso em: 27 abr. 2026.

MATUGI, K. et al. Vapor-liquid equilibrium calculation for simulation of bioethanol concentration from sugarcane. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, 2018.

PALACIOS-BERECHE, R. et al. New alternatives for the fermentation process in the ethanol production from sugarcane: extractive and low temperature fermentation. **Energy**, v. 70, p. 595–604, 2014.

PRAUSNITZ, J. M.; LICHTENTHALER, R. N.; AZEVEDO, E. G. **Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria**. 3. ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, 1999.

RENON, H.; PRAUSNITZ, J. M. Local compositions in thermodynamic excess functions for liquid mixtures. **AIChE Journal**, v. 14, n. 1, p. 135–144, 1968.

RODRIGUES, K. C. S. et al. Extractive ethanol fermentation with ethanol recovery by absorption in open and closed systems. **Fermentation**, v. 11, n. 1, p. 12, 2025. Disponível em: <https://www.mdpi.com/2311-5637/11/1/12>. Acesso em: 04 mai. 2026.

SCHWARZ, C. E. Effect of variation between different experimental VLE data sets on thermodynamic model and separation predictions: NRTL correlation of the ethanol + water system. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, 2024.

SILVA, L. F. **Dados de equilíbrio líquido-vapor do sistema ternário etanol-água-propilenoglicol à pressão normal: avaliação experimental e modelagem termodinâmica**. 2020. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ, 2020.

SONEGO, J. L. S. et al. Extractive batch fermentation with CO₂ stripping for ethanol production in a bubble column bioreactor: experimental and modeling. **Energy & Fuels**, v. 28, p. 7552–7559, 2014.

SPOGIS, N. **Aulas de simulação de processos no DWSIM**. Campinas: AI4Tech/UNICAMP, 2024. Disponível em: https://www.youtube.com/live/3Y_Jc2TuL3M. Acesso em: 04 mai. 2026.

SPOGIS, N. **Repositório DWSIM – materiais e simulações**. Campinas: AI4Tech/UNICAMP, 2024. Disponível em: <https://github.com/Spogis>. Acesso em: 04 mai. 2026.

TATAGIBA, M. M. **Simulação computacional de refino alternativo de etanol: substituição da destilação primária por stripping de CO₂**. Araraquara: UNESP, 2022.

UNICA. **UNIÃO DA INDÚSTRIA DE CANA-DE-AÇÚCAR E BIOENERGIA. Acompanhamento quinzenal da safra 2024/2025 – região Centro-Sul**. São Paulo: UNICA, 2024. Disponível em: <https://unicadata.com.br/arquivos/pdfs/2024/04/bca13b91845a97ad147659dc3da3ebbe.pdf>. Acesso em: 27 abr. 2026.

VALDERRAMA, J. O.; FAÚNDEZ, C. A.; TOSELLI, L. A. Advances on modeling and simulation of alcoholic distillation. Part 1: thermodynamic modeling. **Food and Bioproducts Processing**, v. 90, n. 4, p. 819–831, 2012.

VALDERRAMA, J. O.; TOSELLI, L. A.; FAÚNDEZ, C. A. Advances on modeling and simulation of alcoholic distillation. Part 2: process simulation. **Food and Bioproducts Processing**, v. 90, n. 4, p. 832–840, 2012.