

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA  
QUÍMICA

Erich Potrich

**Otimização multiobjetivo da produção integrada de etanol de  
primeira e segunda geração e energia elétrica: aspectos  
ambientais e de processo**

São Carlos,

2015



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA  
QUÍMICA

Erich Potrich

**Otimização multiobjetivo da produção integrada de etanol de  
primeira e segunda geração e energia elétrica: aspectos  
ambientais e de processo**

Dissertação apresentada ao Programa de  
Pós-Graduação em Engenharia Química  
da Universidade Federal de São Carlos  
para a obtenção do título de Mestre em  
Engenharia Química

Orientadora: Prof<sup>ª</sup>. Dra. Caliane Bastos Borba Costa

Co-orientador: Prof. Dr. Antonio José Gonçalves da Cruz

São Carlos,

2015

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da  
Biblioteca Comunitária da UFSCar**

P864om Potrich, Erich.  
Otimização multiobjetivo da produção integrada de etanol de primeira e segunda geração e energia elétrica : aspectos ambientais e de processo / Erich Potrich. -- São Carlos : UFSCar, 2015.  
115 p.

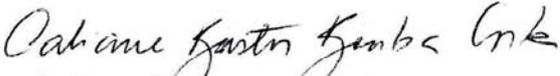
Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2015.

1. Modelagem computacional e simulação. 2. Otimização. 3. Etanol. 4. Biorrefinarias. 5. Cana-de-açúcar. 6. Vinhaça. I. Título.

CDD: 003.3 (20<sup>a</sup>)

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE ERICH POTRICH APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, EM 31 DE MARÇO DE 2015.

BANCA EXAMINADORA:

  
Caliane Bastos Borba Costa  
**Orientadora, UFSCar**

  
Charles Dayan Farias de Jesus  
**CTBE**

  
Ruy de Sousa Júnior  
**UFSCar**



## **Agradecimentos**

Agradeço aos meus pais, Edith e Nédio, ao meu irmão, Edinaldo, e à minha cunhada, Marciana, pelo apoio e pelo incentivo a continuar estudando e adquirindo novos conhecimentos.

À minha namorada, Larissa, por permanecer ao meu lado durante todos os momentos e por me dar forças para continuar, apesar das dificuldades.

Aos meus orientadores profa. Caliane Bastos Borba Costa e prof. Antonio José Gonçalves da Cruz pela paciência, pelas críticas construtivas, pelos conhecimentos passados e pela orientação.

Aos meus colegas do laboratório por passarem seus conhecimentos e pelas discussões que enriqueceram o meu trabalho.

Aos funcionários do Departamento de Engenharia Química.

Ao CNPq, à Capes e à FAPESP pelo apoio financeiro.



*“Talvez não tenha conseguido fazer o melhor, mas lutei para que o melhor fosse feito. Não sou o que deveria ser, mas Graças a Deus, não sou o que era antes”.*

**Marthin Luther King**



## Resumo

Com o crescente aumento do consumo de combustíveis e o aumento da preocupação com o fim dos combustíveis fósseis e com seus danos ambientais, o etanol de segunda geração (E2G), produzido a partir do bagaço e da palha da cana-de-açúcar, surge como uma opção para aumentar a produção de etanol de primeira geração (E1G), produzido a partir da cana-de-açúcar. O objetivo desse trabalho foi avaliar a produção de etanol, a geração de energia elétrica, a emissão de CO<sub>2</sub> e de vinhaça em uma destilaria autônoma de E1G e E2G empregando a otimização multiobjetivo. Essa avaliação foi formulada em termos de problemas de otimização multiobjetivo na biorrefinaria virtual modelada em EMSO (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*). A modelagem de circuitos fechados de água, da produção de CO<sub>2</sub> na caldeira e no fermentador, e do processo de concentração das correntes de caldo e de vinhaça por meio de evaporadores múltiplo efeito, bem como a otimização multiobjetivo envolvendo a produção de E1G e E2G, geração de energia e produção de vinhaça, foram realizados. A biorrefinaria modelada processa 500.000 kg/h de cana-de-açúcar e queima, além de bagaço, 35.000 kg/h de palha de cana-de-açúcar. Com os evaporadores múltiplo efeito para a concentração do caldo, foi possível uma economia na ordem de 18% no vapor de escape da turbina de contrapressão em comparação a um processo de simples efeito. A concentração da vinhaça, por meio de evaporadores múltiplo efeito, pode provocar uma redução da vazão de mais de 70%. As soluções não-dominadas obtidas nos estudos de otimização multiobjetivo mostraram uma relação entre a produção de etanol, de vinhaça, de energia e de CO<sub>2</sub> em função das variáveis de decisão: fração de bagaço destinado para a produção de E2G, e fração de vinhaça destinada para a concentração nos evaporadores de múltiplo efeito. As soluções não-dominadas se encontram no intervalo de fração de bagaço entre 0,01% e 50,09%, enquanto a fração de vinhaça compreende valores acima de 14,09%. Entre as soluções, a vazão de etanol ficou entre 35.730 kg/h e 41.633 kg/h. A produção de CO<sub>2</sub> pode chegar a valores acima dos 187.000 kg/h, considerando o CO<sub>2</sub> liberado nos fermentadores e na caldeira. No quesito geração de energia elétrica, consegue-se chegar a valores acima de 83.000 kW. Os resultados mostraram que a metodologia utilizada foi eficiente e os objetivos propostos foram atendidos.

**Palavras-chave:** Otimização multiobjetivo, Etanol de segunda geração, biorrefinaria de cana-de-açúcar, concentração de vinhaça.



## Abstract

Currently there is a growing increase in fuel consumption, but also an increased concern about the end of fossil fuels and their environmental damage. In this scenario, second-generation ethanol (E2G), produced from sugarcane bagasse, appears as an option to increase the production of first generation ethanol (E1G), produced from sugarcane. The aim of this study was to evaluate the production of ethanol, the generation of electricity, CO<sub>2</sub> emissions and vinasse into an E1G and E2G autonomous distillery through multi-objective optimization. This assessment has been formulated in terms of multi-objective optimization problems in virtual biorefinery modeled in EMSO (Environment for Modeling, Simulation and Optimization). The modeling of closed water circuits, CO<sub>2</sub> production in the boiler and in the fermenter, and the process of concentrating the juice and vinasse streams through multiple-effect evaporators, and the multiobjective optimization involving the production of E2G, electric energy and production of CO<sub>2</sub> and vinasse were performed. The modeled biorefinery processes 500,000 kg/h of sugarcane and burns, in addition to bagasse, 35,000 kg/h of sugarcane straw. The multiple effect evaporators for the broth concentration generated savings of around 18% in turbine backpressure exhaust steam when compared to a process with a single effect. The concentration of the vinasse through multiple-effect evaporators can cause a reduction in flow rate of more than 70%. The obtained non-dominated solutions in multiobjective optimization studies have shown a relationship among the production of ethanol, vinasse, energy and CO<sub>2</sub> as a function of the decision variables: bagasse fraction diverted to produce E2G, and fraction of vinasse concentrated in multiple effect evaporators. Non-dominated solutions are in the bagasse fraction range from 0.01% to 50.09%, and vinasse fraction comprises values greater than 14.09%. Among the solutions, ethanol flow was between 35,730 kg/h and 41,633 kg/h. CO<sub>2</sub> production can reach values above 187,000 kg/h considering the CO<sub>2</sub> released in the fermenters and in the boiler. On the issue of electricity generation, values above 83,000 kW can be reached. The results showed that the methodology used was efficient and the proposed objectives have been met.

**Keywords:** Multiobjective optimization, Second Generation ethanol, Sugarcane biorefinery, Vinasse Concentration.



# Sumário

1	Introdução .....	1
1.1	Contextualização e motivação.....	1
1.2	Objetivo.....	2
2	Estado da arte.....	4
2.1	Etanol produzido a partir do caldo da cana-de-açúcar .....	4
2.1.1	Colheita e limpeza .....	4
2.1.2	Extração dos açúcares .....	5
2.1.3	Purificação do caldo.....	6
2.1.4	Fermentação.....	7
2.1.5	Destilação.....	8
2.1.6	Concentração da Vinhaça .....	10
2.1.7	Cogeração de energia.....	11
2.1.7.1	Excesso de ar nas caldeiras.....	12
2.2	Etanol produzido a partir da biomassa residual da cana-de-açúcar (bagaço/palha) .....	13
2.2.1	Pré-Tratamento .....	15
2.2.2	Hidrólise da biomassa.....	16
2.2.3	Fermentação das pentoses.....	18
2.3	Uso de água na usina.....	18
2.4	EMSO.....	20
2.4.1	VRTherm .....	21
2.5	Trabalhos anteriores na área.....	23



2.6	Biorrefinaria virtual.....	25
2.6.1	Correntes.....	25
2.6.2	Composição da cana-de-açúcar.....	28
2.6.3	Operação unitária de limpeza.....	28
2.6.4	Moagem.....	29
2.6.5	Tratamento do caldo.....	30
2.6.6	Concentração do caldo.....	31
2.6.7	Fermentação.....	33
2.6.8	Destilação.....	36
2.6.9	Cogeração de energia.....	36
2.6.10	Etanol de segunda geração.....	38
2.6.10.1	Pré-tratamento ácido.....	38
2.6.10.2	Fermentador de pentoses.....	40
2.6.10.3	Hidrólise.....	41
2.7	Integração energética.....	43
2.7.1.1	Análise Pinch.....	44
2.7.1.1.1	Curva composta.....	44
2.7.1.1.2	Diagrama de grade.....	45
2.8	Otimização.....	46
2.8.1	Método Aleatório.....	49
2.8.1.1	Otimização por enxame de partículas - PSO.....	50
2.8.2	Otimização multiobjetivo.....	52



2.8.2.1	Algoritmo multiobjetivo com enxame de partículas implementado no EMSO	53
2.8.2.1.1	Principais ferramentas do algoritmo.....	54
2.8.2.1.2	Estrutura do algoritmo.....	55
3	Metodologia.....	59
3.1	Modelagem.....	59
3.1.1	Correntes.....	59
3.1.2	Operação unitária de limpeza.....	60
3.1.3	Concentração do caldo.....	61
3.1.4	Fermentação.....	63
3.1.5	Concentração de vinhaça.....	64
3.1.6	Cogeração de energia.....	66
3.1.7	Integração energética.....	71
3.2	Otimização multiobjetivo.....	73
4	Resultados e Discussão.....	78
5	Considerações Finais e Sugestões para Trabalhos Futuros.....	99
5.1	Sugestões para trabalhos futuros.....	100
	Referências Bibliográficas.....	102
	Apêndice.....	109
	A1 - Balanço estequiométrico envolvendo a proporção molar de saída de CO/CO <sub>2</sub> (f) .....	109
	A2 - Tabelas das soluções não-dominadas obtidas pelo EMSO.....	111



## Lista de figuras

Figura 1 – Fluxograma do processo de fabricação do etanol hidratado de primeira geração.....	4
Figura 2 - Esquema simplificado do processo de destilação empregado na indústria.	8
Figura 3- Esquema estrutural simplificado das fibras do material lignocelulósico..	14
Figura 4 – Representação esquemática do pré-tratamento sobre o material lignocelulósico.....	15
Figura 5 – EMSO com os seus modos gráfico, texto e resposta. ....	21
Figura 6 - Fluxograma desenvolvido pelo grupo de pesquisa em simulação e otimização de processos químicos da UFSCar.....	27
Figura 7 – Fluxograma da etapa de tratamento do caldo.....	31
Figura 8 – Fluxograma simplificado do processo de produção do E2G. ....	38
Figura 9- Esquema simplificado do processo de hidrólise do E2G.....	42
Figura 10 – Exemplo de uma curva composta. ....	45
Figura 11 – Diagrama de grade integrada com os trocadores de calor.....	46
Figura 12 – Espaço de busca do problema de otimização e as regiões factíveis e infactíveis. ....	48
Figura 13 – Evolução típica de um método probabilístico, ilustrada de acordo com a distribuição da população .....	49
Figura 14 - Pseudocódigo para o algoritmo PSO. ....	51
Figura 15 – Curva de Pareto. ....	53
Figura 16 – Primeira parte do fluxograma do algoritmo. ....	57
Figura 17 – Segunda parte do fluxograma do algoritmo. ....	58
Figura 18 – Fluxograma da etapa de concentração do caldo.....	61



Figura 19 – Fluxograma do evaporador de múltiplo efeito para a concentração da vinhaça.....	64
Figura 20 – Sistema composto pelo Gerador de vapor, Pré-ar e Economizador.....	69
Figura 21 – Diagrama de grade com os respectivos trocadores e utilidades necessárias. .....	72
Figura 22 – Fluxograma esquemático do algoritmo integrado EMSO + MOPSO... 74	
Figura 23 – Fluxograma esquemático das funções objetivo e das variáveis de decisão. .....	75
Figura 24 – Fluxograma completo da biorrefinaria no EMSO.....	79
Figura 25 – Diagrama de blocos do processo da biorrefinaria modelada. ....	80
Figura 26 – Soluções não-dominadas encontradas para o Problema 1 com as funções objetivo de minimizar a vazão de vinhaça que deixa o processo e maximizar a vazão de etanol. ....	83
Figura 27 – Valores das variáveis de decisão correspondendo às soluções não-dominadas obtidas para o Problema 1. ....	84
Figura 28 – Soluções não-dominadas encontradas para o Problema 2 com as funções objetivo de maximizar a produção de etanol e maximizar a geração de energia. ....	86
Figura 29 – Valores das variáveis de decisão correspondendo às soluções não-dominadas obtidas para o Problema 2. ....	87
Figura 30 – Soluções não-dominadas encontradas para o Problema 3 com as funções objetivo de maximização da geração de energia e minimização da produção de vinhaça. .....	89
Figura 31 – Valores das variáveis de decisão correspondendo às soluções não-dominadas obtidas para o Problema 3. ....	89
Figura 32 – Análise das soluções não-dominadas de produção de energia elétrica, de etanol e de vinhaça concentrada que deixa o processo para o Problema 4 com as funções	



objetivo de maximização de produção de etanol, de maximização da geração de energia, de minimização da produção de vinhaça e de minimização de geração de CO<sub>2</sub>..... 92

Figura 33 – Análise das soluções não-dominadas de geração de CO<sub>2</sub>, de produção de energia elétrica e de vinhaça concentrada que deixa o processo para o Problema 4 com as funções objetivo de maximização de produção de etanol, de maximização da geração de energia, de minimização da produção de vinhaça e de minimização de geração de CO<sub>2</sub>. ..... 92

Figura 34 - Análise das soluções não-dominadas de geração de CO<sub>2</sub>, de energia elétrica e de produção de vinhaça concentrada que deixa o processo para o Problema 4 com as funções objetivo de maximização de produção de etanol, de maximização da geração de energia, de minimização da produção de vinhaça e de minimização de geração de CO<sub>2</sub>. ..... 93

Figura 35 – Valores das variáveis de decisão correspondendo às soluções não-dominadas obtidas para o Problema 4. .... 94

Figura 36 – Soluções não-dominadas encontradas para o Problema 5 com as funções objetivo de minimizar a vazão de vinhaça que deixa o processo e maximizar a geração de energia em uma usina de primeira geração. .... 95

Figura 37 - Valores das funções-objetivo (maximização da geração de energia elétrica e minimização da vazão de vinhaça concentrada que deixa o processo) em função da variável de decisão nas soluções não-dominadas obtidas para o Problema 5. .... 96



## Lista de Tabelas

Tabela 1 – Comparação entre os processos de hidrólise com ácido diluído, com ácido concentrado e enzimático.....	17
Tabela 2 - Microrganismos geneticamente modificados para a fermentação da pentose.....	18
Tabela 3 - Usos médios da água numa usina de E1G.....	19
Tabela 4 – Compostos empregados na simulação da biorrefinaria virtual.....	26
Tabela 5 – Composição da cana-de-açúcar usada na biorrefinaria. ....	28
Tabela 6 – Conversão estipulada no EMSO para cada uma das reações usadas no balanço de massa para a modelagem do fermentador. ....	34
Tabela 7 – Principais dados da caldeira. ....	37
Tabela 8 – Conversões das reações químicas 2.39 e 2.40. ....	40
Tabela 9 – Especificações para os evaporadores de múltiplo efeito da concentração do caldo. ....	62
Tabela 10 – Valores calculados pelo EMSO por modelos anteriores ao sistema de evaporadores de múltiplo efeito para concentração do caldo na situação em que 30% do bagaço é destinado para o E2G.....	62
Tabela 11 – Especificações para os evaporadores de múltiplo efeito da concentração da vinhaça. ....	65
Tabela 12 – Valores calculados pelo EMSO por modelos anteriores ao sistema de evaporadores de múltiplo efeito para concentração da vinhaça na situação em que 30% do bagaço é destinado para o E2G.....	65
Tabela 13 – Especificações utilizadas na caldeira.....	70
Tabela 14 – Dados das correntes que foram utilizadas para a análise Pinch.....	71
Tabela 15 – Valores calculados pelo EMSO para os evaporadores de múltiplo efeito da concentração do caldo.....	78



Tabela 16 – Valores calculados pelo EMSO para os evaporadores de múltiplo efeito da concentração da vinhaça. ....	81
Tabela 17 - Combustíveis da caldeira e sua composição. ....	82
Tabela 18 – Principais dados calculados pelo EMSO para quatro soluções não-dominadas para o Problema 1 (funções objetivo destacadas em itálico). ....	85
Tabela 19 – Principais dados calculados pelo EMSO para quatro soluções não-dominadas para o Problema 2 (funções objetivo destacadas em itálico). ....	88
Tabela 20 – Principais dados calculados pelo EMSO para quatro soluções não-dominadas para o Problema 3 (funções objetivo destacadas em itálico). ....	90
Tabela 21 – Principais dados calculados pelo EMSO para quatro soluções não-dominadas para o Problema 4 (funções objetivo destacadas em itálico). ....	95
Tabela 22 - Principais dados calculados pelo EMSO quatro soluções não-dominadas para o Problema 5 (funções objetivo destacadas em itálico).....	97



# ***1 Introdução***

## ***1.1 Contextualização e motivação***

Na última década, a produção de biocombustíveis ganhou maior importância ante o desafio de reduzir a dependência em relação ao petróleo com o fomento às fontes de energia renováveis, sendo que 80% dessa produção corresponde apenas a etanol e os outros 20% a biodiesel. EUA e Brasil se destacam no cenário mundial, sendo os maiores produtores e exportadores de etanol. Mesmo sendo o segundo maior produtor mundial (com cerca de 27,5 bilhões de litros na safra 2013/2014), o Brasil é o maior exportador de etanol (com quase 3 bilhões de litros em 2013) (UNICA, 2015).

A ênfase ao etanol de primeira geração (E1G) iniciou no Brasil com o Programa Nacional do Álcool – Proálcool, criado com o decreto-lei nº 76.593, de 14 de novembro de 1975, por meio do financiamento do governo devido à crise do petróleo em 1973, e que posteriormente recebeu mais incentivo devido à crise de 1979 (ZANIN *et al.*, 2000).

No Brasil, o etanol anidro é empregado como aditivo na gasolina, o que contribui para redução da importação da gasolina e, ainda, reduz a pressão sobre as finanças da Petrobras. A partir do dia 16 de março do corrente ano (2015), o percentual de etanol na gasolina passou de 25% para 27%, beneficiando o setor sucroalcooleiro (UNICA, 2015). Desde 2003 circulam no Brasil veículos bicombustíveis (*flex-fuel*), que são veículos que podem circular movidos a álcool e a gasolina em qualquer proporção. Segundo a Anfavea (2015), em 2014 houve a produção de mais de 3,3 milhões de veículos, sendo que desses, 88,2% eram de veículos *flex-fuel*.

O E1G brasileiro é obtido pela fermentação dos açúcares presentes no caldo da cana-de-açúcar, enquanto nos EUA é obtido a partir do milho e na Europa é obtido principalmente a partir da beterraba. O custo de produção para cada 100 litros de etanol é de 14,48 euros para o de cana-de-açúcar, 24,83 euros para o etanol de milho e 52,37 euros para o de beterraba. Na utilização do etanol de cana em substituição à gasolina há uma redução de 84% na emissão de CO<sub>2</sub>, enquanto essa redução para o etanol de milho

é de 30% e para o etanol de beterraba é de 40%. Para cada hectare cultivado são produzidos cerca de 6471 L de etanol de cana-de-açúcar, 4182 L de etanol de milho e 5500 L de etanol de beterraba (GOLDEMBERG e GUARDABASSI, 2009).

Há constantes discussões sobre se o E1G conseguiria atender à demanda energética e, principalmente, o quanto poderia comprometer a produção dos alimentos. O caminho para resolver isso seria o aproveitamento de resíduos da agroindústria, por meio de uma tecnologia baseada na hidrólise da celulose contida nesses resíduos e extração da glicose que, depois de fermentada, se converte em etanol, denominado de segunda geração. O etanol de segunda geração, ou etanol celulósico, ou simplesmente E2G, é um combustível produzido a partir da quebra das cadeias de celulose e hemicelulose e posterior fermentação dos seus açúcares.

Como resultado do processamento de biomassa da cana, há dois materiais celulósicos disponíveis: o bagaço e a palha. O bagaço atualmente é usado para a produção de energia nas usinas de biomassa por meio da sua queima, enquanto que a palha é deixada na lavoura como forragem (FURLAN, 2012). A usina GranBio, em São Miguel dos Campos (AL), é a primeira unidade no Brasil a produzir etanol a partir da palha.

Para analisar os diversos cenários possíveis em uma destilaria autônoma de E1G e E2G, e os efeitos que a mudança de alguns fatores acarretariam no processo de produção, uma modelagem matemática das etapas do processo produtivo é necessária.

Os principais dados e equipamentos que compõem uma usina de E1G e E2G já foram inseridos e modelados no software EMSO (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*) pelo grupo de pesquisa em simulação e controle de processos químicos da UFSCar (FURLAN *et al.* (2012), GONÇALES *et al.* (2012), LINO (2013)). Contudo, estudos abordando as correntes de água, dióxido de carbono e vinhaça ainda não haviam sido realizados.

## **1.2 Objetivo**

O objetivo dessa pesquisa foi realizar estudos de otimização multiobjetivo com aspectos ambientais, como produção de vinhaça e de CO<sub>2</sub>, e aspectos de processo,

como produção de etanol e geração de energia elétrica, em uma usina de produção integrada de etanol de primeira e segunda geração (E1G e E2G). Para atender o objetivo geral foram propostos os seguintes objetivos específicos:

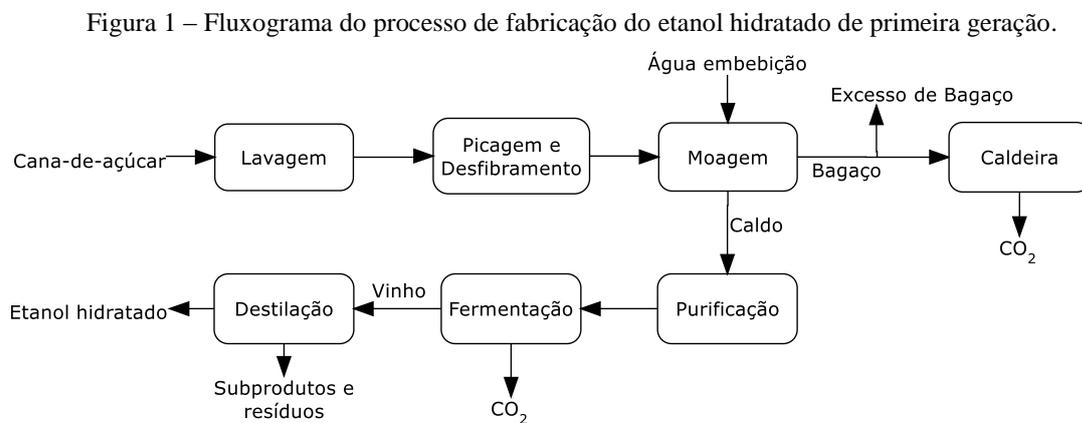
1. Modelar matematicamente balanços de massa e de energia necessários para avaliar aspectos ambientais da biorrefinaria virtual.
2. Modificar a modelagem dos fermentadores e da caldeira de modo a permitir uma análise mais apropriada da liberação do CO<sub>2</sub>.
3. Inserir novos equipamentos para a concentração da vinhaça por meio da sua concentração.
4. Analisar a possibilidade de fechar circuitos de água no fluxograma.
5. Aplicar o algoritmo desenvolvido por Gonçalves *et al.* (2012) para a otimização multiobjetivo, analisando o efeitos das variáveis de decisão na produção de etanol, de vinhaça, de energia elétrica e de CO<sub>2</sub>.

## 2 Estado da arte

### 2.1 Etanol produzido a partir do caldo da cana-de-açúcar

O etanol no Brasil é produzido a partir da cana-de-açúcar, que é uma planta que pertence ao gênero *Saccharum* da família Poaceae, cujas características são a forma da inflorescência (espiga), o crescimento do caule em colmos, as folhas com lâminas de sílica em suas bordas e bainha aberta. No colmo se concentra a sacarose da planta, que é utilizada para a produção do E1G (FURLAN, 2012).

Uma tonelada de cana consegue produzir aproximadamente 80 L de álcool hidratado ou 140 kg de açúcar; 280 kg de bagaço (com média de 50% de umidade) e 140 kg de palha seca (PAOLIELLO, 2006). Na Figura 1 encontra-se um fluxograma simplificado do processo de produção do E1G.



Fonte: Elaborado pelo autor.

#### 2.1.1 Colheita e limpeza

A etapa de produção do etanol começa na colheita da cana, que pode ser tanto mecanizada como manual. Nos últimos anos, devido a pressões ambientais, principalmente do Protocolo Agroambiental do Setor Sucroenergético, houve aumento da proporção da colheita mecanizada sobre a manual, já que aquela pode ser feita sem a

necessidade de queimadas, sendo posteriormente transportada por meio de caminhões até a unidade de processamento.

A cana que chega à usina apresenta contaminantes como terra e outras impurezas, sendo descarregada em esteiras e sofrendo um processo de lavagem por água. Poucas usinas mantêm sistemas abertos de lavagem de cana, pois, além de haver uma alta taxa de captação de água, há a necessidade de tratamento desse efluente. Em sistema fechado de lavagem de cana com decantadores circulares há a geração de lodo que compreende em torno de 5% do volume de água utilizada em recirculação (ANA, 2009). A água pode retirar até 2% dos açúcares presentes na cana, principalmente da cana picada oriunda da colheita mecanizada, motivo pelo qual a limpeza a seco por meio de ventiladores está ganhando mais espaço nas usinas (DIAS, 2008).

Depois de limpa, a cana passa por niveladores, que fazem a distribuição da cana no condutor, em seguida por navalhas, que transformam a cana em uma massa compacta e homogênea e, por fim, por desfibradores, que são uma série de martelos giratórios que esmagam a cana para facilitar o processo de extração dos açúcares (DIAS, 2008).

### **2.1.2 *Extração dos açúcares***

A moagem é a operação usualmente utilizada para a extração da sacarose. O primeiro equipamento com que a cana entra em contato é o esmagador, um equipamento que consiste de dois rolos, preparando a cana para facilitar a extração do caldo nas moendas.

As moendas geralmente são constituídas de quatro a seis ternos. Cada terno possui 4 rolos, e a pressão hidráulica entre os rolos é em torno de 250 kgf/cm<sup>2</sup>. Mesmo submetendo o bagaço a pressões consideráveis e repetidas, nunca é possível extrair a totalidade de seu caldo, sendo necessário adicionar água no processo de modo a substituir o caldo ainda presente no bagaço pela água. Essa água tem uma temperatura de 50 °C e recebe o nome de água de embebição (HUGOT, 1986). O bagaço que resulta do

processo de extração geralmente é destinado para as caldeiras, onde será queimado para geração de vapor para a usina.

Apenas com a pressão seca, chega-se no limite de extração muito rapidamente. No primeiro terno a umidade do bagaço cai para cerca de 60%, no segundo terno para 50 % e a partir do terceiro já está muito próxima dos 45 %. Molha-se o bagaço, geralmente a partir do segundo terno, para se manter uma umidade alta no processo de extração e se atingir a umidade limite apenas no último terno (HUGOT, 1986).

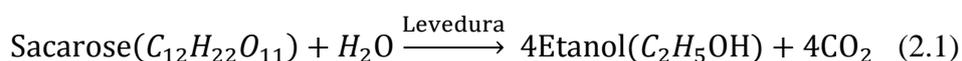
### ***2.1.3 Purificação do caldo***

O caldo resultante da moagem é rico em água, açúcar e impurezas, como bagacilhos, areias, coloides, gomas, proteínas, clorofila e outras substâncias corantes.

O caldo primeiramente é peneirado e depois vai para o processo de calagem, sendo tratado com leite de cal, para ocorrer a floculação e a decantação das impurezas. Depois da calagem, o caldo vai para a etapa de aquecimento, que consiste em se elevar a temperatura a 103° - 105 °C para eliminar, nos balões flash, ar e os gases dissolvidos e evitar bolhas ao redor dos flocos, impedindo-os de precipitar. No processo de decantação, o caldo passa por um decantador com um tempo de residência entre três horas e três horas e meia, para remover impurezas que podem atrapalhar o processo de fermentação (FURLAN, 2012). O caldo resultante da decantação possui uma concentração em torno de 15 °Bx, que é a porcentagem aparente de sólidos solúveis contida em uma solução açucarada. É necessário, portanto, concentrar o caldo para que o tamanho dos equipamentos, como o fermentador e a coluna de destilação, seja menor devido ao menor volume do caldo, contribuindo, ainda, para que o grau alcoólico do vinho não seja muito baixo. A concentração é feita principalmente em evaporadores de múltiplo efeito, obtendo-se um caldo final de 22 °Bx. Essa solução açucarada, denominada mosto, segue para a etapa de fermentação (DIAS, 2008).

#### 2.1.4 Fermentação

A transformação da matéria-prima em etanol é realizada por leveduras da espécie *Saccharomyces cerevisiae*, por meio da fermentação alcoólica. Resumidamente, a reação de fermentação é apresentada pela Equação 2.1.



O processo reacional, entretanto, é bem mais complexo do que a Equação 2.1. Primeiramente ocorre a inversão da sacarose, gerando glicose e frutose, como pode ser visto na Equação 2.2.



Depois a glicose, primeiramente, e a frutose são fermentadas gerando etanol e energia para a levedura em forma de ATP, como demonstrado na Equação 2.3.



O rendimento estequiométrico do processo é 0,511 g etanol/g de glicose, ou de 0,538 g etanol/g de sacarose. Além do etanol, a fermentação produz subprodutos como o glicerol, ácidos orgânicos e outros álcoois. Industrialmente se obtém 90% do rendimento teórico em condições ótimas de cultivo (DIAS, 2008).

O processo de fermentação mais utilizado nas destilarias brasileiras é o Melle-Boinot. Esse processo consiste em realizar a fermentação alcoólica em batelada alimentada, ocorrendo em tanques denominados dornas de fermentação, além de reutilizar a levedura no processo. A dorna é preenchida primeiramente com a suspensão de levedura, conhecida como pé de cuba, que contém entre 28 e 30 % em volume de células, até completar 25 % do volume da dorna. Em seguida, o mosto é adicionado até completar o volume da dorna. O período de enchimento leva em torno de 5 horas e o período de batelada varia entre 6 e 8 horas, tendo um período total de fermentação entre 11 e 13 horas. No final da fermentação, a mistura recebe o nome de vinho (DIAS, 2008).

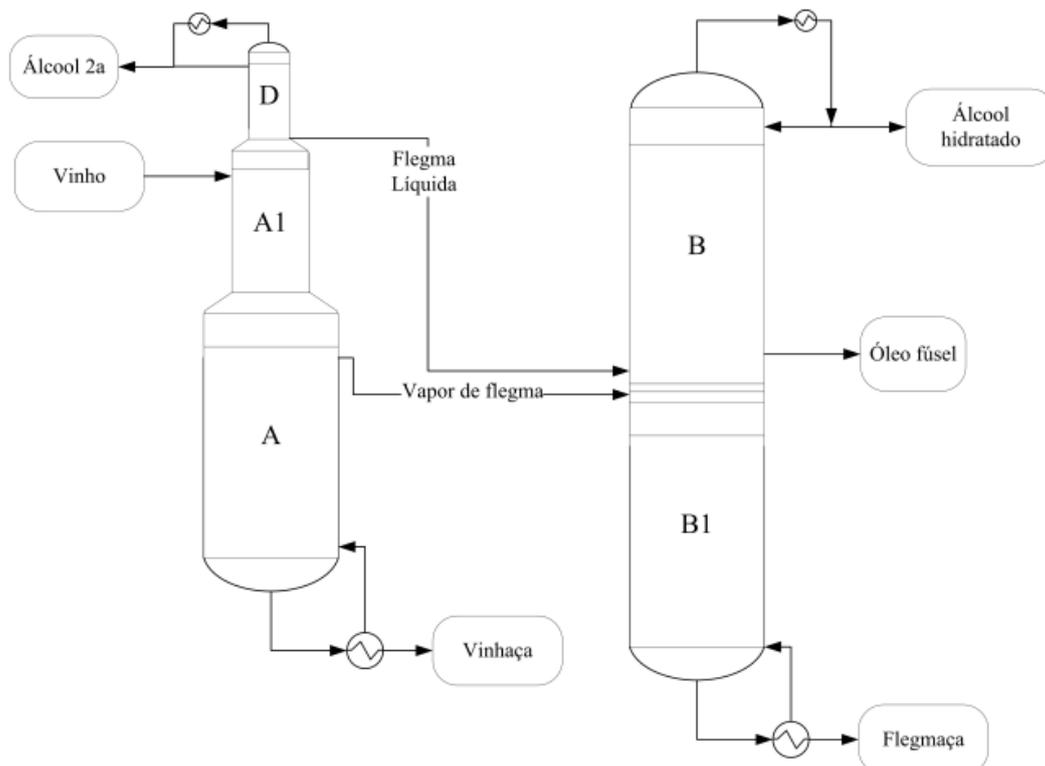
### 2.1.5 Destilação

O vinho advindo da fermentação apresenta teor de álcool entre 7 e 11° GL (% em volume), sendo necessária sua purificação para a venda. Para ser comercializado como álcool etílico hidratado carburante (AEHC) deve possuir concentração de etanol entre 92,6% e 93,8% INPM (% em massa). O vinho percorre um sistema de colunas de destilação, de onde se obtém uma solução hidroalcoólica concentrada e demais subprodutos.

DIAS (2008) descreve a configuração mais usada nas usinas, elucidando as cinco colunas que constituem o sistema de destilação: A, A1, D, B e B1.

As colunas A, A1 e D são sobrepostas, formando um trem de colunas chamado de coluna de destilação. As colunas B e B1 formam a coluna de retificação, e é nesta que se obtém AEHC. A coluna A é conhecida como coluna de esgotamento do vinho, A1 de epuração do vinho, D de concentração de álcool de segunda, B de coluna de retificação e B1 de coluna de esgotamento. A Figura 2 apresenta um esquema simplificado do processo de destilação empregado na usina.

Figura 2 - Esquema simplificado do processo de destilação empregado na indústria.



Fonte: Reproduzido de DIAS (2008).

O vinho é alimentado a aproximadamente 93°C no topo da coluna A1, que possui geralmente 8 pratos e tem função de purificar o vinho de substâncias de maior volatilidade e dos gases contaminantes e completar o seu aquecimento. Os vapores produzidos na coluna A1 alimentam o fundo da coluna D, e o produto de fundo alimenta o topo da coluna A.

A coluna A possui entre 16 e 24 pratos e o seu produto de fundo é a vinhaça. Próximo ao topo da coluna é obtido vapor de flegma, que possui teor alcoólico na ordem de 40% (massa) e constitui a alimentação da coluna B.

A coluna D contém geralmente 6 pratos, e nessa coluna são concentrados os produtos mais voláteis do vinho. Seu produto de topo é o álcool de segunda, que é uma mistura hidroalcoólica com teor entre 92° e 94° GL, composta por etanol e outros compostos voláteis gerados durante a fermentação, tendo caráter ácido; e como produto de fundo se obtém flegma líquida.

A coluna B possui cerca de 40 pratos, sendo que o AEHC é retirado como uma saída lateral líquida no prato abaixo do topo da coluna. Esse procedimento é empregado para a obtenção de um álcool hidratado de melhor qualidade. Nos pratos inferiores da coluna é retirado o óleo fúsel. O produto de fundo da coluna B constitui a alimentação do topo da coluna B1.

A coluna B1 possui cerca de 13 pratos e no fundo da coluna é obtida a flegmaça.

Para o etanol estar apto a ser adicionado à gasolina ele precisa ser desidratado para alcançar um teor alcoólico acima dos 99,3° INPM, o chamado etanol anidro. Mas devido ao ponto de azeotropia em etanol-água em 95,6° INPM a destilação convencional falha.

O processo mais utilizado pelas usinas para a produção de etanol é a destilação azeotrópica com ciclohexano (ANA, 2009). A destilação azeotrópica se caracteriza pela adição de um terceiro componente, o componente de arraste, com a finalidade de formar um novo azeótropo heterogêneo com um dos componentes presentes na mistura.

No entanto, há outros métodos, como processo de desidratação química, a desidratação por destilação a vácuo, os processos de destilação extrativa, processos de membrana, os processos de adsorção e destilação por difusão (KUMAR *et al.*, 2010).

O etanol produzido é resfriado, enviado para tanques de medição e finalmente para tanques de armazenamento, onde aguarda sua comercialização (ANA, 2009).

A flegmaça é um efluente incorporado à vinhaça ou às águas residuais, e possui teor alcoólico inferior a 0,02% em massa. A vinhaça pode conter um teor alcoólico da ordem de 0,02 % e sua proporção pode variar entre 12 e 18 litros de vinhaça por litro de álcool. Ela pode ser usada para a alimentação de animais, produção de metano e, principalmente, para a fertilização de solos (DIAS, 2008).

O óleo fúsel é constituído de álcoois (álcool etílico e superiores, principalmente álcool isoamílico), furfural, aldeídos, ácidos graxos, etc. Sua produção é de 0,05 a 0,2 litros para cada 100 litros de etanol. A partir dele pode-se extrair álcoois, com diversos graus de pureza, e solventes (DIAS, 2008).

### **2.1.6 Concentração da Vinhaça**

A vinhaça é um poluente com alto teor de orgânicos, cujo descarte em qualquer coleção hídrica foi proibido pela portaria nº 323, de 29 de novembro de 1978, do extinto Ministério do Interior. Atualmente, a vinhaça é utilizada na fertirrigação, possibilitando a adubação dos solos agricultáveis, além da redução dos custos de plantio. Mas pode ocorrer a salinização excessiva do solo e contaminação de aquíferos subterrâneos (SALOMON, 2007).

A fertirrigação promove o aumento das quantidades de cálcio, potássio, nitrogênio e fósforo no solo. Ela é utilizada nas plantações aos redores da usina para economia de transporte, só que isso acarreta um volume aplicado de vinhaça acima do recomendado, podendo haver a contaminação dos lençóis freáticos (GRANATO, 2003). A norma P4.231 de 2006 da Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB,

2015) estabelece que a aplicação de vinhaça no estado de São Paulo está limitada a no máximo 150 m<sup>3</sup>/ha e a concentração máxima de potássio no solo não deve ultrapassar os 5% da capacidade de troca catiônica (CTC).

Uma das soluções é concentrar a vinhaça, que reduz o número de caminhões utilizados como transporte e permite a reutilização da água condensada, além de diminuir a probabilidade de a vinhaça atingir o lençol freático (CARVALHO E SILVA, 2010).

A água resultante da concentração da vinhaça pode ser reutilizada para a embebição nas moendas, a diluição do óxido de cálcio (cal virgem) utilizado no processo de clarificação, a lavagem de filtro, entre outros usos menos nobres. Também se pode aproveitar a energia contida no vapor da água, antes da condensação, na integração energética (CARVALHO E SILVA, 2010).

Segundo Carvalho e Silva (2010), em 2010 havia apenas duas usinas no Brasil, ambas no estado de São Paulo, que possuíam plantas de evaporação de vinhaça em operação. Segundo a CITROTEC (2015), empresa que produziu até 2012 75% do equipamentos em operação responsáveis para a concentração da vinhaça, a empresa projetou evaporadores para a concentração da vinhaça para pelo menos outras onze usinas. Outras empresas que fabricam equipamentos para a concentração da vinhaça são a Dedini (DEDINI, 2015) e a Sermasa (SERMASA, 2015).

### ***2.1.7 Cogeração de energia***

O bagaço gerado na etapa das moendas é destinado para a queima e geração de vapor na caldeira instalada na usina. Esse vapor é usado para acionar as turbinas que movimentam as moendas e outros equipamentos e para gerar energia elétrica para a demanda da usina e para a venda. O vapor de escape de turbinas é utilizado como fonte de calor nas etapas de tratamento e concentração do caldo e nos processos de separação.

Até o ano de 2000, não havia incentivos para produzir um excedente de energia para a venda, mas com a crise energética de 2001 aumentou a procura por

produção de energia elétrica por fontes alternativas de energia, como a biomassa (DIAS, 2008).

Usualmente as usinas utilizam caldeiras de 21 bar, que são suficientes para atender a sua demanda de aquecimento, acionamento e energia elétrica. Caldeiras de maior eficiência e capacidade, como as de 64 bar de pressão, permitem a geração de excedentes de energia elétrica (DIAS, 2008).

Segundo dados da Agência Nacional de Energia Elétrica (ANEEL), de abril de 2014, a biomassa foi responsável por 8,94% da matriz energética do país, sendo que, desse percentual, o bagaço da cana corresponde a cerca de 82%. O número de usinas capazes de gerar energia a partir do bagaço de cana é atualmente de 378 unidades, com uma capacidade instalada de 9.339MW, mas apenas 170 produzem excedente e exportam energia para a rede.

Entretanto, o bagaço excedente pode ser destinado para outro fim além da geração e venda de energia elétrica, como a produção de E2G.

#### ***2.1.7.1 Excesso de ar nas caldeiras***

Para que o processo de cogeração tenha uma boa eficiência, é necessário que ocorra a queima completa do material alimentado na caldeira, ocorrendo a sua combustão completa. Para isso é necessário que seja alimentado na caldeira ar na proporção estequiométrica. Mas para assegurar a combustão completa é necessário um “excesso de ar”, de modo a manter um teor suficiente de oxigênio até o final da queima e superar as deficiências de mistura no queimador da caldeira.

Um grande excesso de ar acarreta em diminuição na temperatura e no comprimento da chama e há uma maior perda de calor para aquecer o ar de entrada. Mas um baixo excesso de ar pode resultar em uma combustão incompleta e, com isso, formação de CO, fuligem e fumaça, além de acumulação de combustível não queimado.

O valor ótimo de excesso de ar precisa ser suficiente para que ocorra a combustão completa e haja uma mínima perda de calor. O excesso de ar geralmente usado

na queima do bagaço é entre 25 e 35% (PINHEIRO e VALLE, 1995), mas podem ser usados valores menores, como de 16,5% de excesso de ar (CORTEZ e GÓMEZ, 1998).

A emissão de NO<sub>x</sub> nas caldeiras que queimam bagaço aumenta com o excesso de ar, apresentando um comportamento quase linear. A emissão média de NO<sub>x</sub> nas chaminés das caldeiras é de 147,3 ppm ou de 295,7 µg/m<sup>3</sup> (PRIMO *et al.*, 2006).

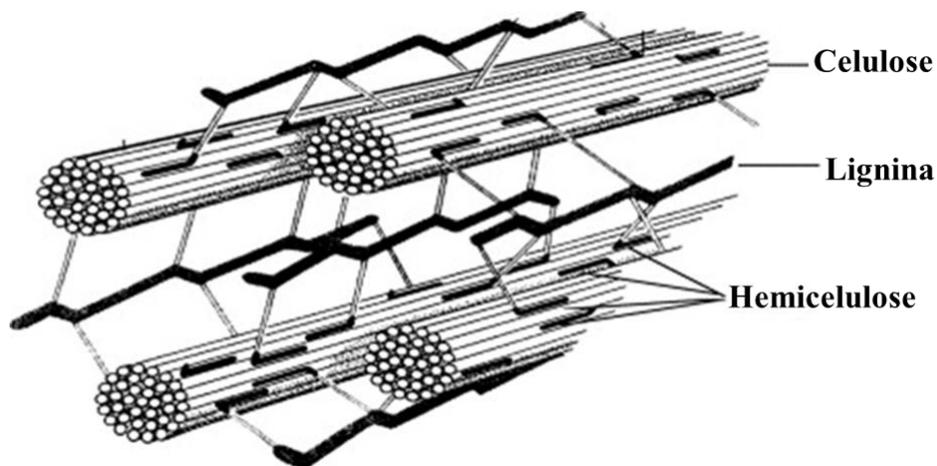
## ***2.2 Etanol produzido a partir da biomassa residual da cana-de-açúcar (bagaço/palha)***

Uma forma que está sendo estudada para a obtenção de etanol é a conversão de material lignocelulósico ou biomassa em açúcares fermentáveis, utilizando-se principalmente resíduos gerados na fábrica e/ou campo, como bagaço e palha de cana-de-açúcar, nas usinas brasileiras, e resíduo de milho, nas usinas americanas.

Na safra 2008/2009, aproximadamente 75% do bagaço gerado foi utilizado na produção de energia elétrica por cogeração, juntamente com 5% da palha disponível nas usinas sucroalcooleiras, respondendo por 3% da matriz elétrica brasileira (LIMA, 2011). Isso mostra que há ainda um excedente de palha e de bagaço que pode ser utilizado para a produção do etanol de segunda geração como, também, a possibilidade do uso da palha na cogeração.

Os materiais lignocelulósicos são formados por estruturas duras e fibrosas, sendo compostas principalmente pelos polissacarídeos celulose e hemicelulose. Esses são permeados pela lignina, uma macromolécula formada por álcoois aromáticos. A Figura 3 apresenta a estrutura básica desses três componentes.

Figura 3- Esquema estrutural simplificado das fibras do material lignocelulósico.



Fonte: Adaptado de MURPHY e MCCARTHY (2005).

A celulose é um homopolissacarídeo linear, formado por uma cadeia de moléculas de glicose ligadas entre si na posição beta ( $\beta$ ) - 1,4. As cadeias de celulose unem-se formando fibrilas e há pontes de hidrogênio entre os grupamentos hidroxila intra e intercadeias, o que resulta na cristalinidade da celulose. Essas características, juntamente com o envoltório de lignina, tornam a celulose resistente à hidrólise (SILVA, 2010).

A hemicelulose é formada pelas hexoses glicose, manose e galactose e pelas pentoses xilose e arabinose. Esses açúcares estão na forma de polímeros ramificados de menor massa molecular que a celulose. A hemicelulose é mais suscetível à hidrólise química, mas a fermentação das pentoses ainda não é tão desenvolvida quanto a da glicose (SILVA, 2010).

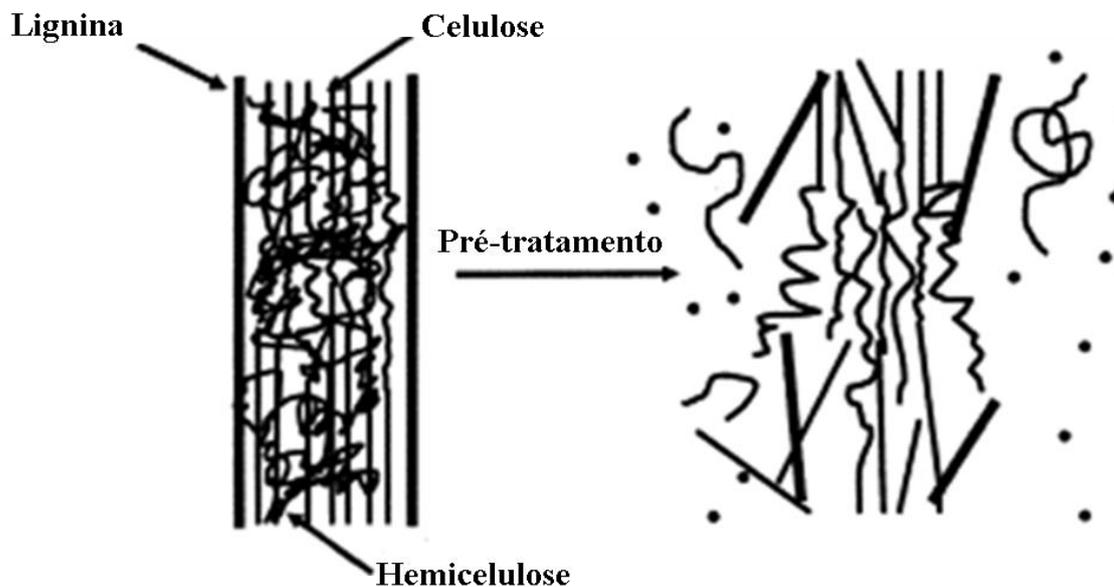
A lignina é uma macromolécula e atua como ligante das fibras de celulose, contribuindo para a resistência e rigidez do tecido do vegetal. Ela não contém moléculas simples de açúcar, não sendo útil para a produção do etanol, além de dificultar o acesso da enzima para a hidrólise da celulose (SILVA, 2010).

A composição química média dos resíduos lignocelulósicos no bagaço de cana-de-açúcar é de  $40,19 \pm 0,16\%$  de celulose,  $26,42 \pm 0,74\%$  de hemicelulose e de  $25,15 \pm 0,76\%$  de lignina, e o restante é constituído basicamente de cinzas e de sólidos solúveis (NEUREITER *et al.*, 2002). Na palha da cana-de-açúcar a celulose responde por uma composição média de  $44,26 \pm 1,35\%$ , a hemicelulose por  $31,10 \pm 0,78\%$  e a lignina por  $19,01 \pm 1,95\%$ , e o restante é constituído basicamente de cinzas e sólidos solúveis (SANTOS *et al.*, 2013).

### 2.2.1 Pré-Tratamento

O pré-tratamento tem como objetivo aumentar a área de superfície da biomassa, aumentar a porosidade dos materiais e reduzir a cristalinidade da celulose para tornar mais acessível os agentes hidrolíticos enzimáticos ou ácidos aos materiais lignocelulósicos (SANTOS, 2012). A Figura 4 representa esquematicamente a ação do pré-tratamento no material lignocelulósico.

Figura 4 – Representação esquemática do pré-tratamento sobre o material lignocelulósico.



Fonte: Adaptado de MOSIER *et al.* (2005).

Vários métodos de pré-tratamento foram sugeridos nas últimas duas décadas, podendo ser físicos, químicos ou biológicos, sendo possível a combinação entre eles.

O método físico se baseia principalmente na moagem e trituração, mas pode-se utilizar de radiação e de altas temperaturas. Esse método ocasiona principalmente o aumento da área superficial e do tamanho dos poros da partícula, além de ocasionar a diminuição do grau de polimerização (RABELO, 2010). Há a diminuição da cristalinidade da celulose, a hidrólise parcial da hemicelulose e despolimerização parcial da lignina. Esse método caracteriza-se por um alto consumo elétrico (TAHERZADEH e KARIMI, 2007).

O método químico se utiliza de bases, ácidos, gases, agentes oxidantes e redutores ou solventes orgânicos, e se caracteriza pela deslignificação, diminuição do grau de polimerização e cristalinidade da celulose associada com o inchaço da amostra, podendo ocasionar também o aumento da porosidade (RABELO, 2010). Há a hidrólise parcial ou completa da hemicelulose, e caracteriza-se por ser um processo rápido (TAHERZADEH e KARIMI, 2007).

Pré-tratamentos químicos com ácido têm se mostrados efetivos além de econômicos. Nesse tipo de pré-tratamento, a hemicelulose é hidrolisada, resultando numa fase sólida rica em celulose, além de restar uma menor quantidade de derivados de lignina (REZENDE *et al.*, 2011). Essa etapa pode ser conduzida com ácido concentrado ou diluído, mas a utilização de ácido concentrado acarreta a formação de inibidores para a etapa de fermentação. O ácido que é mais utilizado para esse fim é o ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>).

Já o método biológico, utiliza-se principalmente de fungos filamentosos, como o bolor, e tem como principal representante o bolor branco (*Pleurotus*, *Pycnoporus*, *Ischnoderma*, *Phlebia*, entre outros), e tem como principal característica a deslignificação e a redução do grau de polimerização da celulose e hemicelulose (RABELO, 2010). Esse método é seguro e se caracteriza por um baixo consumo de energia devido a um menor suporte mecânico, mas o seu rendimento é baixo e o processo pode durar de 4 a 8 semanas (SARKAR *et al.*, 2012).

### **2.2.2 Hidrólise da biomassa**

Para se obter os açúcares fermentáveis da biomassa é necessário hidrolisá-la. Há três técnicas de hidrólise: a hidrólise com ácido concentrado, a hidrólise com ácido diluído e a hidrólise enzimática.

Na hidrólise com ácido concentrado, a hemicelulose e a celulose são quebradas por soluções de ácidos fortes, como ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>), clorídrico (HCl) ou fosfórico (H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>), em temperaturas ambiente ou até 100 °C. Há como desvantagens a necessidade de equipamentos resistentes à corrosão e a necessidade de recuperação do

ácido por razões econômicas e ambientais. Outro problema é a hidrólise da hemicelulose antes da celulose, ocorrendo a liberação dos seus monossacarídeos no meio reacional antes do processo estar completo, ocasionando a degradação e, assim, a perda dos seus açúcares (RABELO, 2010).

Já na hidrólise com ácido diluído, duas reações ocorrem em sequência em temperaturas em torno de 200 °C. A primeira é a conversão da celulose e hemicelulose em hexoses e pentoses, respectivamente (BADGER, 2002). Na segunda etapa ocorre a degradação de uma quantidade considerável de açúcar e de lignina solúvel (RABELO, 2010). Essa degradação, além de ocasionar a diminuição do rendimento final dos açúcares, gera furfural e outros componentes que são tóxicos para os organismos que realizam a fermentação (FURLAN, 2012).

Diferentemente do que ocorre nas hidrólises ácidas, na hidrólise enzimática a etapa de pré-tratamento é necessária, uma vez que as celulasas precisam acessar a celulose para hidrolisá-la (RABELO, 2010).

Há três grupos de enzimas, cada uma atuando em diferentes partes da celulose. As endoglicanases (do inglês *endoglucanases*) atuam nas regiões amorfas da celulose, gerando novas extremidades, redutoras ou não-redutoras, que posteriormente irão sofrer ação das exoglicanases. As exoglicanases (do inglês *exoglucanases*), que se dividem em celobiohidrolases ou glicanohidrolases, se ligam a essas extremidades gerando, respectivamente, celobiose ou glicose. Por fim, há as  $\beta$ -glicosidases (do inglês  $\beta$ -glucosidases), que convertem a celobiose em glicose, sofrendo inibição pela glicose (FURLAN, 2012).

Depois da hidrólise ocorre a fermentação alcoólica da glicose, e a destilação do álcool, processos que seguem o mesmo procedimento do E1G. Na Tabela 1 há um resumo dos processos de hidrólise.

Tabela 1 – Comparação entre os processos de hidrólise com ácido diluído, com ácido concentrado e enzimático.

	<b>Consumo</b>	<b>Temperatura (°C)</b>	<b>Tempo</b>	<b>Rendimento de glicose</b>
<b>Ácido diluído</b>	<1% H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	215	3 min	50-70%
<b>Ácido concentrado</b>	30-70% H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	40	2-6 h	90%
<b>Enzimática</b>	Coquetel Enzimático	50	1,5 dias	75-95%

Fonte: Baseado em HAMELINCK *et al.* (2005).

### 2.2.3 Fermentação das pentoses

Enquanto a fermentação das hexoses já é dominada pelo ser humano há milhares de anos, a fermentação das pentoses ainda está no começo da sua história, mas já há inúmeros estudos envolvendo uma gama de diferentes microrganismos modificados para a fermentação das pentoses (principalmente xilose e arabinose) em etanol. A Tabela 2 ilustra os principais microrganismos utilizados para a fermentação das pentoses.

Tabela 2 - Microrganismos geneticamente modificados para a fermentação da pentose.

<b>Bactéria</b>	<b>Fungos e leveduras</b>	<b>Actinomicetos</b>
<i>Z. mobilis</i>	<i>S. cerevisiae</i>	<i>Rhodococcus</i>
<i>Zymobacter palmae</i>	<i>Rhodotorula glutinis</i>	
<i>E. coli</i>	<i>Pichia stipitis</i>	
<i>Salmonella typhimurium</i>	<i>Candida shehatae</i>	
<i>Clostridium acetobutylicum</i>	<i>Aspergillus niger</i>	
<i>Bacillus subtilis</i>	<i>Rizopus solani</i>	
	<i>Fusarium oxysporum</i>	

Fonte: Baseado em SHARMIN *et al.* (2013).

Pesquisadores do DEQ/UFSCar depositaram patente para produção de E2G a partir da xilose, extraída por meio da hidrólise por xilanases de materiais lignocelulósicos como xilooligômeros. A xilose é isomerizada para xilulose para poder ser fermentada pela mesma levedura que produz E1G (*Saccharomyces cerevisiae*) (INPI, 2014).

## 2.3 Uso de água na usina

Em 19 de dezembro de 2008, a Secretaria do Meio Ambiente do Estado de São Paulo publicou a resolução SMA N° 88, definindo que novos empreendimentos no setor sucroalcooleiro, incluindo a ampliação de usinas já existentes, deveriam utilizar um limite máximo de 1 m<sup>3</sup> de água por tonelada de cana moída, e em áreas com restrições ambientais o limite superior seria de 0,7 m<sup>3</sup> (SMA, 2014).

Os valores de uso médio em cada parte de uma usina E1G foram listados por ANA (2009) e estão reproduzidos na Tabela 3.

Tabela 3 - Usos médios da água numa usina de E1G.

Setor	Finalidade	Valor	Unidade
Alimentação, preparo e extração (moendas e difusores)	Lavagem de cana	2,200	m <sup>3</sup> /t cana
	Embebição	0,250	m <sup>3</sup> /t cana
	Resfriamento de mancais	0,035	m <sup>3</sup> /t cana
	Resfriamento óleo	0,130	m <sup>3</sup> /t cana
	Subtotal	2,615	m <sup>3</sup> /t cana
Tratamento de caldo	Preparo de leite de cal	0,030	m <sup>3</sup> /t cana
	Aquecimento do caldo	25	kg vapor/ t cana
	Lavagem da torta	0,030	m <sup>3</sup> /t cana
	Subtotal	0,085	m <sup>3</sup> /t cana
Fermentação	Preparo do mosto	5	m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> etanol
	Resfriamento do caldo	30	m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> etanol
	Preparo do pé-de- cuba	0,010	m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> etanol
	Lavagem do CO <sub>2</sub> após a fermentação	2,55	m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> etanol
	Resfriamento de dornas	70	m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> etanol
	Subtotal	4,366	m <sup>3</sup> /t cana
Destilaria	Aquecimento (vapor)	4,25	kg/m <sup>3</sup> etanol
	Resfriamento dos condensadores	100	m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> etanol
	Subtotal	3,860	m <sup>3</sup> /t cana

Fonte: Adaptado de ANA (2009).

Pode-se ver na Tabela 3 que os maiores consumos de água em uma usina se concentram na lavagem da cana e nas etapas de aquecimento e de resfriamento. Esses valores de água são os necessários para o funcionamento da planta, sendo que por recirculação e por integração energética o gasto de água em algumas etapas pode chegar próximo a zero.

## 2.4 EMSO

O EMSO (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*) foi criado a partir do trabalho de SOARES (2003) em consórcio com empresas petroquímicas nacionais para simular processos estacionários e transientes da indústria, sendo gratuito para fins acadêmicos.

O software é multitarefas, permitindo simulações em tempo real e a execução de mais de um fluxograma simultaneamente em sua GUI (*Graphical User Interface*). O EMSO é um simulador baseado em equações, ou seja, para a obtenção da solução o simulador agrupa as equações de todas as unidades do processo em um único sistema (SOARES e SECCHI, 2003).

A linguagem de modelagem do EMSO contempla conceitos da programação orientada a objetos, tais como herança e composição. O conceito de herança permite a reutilização do código, e o conceito de composição consiste na criação de modelos complexos usando vários modelos mais simples.

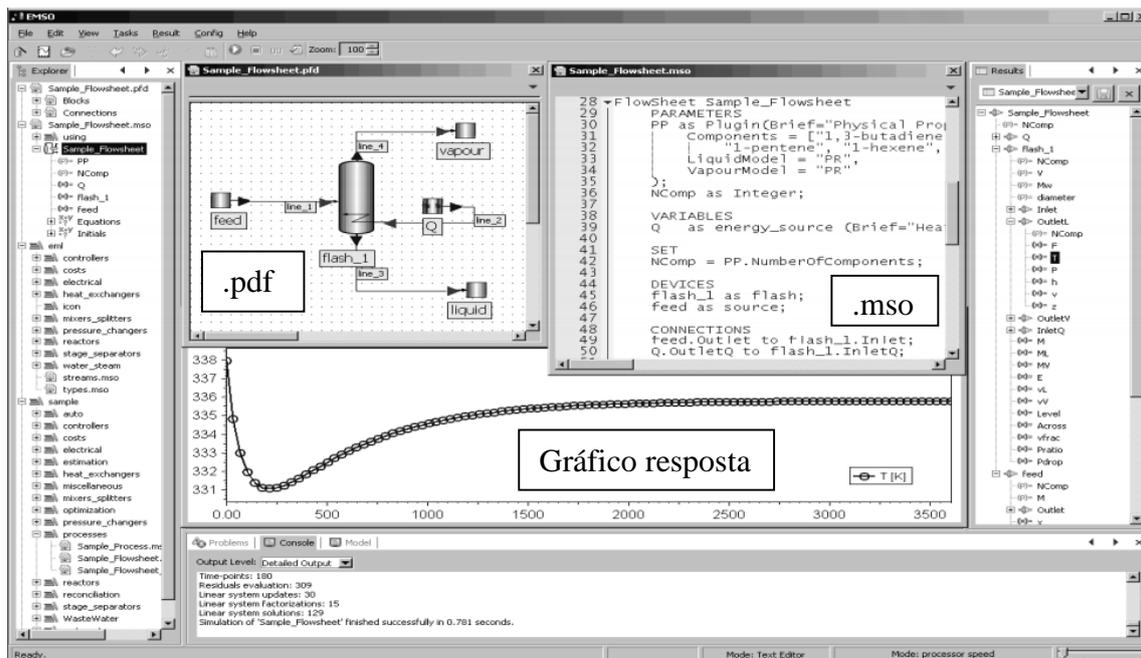
O EMSO comporta ainda o uso de rotinas externas escritas em C, C++ e Fortran, o que permite a utilização de códigos já existentes nessas linguagens para a resolução de um determinado problema (RODRIGUES *et al.*, 2010). Na estrutura do EMSO, há quatro entidades principais: *model* (modelo), *flowsheet* (fluxograma), *diagram* (diagrama) e *optimization* (otimização).

O *model* é a descrição matemática genérica de uma operação unitária ou um equipamento real. O *flowsheet* pode ser um problema matemático a ser resolvido, ou ser um conjunto de *models* conectados que descrevem um processo, ou apenas um *model* acrescido de valores reais do processo. Se as conexões entre os *models* forem no modo

gráfico, se constitui um *diagram*. Tanto o *flowsheet* como o *diagram* precisam de graus de liberdade iguais a zero para serem resolvidos. Já uma *optimization* é um problema matemático com grau de liberdade acima de zero, usando algum método para se chegar ao valor ótimo.

O formato dos arquivos do EMSO pode ser: .pfd, .mso ou .rlt. Os arquivos .pfd são arquivos gerados quando se trabalha em modo gráfico, ou seja, é um *diagram*. Arquivos .mso são arquivos em modo texto onde há toda a descrição matemática, podendo ser um *model*, um *flowsheet* ou uma *optimization*. Arquivos .rlt são arquivos contendo resultados, podendo ser utilizados como estimativa inicial em problemas mais complexos. Na Figura 5 pode-se ver uma imagem do EMSO com um exemplo de seu modo gráfico (.pdf), um exemplo do seu modo texto (.mso) e um gráfico resposta gerado.

Figura 5 – EMSO com os seus modos gráfico, texto e resposta.



Fonte: Reproduzido de EQE038 (2015).

### 2.4.1 VRTherm

O VRTherm é uma biblioteca capaz de prever propriedades termodinâmicas e propriedades físicas de componentes individuais ou de misturas, necessárias na simulação de equipamentos. Conta com um banco de dados com mais de

1900 componentes puros, abrangendo as principais substâncias envolvidas em processos químicos e petroquímicos.

O cálculo das propriedades é baseado em equações de estado e correlações empíricas, que podem ser:

- Gás ideal
- Líquido ideal
- van der Waals
- Redlich-Kwong
- Soave-Redlich-Kwong
- Peng-Robinson
- Assymmetric-PR
- Assymmetric-RK
- UNIFAC (Dortmund)

Os dados das substâncias fornecidos pelo VRTherm são os seguintes:

- Massa Molar
- Pressão de Vapor
- Temperatura de Ebulição
- Temperatura de Congelamento
- Temperatura Crítica
- Pressão Crítica
- Volume Crítico
- Volume Molar
- Massa Específica
- Capacidade calorífica a pressão constante -  $C_p$

- Capacidade calorífica a volume constante -  $C_v$
- Razão  $C_p/C_v$
- Coeficiente de Fugacidade
- Entalpia específica/molar
- Entropia específica/molar
- Energia Livre de Gibbs específica/molar
- Energia Interna específica/molar
- Condutividade Térmica
- Viscosidade

O VRTherm é usado como um plugin do EMSO, sendo necessário para a inserção de componentes que constituem as correntes mássicas do EMSO, como também para a determinação das suas propriedades termodinâmicas e para cálculos de equilíbrio (VRTECH, 2005).

## ***2.5 Trabalhos anteriores na área***

PELLEGRINI e OLIVEIRA JUNIOR (2011) simularam uma usina cuja produção se divide em 50% de açúcar e 50% de E1G. O software utilizado foi o EES (Engineering Equation Solver) com critério de convergência de  $10^{-9}$ . Os autores fizeram uma análise de exergia em toda a usina, e concluíram que o excedente de energia elétrica pode ser triplicado atendendo um conjunto de fatores. Esses fatores são melhorar a eficiência de troca térmica nos evaporadores de múltiplo efeito de concentração de caldo, queimar todo o bagaço excedente, substituir o acionamento a vapor das moendas por acionamento elétrico, fazer a gaseificação do bagaço, e realizar a destilação em múltiplo efeito. Em cada efeito da destilação há um condensador e um trocador de calor em contracorrente que usa vapor proveniente dos outros efeitos. A pressão de operação varia em cada efeito.

DIAS *et al.* (2012) otimizaram uma usina autônoma de primeira geração integrada com uma de segunda que processa 500.000 kg/h de cana-de-açúcar, no Aspen Plus. O objetivo foi reduzir o consumo de vapor e, assim, aumentar o material lignocelulósico disponível para a geração de E2G ou de energia. Para atender esse objetivo houve a queima de 50% da palha gerada no campo para aumentar a quantidade disponível de bagaço para o E2G, a concentração do caldo por evaporadores múltiplo efeito para reduzir a demanda de vapor, a destilação por duplo efeito para reduzir a demanda de vapor, caldeiras de maior pressão para maior produção de energia, e a substituição de acionamento a vapor das moendas por acionamento elétrico para reduzir a demanda de vapor. Compararam-se quatro opções de caldeira: de 22, 42, 65 e 90 bar de pressão. No cenário otimizado da produção do E1G, consegue-se uma economia no consumo de vapor de 39% e aumentou-se o excedente de material lignocelulósico de 3,7% para valores acima dos 64%, em comparação à usina padrão. Para o cenário otimizado de produção integrada de E1G e E2G, aumentando a pressão de operação da caldeira de 22 para 90 bar, consegue-se ganhos na geração de energia elétrica de até 370%, ocasionando uma queima de 12% a mais de material lignocelulósico e queda na produção de etanol anidro global de apenas 3,2%.

ENSINAS *et al.* (2013) simularam no Aspen Plus uma usina autônoma de primeira e de segunda geração integrada, com objetivo econômico e ambiental, valendo-se de análise multiobjetivo. O software Aspen calculou os balanços de massa e de energia, e, baseado nos valores obtidos, um modelo termo-econômico foi resolvido no MATLAB. O problema de otimização utiliza de uma análise inteira-mista linear e de um otimizador multiobjetivo evolutivo. Na otimização multiobjetivo definiu-se como funções objetivo a maximização da produção de eletricidade e a maximização do etanol produzido, obtendo uma frente de Pareto, e como variáveis de decisão a fração de bagaço destinado para o E2G e a concentração de glicose em cada efeito do evaporador de múltiplo-efeito de concentração de caldo. Chegou-se à conclusão de que quanto mais bagaço se destina para o E2G, maior será a produção de etanol, maior será o preço por litro de etanol e menor será a produção de energia elétrica, limitando-se a uma fração máxima de 72% de bagaço destinado para o E2G devido à necessidade energética da própria planta.

MIRANDA *et al.* (2013) simularam uma destilaria autônoma de produção de E2G, em que a fermentação e a destilação são integradas com o processo de produção do E1G, no software HYSIS. Conclui-se que aproveitando 80% do bagaço para a

produção do E2G consegue-se aumentar o volume de etanol produzido em 26%. Em contrapartida, houve um aumento no gasto energético de 27% no resfriamento dos fermentadores e um aumento de 16% na etapa de destilação.

RIVERA *et al.* (2014) simularam uma destilaria autônoma de produção de E1G por meio do VSB (Virtual Sugarcane Biorefinery). O VSB consiste de um conjunto de ferramentas computacionais, como o simulador Aspen Plus e planilhas do Excel para análise de cenário. Foram testados diversos cenários e configurações para a planta, e definiram-se os estatisticamente significantes por meio dos gráficos de Pareto. Foi feita a análise linear e quadrática dos efeitos, e apenas os efeitos da análise linear mostraram-se estatisticamente significantes. Conclui-se que o rendimento no processo fermentativo e o rendimento na extração do caldo da cana influenciam linearmente a produção de etanol, e a redução no consumo de vapor e a pressão de operação de caldeira influenciam linearmente o excedente de energia elétrica, e esses quatro fatores influenciam linearmente a taxa interna de retorno de investimento.

## ***2.6 Biorrefinaria virtual***

O grupo de pesquisa em simulação e otimização de processos químicos da UFSCar construiu um fluxograma que integrava a produção de E1G, E2G e a cogeração de energia de uma usina de cana-de-açúcar. O simulador de processos orientado a equações EMSO foi utilizado. O fluxograma construído por FURLAN *et al.* (2012) pode ser visto na Figura 6, e cada parte desse fluxograma será explicada nos subitens a seguir.

### ***2.6.1 Correntes***

O padrão do EMSO são correntes com vazões e frações molares, mas como nas usinas de cana-de-açúcar é mais comum o uso de vazões e frações mássicas, o grupo optou por usar correntes com propriedades mássicas.

Foram utilizados dois tipos de correntes, uma corrente constituída de 18 componentes e outra contendo somente água, em suas fases líquida e vapor. A utilização de uma corrente que só tenha um componente, a água, foi feita com o intuito de diminuir a complexidade do sistema de equações, pois, assim, diminui-se o número de variáveis do sistema. Outra vantagem da corrente que só contenha água é o uso do pacote *Propterm*, pacote do EMSO que possui correlações para as propriedades da água pura – entalpia específica, entropia específica, pressão e temperatura. Na Tabela 4 são listados os compostos utilizados na simulação.

Tabela 4 – Compostos empregados na simulação da biorrefinaria virtual.

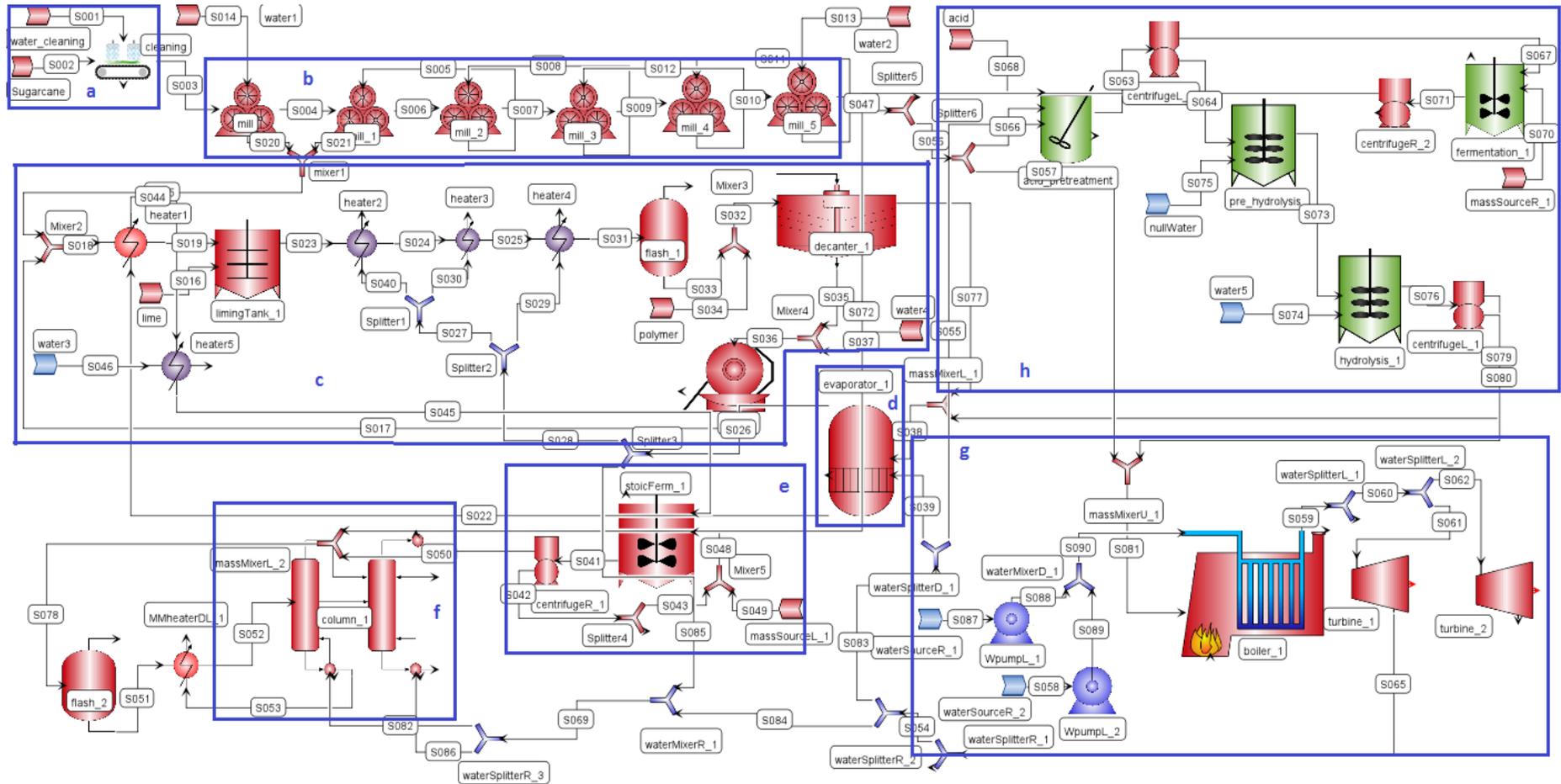
<b>Composto</b>	<b>Nome no simulador</b>	<b>Número no simulador</b>
<b>Terra</b>	Dirt	1
<b>Glicose</b>	Glucose	2
<b>Celulose</b>	Cellulose	3
<b>Lignina</b>	Lignin	4
<b>Hemicelulose</b>	Hemicell	5
<b>Óxido de potássio</b>	K2O	6
<b>Xilose</b>	Xylose	7
<b>Cloreto de potássio</b>	KCl	8
<b>Ácido fosfórico</b>	H3PO4	9
<b>Hidróxido de cálcio</b>	CaOH2	10
<b>Sacarose</b>	Sucrose	11
<b>Etanol</b>	Ethanol	12
<b>Levedura</b>	Yeast	13
<b>Água</b>	Water	14
<b>Dióxido de carbono</b>	CO2	15
<b>Glicerol</b>	Glycerol	16
<b>Ácido Succínico</b>	SucAc	17
<b>Ácido Acético</b>	AcetAc	18

Fonte: Adaptado de FURLAN (2012).

O cálculo da fração de sólidos solúveis, brix, em cada uma das correntes foi feito usando a Equação 2.4, em que  $z_x$  é a fração mássica do componente x.

$$\begin{aligned}
 Brix = & z_{Glicose} + z_{Óxido\ de\ potássio} + z_{Xilose} + z_{Cloreto\ de\ potássio} + z_{Ácido\ fosfórico} + \\
 & z_{Hidróxido\ de\ cálcio} + z_{Sacarose} + z_{Glicerol} + z_{Ácido\ succínico} + z_{Ácido\ acético}
 \end{aligned}
 \tag{2.4}$$

Figura 6 - Fluxograma desenvolvido pelo grupo de pesquisa em simulação e otimização de processos químicos da UFSCar.



Fonte: Adaptado de FURLAN *et al.* (2012).

O valor de brix dado pela Equação 2.4 é um valor entre 0 e 1, mas nesse trabalho podem aparecer valores em porcentagem brix ou grau brix, que são valores que variam entre 0 e 100, ou seja, 0,5 brix é o mesmo que 50 °Bx.

O cálculo da entalpia específica da corrente de água é dado pelo pacote *Propterm*, enquanto que para a corrente dos constituintes é dada pela Equação 2.5 (JESUS, 2000).

$$Entalpia(h) = 4,187 * (1 - 0,6 * Brix) * (T - 273,15) \quad (2.5)$$

em que a entalpia específica é dada em kJ/kg e a temperatura é dada em Kelvin.

### 2.6.2 Composição da cana-de-açúcar

O tipo da cana que chega à usina tem grande influência no processo de produção de etanol. A composição que foi adotada na simulação está descrita na Tabela 5. A vazão de cana-de-açúcar que é considerada na entrada é de 500.000 kg/h.

Tabela 5 – Composição da cana-de-açúcar usada na biorrefinaria.

<b>Componente</b>	<b>% mássico</b>
<b>Terra</b>	0,60
<b>Glicose</b>	0,60
<b>Celulose</b>	5,00
<b>Lignina</b>	2,75
<b>Hemicelulose</b>	4,75
<b>K<sub>2</sub>O</b>	2,07
<b>Sacarose</b>	14,5
<b>Água</b>	69,73

Fonte: Elaborado pelo autor.

### 2.6.3 Operação unitária de limpeza

Na biorrefinaria original, a etapa de limpeza era constituída por um equipamento responsável pela limpeza em que havia duas entradas e duas saídas. As entradas consistiam na alimentação da cana-de-açúcar e na água utilizada para a sua limpeza, já as saídas consistiam da cana limpa e da água carregada de impurezas.

Para a modelagem desse equipamento foi inserido um parâmetro de estado, ou seja, se o componente estiver no estado 0 ele sairá na corrente de cana limpa, se estiver no estado 1 ele sairá na corrente de impurezas. Apenas o composto Terra foi considerado no estado 1, enquanto os demais foram considerados no estado 0.

Foi considerada uma eficiência de 70% para a etapa de limpeza, ou seja, 70% dos componentes que estão no estado 1 sairão na corrente de impurezas. Foi considerada uma perda de 1,5% de açúcar, ou seja, 1,5% dos componentes que estão no estado 0 sairão na corrente de impurezas. A relação de um quilograma de água de lavagem para cada quilograma de cana que entra no processo foi considerada como parâmetro. Na área “a” em destaque da Figura 6 é apresentada a etapa da limpeza.

#### **2.6.4 Moagem**

A moenda foi implementada com duas entradas e duas saídas. O sistema conta com seis ternos. A saída da cana limpa da etapa de limpeza é a entrada do primeiro terno, e a saída do segundo terno alimenta o terceiro terno e assim sucessivamente até a saída do bagaço no sexto terno. Água pura é alimentada no sexto terno e o caldo extraído alimenta o quinto terno e assim sucessivamente até o segundo terno. O primeiro terno não é alimentado com água, o caldo é extraído apenas com pressão mecânica.

Para a modelagem desse equipamento foi inserido um parâmetro de estado, ou seja, se o componente estiver no estado 0 ele sairá na corrente do caldo, se estiver no estado 1 ele sairá na corrente do bagaço. No estado 1 se encontram a Terra, a Celulose, a Lignina, a Hemicelulose e o Óxido de potássio.

A vazão mássica de água de embebição utilizada foi de 300 kg por tonelada de cana limpa. O bagaço na saída do último terno das moendas sai com uma umidade de 50 %. O resíduo de açúcar no bagaço que sai no último terno é de 3,74 %. O caldo é proveniente da saída do primeiro e do segundo ternos. Essa etapa pode ser vista na área em destaque “b” da Figura 6.

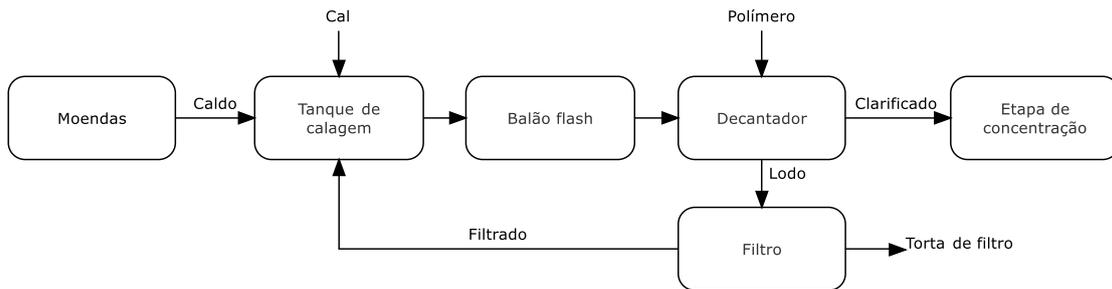
### **2.6.5 Tratamento do caldo**

O caldo proveniente da etapa de moagem é aquecido com o caldo concentrado (etapa de concentração descrita no próximo subitem). O tratamento começa no tanque de calagem, que foi modelado com um reator de mistura perfeita, com uma solução 10% (mássica) de hidróxido de cálcio e 90 % água, na proporção de 2 kg de solução por tonelada de caldo. O caldo recebe um novo aquecimento por meio de vapor vegetal oriundo do evaporador da concentração do caldo até a temperatura de 115 °C para que ocorra a eliminação dos gases no balão flash. No balão flash ocorre apenas a evaporação de 1,51 % da massa de água, já que os gases dissolvidos não foram inseridos no fluxograma, e depois o caldo segue para um decantador (FURLAN, 2012).

No decantador o caldo se divide em duas correntes, o caldo clarificado que irá para o evaporador, para a sua concentração, e o lodo que irá para o filtro. Há uma corrente que entra no decantador, chamada de Polímero, mas como não foi inserido nenhum componente na simulação que represente o polímero, a corrente é constituída apenas de água. Na modelagem desse equipamento utilizou-se do parâmetro de estado, o componente no estado 0 sairá na corrente do clarificado, no estado 1 o componente sairá na corrente do lodo. No estado 1 se encontram a Celulose, a Lignina, a Hemicelulose, o Óxido de potássio e o Hidróxido de cálcio. No decantador há perda de 6,8% dos açúcares e o lodo sai com 50 % de umidade. Considerou-se no equipamento uma eficiência de 100% na separação, ou seja, todo os componentes do estado 1 irão para o lodo.

No filtro, água é alimentada na proporção de 1,16 kg de água por kg de lodo. A eficiência de separação é de 90 %, com a umidade de torta de filtro de 70 % e com perda de açúcares de 5,6%, ou seja, 94,4% dos açúcares perdidos no decantador são recuperados no filtro. Os parâmetro de estado do filtro tem os mesmos componentes do decantador no estado 1, sendo destinados esses componentes para a formação da torta de filtro. A corrente filtrada é reciclada para antes do aquecimento do caldo na etapa de calagem para um maior aproveitamento dos açúcares. Todos os equipamentos dessa etapa e a forma como se conectam podem ser vistos na área em destaque “c” da Figura 6. Na Figura 7 encontra-se um fluxograma simplificado da etapa de tratamento do caldo.

Figura 7 – Fluxograma da etapa de tratamento do caldo.



Fonte: Elaborado pelo autor.

### 2.6.6 Concentração do caldo

A etapa de evaporação tem importância para a concentração do caldo para evitar a compra de equipamentos maiores e mais caros, devido a volume maiores de produto sendo processados, como também para a geração de vapor vegetal que será utilizado em várias etapas do processo.

Na modelagem original foi utilizado um único evaporador, o que é mais comum em usinas que produzem unicamente etanol, para a concentração do caldo de 13,42 °Bx até 21,40 °Bx. O aquecimento do evaporador é feito com o vapor superaquecido que deixa a turbina de contrapressão a 2,5 bar e 153,58 °C, e o vapor vegetal produzido está a 1,5 bar saturado. Desconsiderou-se as perdas térmicas da linha. Foi considerada uma área de troca térmica de 12.000 m<sup>2</sup>. Na área em destaque “d” da Figura 6 podem ser vistos os equipamentos dessa etapa e suas conexões.

O vapor vegetal é destinado para aquecimento do caldo na entrada do vapor flash na etapa de tratamento e, também, para os refeedores da coluna de destilação.

O modelo desse equipamento consta de duas entradas: caldo e vapor; e três correntes de saída: condensado, concentrado e vapor vegetal. A corrente Vapor é o vapor de escape de turbina, o Condensado é o vapor de escape que condensou, o Concentrado é o caldo concentrado, e Vapor vegetal é a água que evaporou do caldo. Os balanços mássicos considerados para o modelo foram os seguintes:

Balanço global:

$$F_{Vapor} = F_{Condensado} \quad (2.6)$$

$$F_{Caldo} = F_{Concentrado} + F_{Vapor\ vegetal} \quad (2.7)$$

Balanço mássico para a água:

$$F_{Caldo} * z_{Água,Caldo} = F_{Concentrado} * z_{Água,Caldo} + F_{Vapor\ vegetal} \quad (2.8)$$

Balanço mássico para os demais componentes:

$$F_{Caldo} * z_{Componente,Caldo} = F_{Concentrado} * z_{Componente,Concentrado} \quad (2.9)$$

em que  $F_a$  é a vazão mássica da corrente a em kg/h,  $z_{b,a}$  é a fração mássica do componente b na corrente a em kg/h.

A entalpia específica das correntes de Vapor vegetal e do Condensado foi calculada pelo pacote *Propterm* do EMSO, e a entalpia da corrente Concentrado é calculada pela Equação 2.5. O *Propterm* prevê a temperatura de saturação ( $T_{sat}$ ), baseado na especificação da pressão de saída da corrente Vapor vegetal, e a temperatura da corrente Condensado, baseado na especificação da pressão da corrente Vapor. O balanço de energia é dado pelas seguintes equações:

$$F_{Caldo} * (h_{Caldo} - 0,04187) + Q = F_{Concentrado} * (h_{Concentrado} - 0,04187) + F_{Vapor\ vegetal} * (h_{Vapor\ vegetal} - 0,101856) \quad (2.10)$$

$$Q = F_{Vapor} * (h_{Vapor} - h_{Condensado}) \quad (2.11)$$

$$Q = U * A * (T_{Vapor} - T_{Concentrado}) \quad (2.12)$$

$$BPE * (0,355 * (1,036 - Brix_{Condensado})) = (Brix_{Condensado} * (0,3 + Brix_{Condensado}) * (0,22 + 0,0078 * (T_{sat} - 273,15))) \quad (2.13)$$

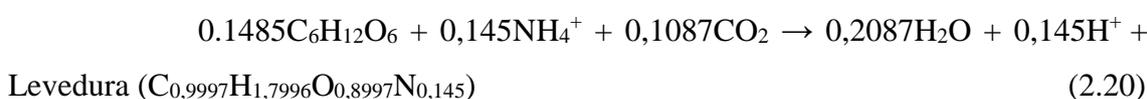
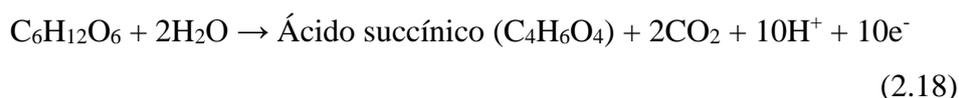
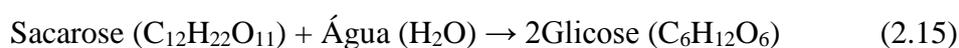
$$T_{Vapor\ vegetal} = T_{sat} + BPE \quad (2.14)$$

em que  $h_a$  é a entalpia específica da corrente a em kJ/kg,  $Q$  é a taxa de calor total requerido em kW,  $U$  é o coeficiente global de troca térmica em kW/(K\*m<sup>2</sup>),  $A$  é a área de troca térmica em m<sup>2</sup>,  $BPE$  é a elevação da temperatura de ebulição,  $Brix_a$  é a fração brix da corrente a, e  $T_a$  é a temperatura da corrente a em Kelvin.

Como a forma para calcular a entalpia de correntes mássicas é diferente da forma com que se calcula a entalpia de correntes de água, foi necessário uma correção para colocar as entalpias das correntes mássicas (Caldo e Concentrado) e da corrente de água (Vapor vegetal) no mesmo estado de referência na Equação 2.10. A Equação 2.13 foi baseada em JESUS (2000).

### 2.6.7 Fermentação

Devido à simulação ser estacionária, foi utilizado um modelo simplificado para o fermentador, considerando o fluxo contínuo e com conversão estequiométrica dos reagentes, sem considerar efeitos de inibição. Há duas correntes de entrada, o caldo e a levedura, e uma corrente de saída, o vinho. A etapa de fermentação pode ser vista na área “e” em destaque da Figura 6. As reações químicas ilustradas pelas Equações 2.15 a 2.20 foram consideradas para a modelagem.



As conversões definidas no EMSO para cada uma dessas reações podem ser vistas na Tabela 6.

A partir dessas reações químicas, e de suas conversões, a modelagem considerou os seguintes balanços mássicos, em que  $F_a$  é a vazão da corrente a em kg/h,  $z_{b,a}$  é a fração mássica do componente b na corrente a,  $MM_b$  é a massa molar do

componente b, e  $MM_{H^+} = 1$  g/mol. No balanço mássico da glicose inseriu-se a variável  $G_0$  para simplificar os demais balanços mássicos.

Tabela 6 – Conversão estipulada no EMSO para cada uma das reações usadas no balanço de massa para a modelagem do fermentador.

Número da reação (i)	Conversão (X(i))	Componente a que a conversão se refere
2.15	1,00	Sacarose
2.16	0,89	Glicose
2.17	0,01	Glicose
2.18	0,00	Glicose
2.19	0,00	Glicose
2.20	0,04	Levedura

Fonte: Elaborado pelo autor.

$$G_0 = 2 * \frac{MM_{Glicose}}{MM_{Sacarose}} * X(2.15) * (F_{Caldo} * Z_{Sacarose,Caldo} + F_{Levedura} * Z_{Sacarose,Levedura}) + F_{Caldo} * Z_{Glicose,Caldo} + F_{Levedura} * Z_{Glicose,Levedura} \quad (2.21)$$

$$F_{Vinho} * Z_{Glicose,Vinho} = (1 - \sum_{i=2.16}^{2.20} X(i)) * G_0 \quad (2.22)$$

Balanço mássico para a sacarose no EMSO:

$$F_{Vinho} * Z_{Sacarose,Vinho} = (1 - X(2.15)) * (F_{Caldo} * Z_{Sacarose,Caldo} + F_{Levedura} * Z_{Sacarose,Levedura}) \quad (2.23)$$

Balanço mássico para a água no EMSO:

$$F_{Caldo} * Z_{Água,Caldo} + F_{Levedura} * Z_{Água,Levedura} - F_{Vinho} * Z_{Água,Vinho} = (F_{Caldo} * Z_{Sacarose,Caldo} + F_{Levedura} * Z_{Sacarose,Levedura}) * X(2.15) * \frac{MM_{Água}}{MM_{Sacarose}} + \left( 4 * \frac{MM_{H^+}}{MM_{Água}} * X(2.17) + \frac{2 * MM_{Água} - 10 * MM_{H^+}}{MM_{Água}} * X(2.18) + \frac{2 * MM_{Água} - 8 * MM_{H^+}}{MM_{Água}} * X(2.19) \right) * G_0 * \frac{MM_{Água}}{MM_{Glicose}} - 0,2085 * X(2.20) * G_0 * \frac{MM_{Água}}{MM_{Levedura}} \quad (2.24)$$

Balanço mássico para o etanol no EMSO:

$$X(3.16) * G_0 * 2 * \frac{MM_{Etanol}}{MM_{Glicose}} + F_{Caldo} * Z_{Etanol,Caldo} + F_{Levedura} * Z_{Etanol,Levedura} = F_{Vinho} * Z_{Etanol,Vinho} \quad (2.25)$$

Balanco mássico para o glicerol no EMSO:

$$X(3.17) * G0 * 2 * \frac{MM_{Glicerol}}{MM_{Glicose}} + F_{Caldo} * Z_{Glicerol,Caldo} + F_{Levedura} * Z_{Glicerol,Levedura} = F_{Vinho} * Z_{Glicerol,Vinho} \quad (2.26)$$

Balanco mássico para o CO<sub>2</sub> no EMSO:

$$F_{Vinho} * Z_{CO_2,Vinho} = (2 * X(2.16) + 2 * X(2.18) + 2 * X(2.19)) * G0 * \frac{MM_{CO_2}}{MM_{Glicose}} - 0,1087 * X(2.20) * G0 * \frac{MM_{CO_2}}{MM_{Levedura}} + F_{Caldo} * Z_{CO_2,Caldo} + F_{Levedura} * Z_{CO_2,Levedura} \quad (2.27)$$

Balanco mássico para o ácido succínico no EMSO:

$$X(2.18) * G0 * \frac{MM_{Ácido\ succínico}}{MM_{Glicose}} + F_{Caldo} * Z_{Ácido\ succínico,Caldo} + F_{Levedura} * Z_{Ácido\ succínico,Levedura} = F_{Vinho} * Z_{Ácido\ succínico,Vinho} \quad (2.28)$$

Balanco mássico para o ácido acético no EMSO:

$$X(2.19) * G0 * \frac{MM_{Ácido\ acético}}{MM_{Glicose}} + F_{Caldo} * Z_{Ácido\ acético,Caldo} + F_{Levedura} * Z_{Ácido\ acético,Levedura} = F_{Vinho} * Z_{Ácido\ acético,Vinho} \quad (2.29)$$

Balanco mássico para a levedura no EMSO:

$$X(2.20) * G0 + F_{Caldo} * Z_{Levedura,Caldo} + F_{Levedura} * Z_{Levedura,Levedura} = F_{Vinho} * Z_{Levedura,Vinho} \quad (2.30)$$

Balanco mássico para os demais componentes no EMSO:

$$F_{Caldo} * Z_{Componente,Caldo} + F_{Levedura} * Z_{Componente,Caldo} = F_{Vinho} * Z_{Componente,Caldo} \quad (2.31)$$

A eficiência de separação da centrífuga foi considerada de 100%, ou seja, toda a levedura é separada do vinho. A demanda energética da centrífuga é 0,7 kW.h/t de alimentação. A levedura deixa a centrífuga com concentração de células de 70% em massa e é adicionada água na proporção de 1,23 quilogramas de água por quilograma de corrente de levedura. Após a adição da água, a levedura é alimentada no fermentador na proporção de 0,485 quilogramas por quilograma de caldo a ser fermentado.

### **2.6.8 Destilação**

Devido à complexidade e a problemas de convergência, utilizou-se de um interpolador em conjunto com uma tabela de inspeção multidimensional como alternativa ao modelo fenomenológico da coluna. O interpolador foi implementado com um *plug in* do EMSO. Os dados utilizados pela simulação do EMSO são obtidos de uma tabela gerada pela simulação de uma coluna de destilação por método rigoroso no simulador Aspen Plus (versão AspenOne 7.0). As demais variáveis são obtidas por meio dos balanços de massa e energia incluídos no modelo (FURLAN *et al.*, 2010). O valor do brix das correntes foi calculado pela Equação 2.4. A área em destaque “f” da Figura 6 ilustra a coluna de destilação.

### **2.6.9 Cogeração de energia**

O sistema de cogeração consiste de duas bombas que injetam água líquida na caldeira a 65 bar. A vazão mássica de uma das bombas é estimada pela simulação, enquanto a outra bomba é considerada como bomba reserva e sua vazão é zero. A eficiência de ambas as bombas é de 50 %.

A modelagem da caldeira considera que, além da queima do bagaço, há a queima de 35.000 kg/h de palha de cana-de-açúcar com 15% de umidade. Isso foi feito para considerar o aproveitamento da palha deixada na plantação, além de aumentar a produção de E2G, já que menos bagaço é queimado. A Tabela 7 contém os principais parâmetros utilizados para a modelagem da caldeira.

O vapor produzido pela caldeira alimenta duas turbinas, uma turbina de contrapressão, cuja eficiência é de 68 %, e que descarrega vapor superaquecido a 2,5 bar e a 153,58 °C (vapor de escape) para atender a demanda energética da usina; e outra turbina de condensação, cuja eficiência é de 70% e que descarrega um condensado a 0,1 bar. A turbina de condensação é considerada apenas para a geração de eletricidade. A etapa de cogeração de energia pode ser vista na área em destaque “g” da Figura 6.

Tabela 7 – Principais dados da caldeira.

Dado	Valor
Pressão de saída	65,7046 bar
Temperatura de saída	520 °C
Eficiência da caldeira	92 %
Vazão de palha de cana (15 % de umidade)	35.000 kg/h
Poder calorífico inferior (PCI) da palha da cana (15 % de umidade)	12.960 kJ/kg
PCI da celulose (base seca)	15.997,1 kJ/kg
PCI da hemicelulose (base seca)	16.443,3 kJ/kg
PCI da lignina (base seca)	24.170 kJ/kg

Fonte: Baseado em FURLAN (2012).

O vapor produzido na turbina de contrapressão é superaquecido devido aos problemas ocasionados pelo vapor saturado. O arraste de gotas de líquido em uma corrente de vapor provoca desgastes mecânicos na palheta da turbina devido a energia do impacto e a maior inércia em comparação ao vapor (AFFONSO *et al.*, 2002).

A caldeira foi modelada com duas correntes de entrada, bagaço e água, e uma corrente de saída, vapor. A corrente de palha de cana-de-açúcar é considerada um parâmetro a especificar dentro do modelo, ou seja, é apenas um valor a ser considerado para a geração de energia. O balanço de energia utilizado no modelo da caldeira no EMSO é descrito pela Equação 2.32.

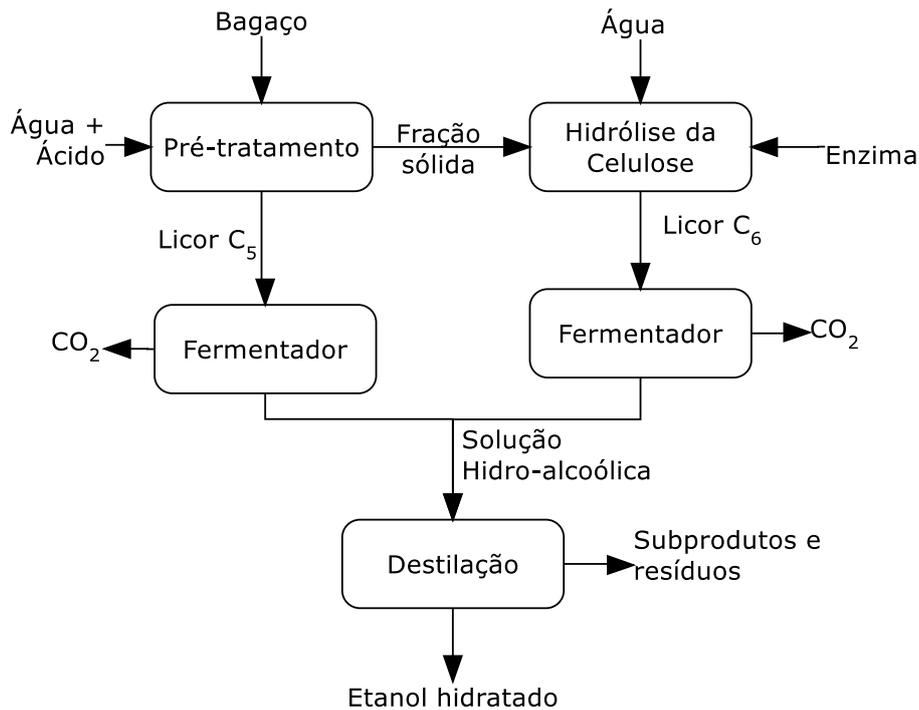
$$F_{Água} * (h_{Vapor} - h_{Água}) = (F_{Bagaço} * (h_{Celulose} * Z_{Celulose,Bagaço} + h_{Hemicelulose} * Z_{Hemicelulose,Bagaço} + h_{Lignina} * Z_{Lignina,Bagaço} - h_{Vaporização da água} * Z_{Água,Bagaço}) + h_{Palha de Cana-de-açúcar} * F_{Palha de Cana-de-açúcar,Bagaço}) * Eficiência \quad (2.32)$$

em que  $F_a$  é a vazão mássica em kg/h da corrente a;  $h_b$  é a entalpia específica em kJ/kg da corrente ou do componente b; e  $z_{c,d}$  é a fração mássica do componente c na corrente d.

### 2.6.10 Etanol de segunda geração

A Figura 8 ilustra um fluxograma simplificado do processo de produção do E2G e sua integração com o processo de E1G. Cada uma das etapas será explicada nos subitens a seguir.

Figura 8 – Fluxograma simplificado do processo de produção do E2G.



Fonte: Elaborado pelo autor.

#### 2.6.10.1 Pré-tratamento ácido

O método de pré-tratamento modelado foi o de ácido diluído. Inicialmente foi adicionada água na temperatura ambiente na proporção de 0,2 quilogramas de água por quilograma de bagaço. O sistema opera a 120 °C e a 2 atm de pressão. Foi estipulada uma conversão da celulose de 8 % e de 74 % para a hemicelulose.

Na modelagem há duas correntes de entrada, chamadas de entrada e de água, e uma corrente de saída, chamada de saída. Como o ácido sulfúrico não foi inserido na lista dos componentes usados para essa simulação, a entrada de ácido é simulada com a entrada da corrente de água pura. A seguir são apresentados os principais balanços de

massa para a etapa de pré-tratamento, em que  $F_a$  é a vazão mássica da corrente;  $z_{b,a}$  é a fração mássica do componente b na corrente a; e  $MM_c$  é a massa molar do componente c.

Balço mássico para a celulose no EMSO:

$$F_{Saída} * z_{Celulose,Saída} = F_{Entrada} * z_{Celulose,Entrada} * (1 - \text{Conversão da celulose}) \quad (2.33)$$

Balço mássico para a hemicelulose no EMSO:

$$F_{Saída} * z_{Hemicelulose,Saída} = F_{Entrada} * z_{Hemicelulose,Entrada} * (1 - \text{Conversão da hemicelulose}) \quad (2.34)$$

Balço mássico para a água no EMSO:

$$F_{Saída} * z_{Água,Saída} = F_{Entrada} * z_{Água,Entrada} + F_{Água} - F_{Entrada} * z_{Celulose,Entrada} * (\text{Conversão da celulose}) * \frac{MM_{Água}}{MM_{Celulose}} - F_{Entrada} * z_{Hemicelulose,Entrada} * (\text{Conversão da hemicelulose}) * \frac{MM_{Água}}{MM_{Hemicelulose}} \quad (2.35)$$

Balço mássico para a sacarose no EMSO:

$$F_{Saída} * z_{Sacarose,Saída} = F_{Entrada} * z_{Sacarose,Entrada} + F_{Entrada} * z_{Celulose,Entrada} * (\text{Conversão da celulose}) * \frac{MM_{Sacarose}}{MM_{Celulose}} \quad (2.36)$$

Balço mássico para a xilose no EMSO:

$$F_{Saída} * z_{Xilose,Saída} = F_{Entrada} * z_{Xilose,Entrada} + F_{Entrada} * z_{Hemicelulose,Entrada} * (\text{Conversão da hemicelulose}) * \frac{MM_{Xilose}}{MM_{Hemicelulose}} \quad (2.37)$$

Balço mássico para os demais componentes no EMSO:

$$F_{Saída} * z_{Componente,Saída} = F_{Entrada} * z_{Componente,Entrada} \quad (2.38)$$

A corrente de saída do pré-tratamento vai para uma centrífuga com rendimento de 100 % e demanda energética de 1 kW.h/t da alimentação. O objetivo da centrífuga é separar a corrente rica em xilose e destiná-la para um fermentador de pentoses, enquanto a outra corrente vai para a etapa de hidrólise.

### 2.6.10.2 Fermentador de pentoses

O fermentador de pentoses se baseia nas reações químicas apresentadas nas Equações 2.39 e 2.40 e nas respectivas conversões apresentadas na Tabela 8.

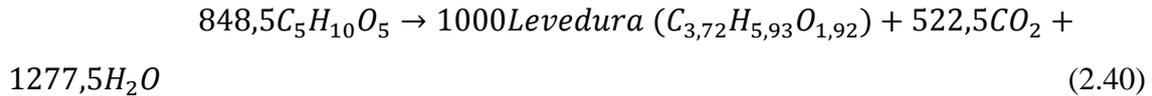
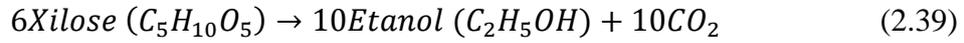


Tabela 8 – Conversões das reações químicas 2.39 e 2.40.

Número da reação (i)	Conversão (X(i))
2.39	0,70
2.40	0,01

Fonte: Elaborado pelo autor.

Mesmo que a levedura utilizada para a fermentação das pentoses (*Pichia stipitis*, fórmula molecular  $C_{3,72}H_{5,93}O_{1,92}$ ) seja diferente daquela utilizada para fermentar hexoses (*Saccharomyces cerevisiae*, fórmula molecular  $C_{0,9997}H_{1,7996}O_{0,8997}N_{0,145}$ ), na modelagem foi considerada como o mesmo composto. Há duas correntes de entrada, o licor e a levedura, e uma corrente de saída, o vinho. A modelagem considerou os seguintes balanços mássicos, em que  $F_a$  é a vazão mássica da corrente a;  $z_{b,a}$  é a fração mássica do componente b na corrente a; e  $MM_c$  é a massa molar do componente c.

Balanço mássico da xilose no EMSO:

$$Xi0 = F_{Licor} * z_{Xilose,Licor} + F_{Levedura} * z_{Xilose,Levedura} \quad (2.41)$$

$$F_{Vinho} * z_{Xilose,Vinho} = Xi0 * (1 - X(2.39) - X(2.40)) \quad (2.42)$$

Balanço mássico do etanol no EMSO:

$$F_{Vinho} * z_{Etanol,Vinho} = F_{Licor} * z_{Etanol,Licor} + F_{Levedura} * z_{Etanol,Levedura} + \frac{10}{6} * \frac{MM_{Etanol}}{MM_{Xilose}} * Xi0 * X(2.39) \quad (2.43)$$

Balanço mássico da levedura no EMSO:

$$F_{Vinho} * z_{Levedura,Vinho} = F_{Licor} * z_{Levedura,Licor} + F_{Levedura} * z_{Levedura,Levedura} + \frac{1000}{848,5} * \frac{MM_{Levedura}}{MM_{Xilose}} * Xi0 * X(2.40) \quad (2.44)$$

Balanço mássico da água no EMSO:

$$F_{Vinho} * z_{Água,Vinho} = F_{Licor} * z_{Água,Licor} + F_{Levedura} * z_{Água,Levedura} + \frac{1277,5}{848,5} * \frac{MM_{Água}}{MM_{Xilose}} * Xi0 * X(2.40) \quad (2.45)$$

Balanço mássico do CO<sub>2</sub> no EMSO:

$$F_{Vinho} * z_{CO_2,Vinho} = F_{Licor} * z_{CO_2,Licor} + F_{Levedura} * z_{CO_2,Levedura} + \frac{10}{6} * \frac{MM_{CO_2}}{MM_{Xilose}} * Xi0 * X(2.39) \quad (2.46)$$

Balanço mássico para os demais componentes no EMSO:

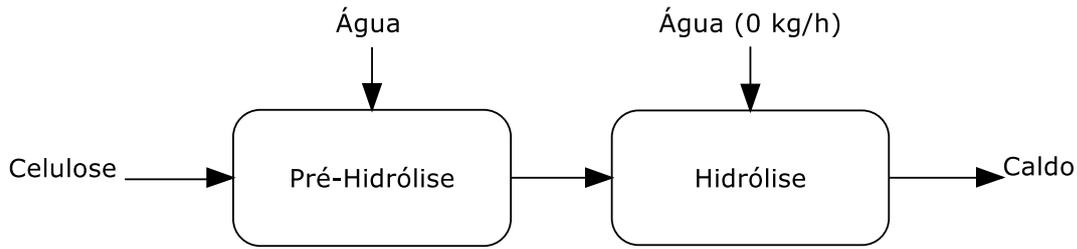
$$F_{Vinho} * z_{Componente,Vinho} = F_{Licor} * z_{Componente,Licor} + F_{Levedura} * z_{Componente,Levedura} \quad (2.47)$$

O vinho alcoólico vai para uma centrífuga de eficiência de 100 % e demanda energética de 0,7 kW.h/t de alimentação, para que ocorra a separação da levedura. Esse vinho obtido se mistura com o vinho do E1G e ambos são destinados para o balão flash que se encontra antes da coluna de destilação.

### 2.6.10.3 Hidrólise

A corrente pobre em xilose é destinada para um equipamento de pré-hidrólise, em que a conversão de celulose em glicose é de 20%, e posteriormente para um equipamento de hidrólise, cuja conversão é de 62,5%. A proporção utilizada em ambos os equipamentos é de 67,34 quilogramas de enzima por tonelada de celulose. Na pré-hidrólise a energia de mistura por volume é de 100 W/m<sup>3</sup>, enquanto na hidrólise é de 302,5 W/m<sup>3</sup>. A fração de sólidos do equipamento de pré-hidrólise é de 0,2, sendo necessária uma corrente de água entrando no equipamento para satisfazer essa especificação. No equipamento de hidrólise a vazão de água é especificada como zero e a fração de sólidos é uma variável a ser determinada. Nos equipamentos de pré-hidrólise e hidrólise há duas correntes de entrada, Água e Celulose, e uma corrente de saída, Caldo. A Figura 9 ilustra esquematicamente o processo de hidrólise.

Figura 9- Esquema simplificado do processo de hidrólise do E2G.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Os principais balanços utilizados para ambos os equipamentos modelados no EMSO são apresentados a seguir.

Balanço global:

$$F_{Caldo} = F_{Celulose} + F_{Água} \quad (2.48)$$

Balanço mássico para a enzima no EMSO:

$$Enzimas = F_{Celulose} * (z_{Celulose,Celulose} + z_{hemicelulose,Celulose} + z_{lignina,Celulose}) * (Proporção\ de\ enzima/celulose) \quad (2.49)$$

Fração de sólidos (solidLoad) no reator do EMSO:

$$solidLoad * F_{Água} = F_{Celulose} * (z_{Celulose,Celulose} + z_{hemicelulose,Celulose} + z_{lignina,Celulose}) - F_{Celulose} * solidLoad \quad (2.50)$$

Energia requerida pelo impelidor (E) em kW no reator do EMSO baseado na energia de mistura por volume (VolPot):

$$E = F_{Caldo} * t_{residência} * v_{específico} * VolPot \quad (2.51)$$

Balanço mássico da glicose no EMSO:

$$F_{Caldo} * z_{Glicose,Caldo} = F_{Celulose} * z_{Celulose,Celulose} * Conversão + F_{Celulose} * z_{Glicose,Celulose} \quad (2.52)$$

Balanço mássico da celulose no EMSO:

$$F_{Caldo} * z_{Celulose,Caldo} = F_{Celulose} * z_{Celulose,Celulose} * (1 - Conversão) \quad (2.53)$$

Balanço mássico da água no EMSO:

$$F_{Caldo} * z_{Água,Caldo} = F_{Celulose} * z_{Água,Celulose} + F_{Água} \quad (2.54)$$

Balanço mássico dos demais componentes no EMSO:

$$F_{Caldo} * z_{Componente,Caldo} = F_{Celulose} * z_{Componente,Celulose} \quad (2.55)$$

em que  $F_a$  é a vazão mássica da corrente a;  $z_{b,a}$  é a fração mássica do componente b na corrente a;  $t_{residência}$  é o tempo de residência, que é de 4 horas; e  $v_{específico}$  é o volume específico da água que é 0,001 m<sup>3</sup>/kg.

Depois da hidrólise o caldo é destinado para uma centrífuga com 100 % de eficiência para separar as frações de celulose, hemicelulose e lignina ainda remanescentes e destiná-las para a queima na caldeira, enquanto a corrente limpa é misturada com o caldo do E1G proveniente do decantador da etapa de tratamento e ambos são concentrados no evaporador. A etapa inteira do processo de produção do etanol de segunda geração pode ser vista na área em destaque “h” da Figura 6.

## 2.7 Integração energética

A integração energética em plantas industriais é algo que se faz necessário para a redução de custos devido ao aproveitamento de energia de correntes de processo. Ela é uma técnica que combina correntes quentes e frias do processo em trocadores de calor, de modo a diminuir o consumo de utilidades como vapor de água e água de resfriamento.

A recuperação de energia entre as correntes não é simples, e existe uma infinidade de combinações possíveis entre as correntes. Existem diversas técnicas para se encontrar a rede de trocadores de calor (RTC) que apresente a melhor configuração, e uma dessas técnicas é a análise *Pinch*, que se utiliza de conceitos termodinâmicos para melhorar a eficiência no uso de energia.

### 2.7.1.1 *Análise Pinch*

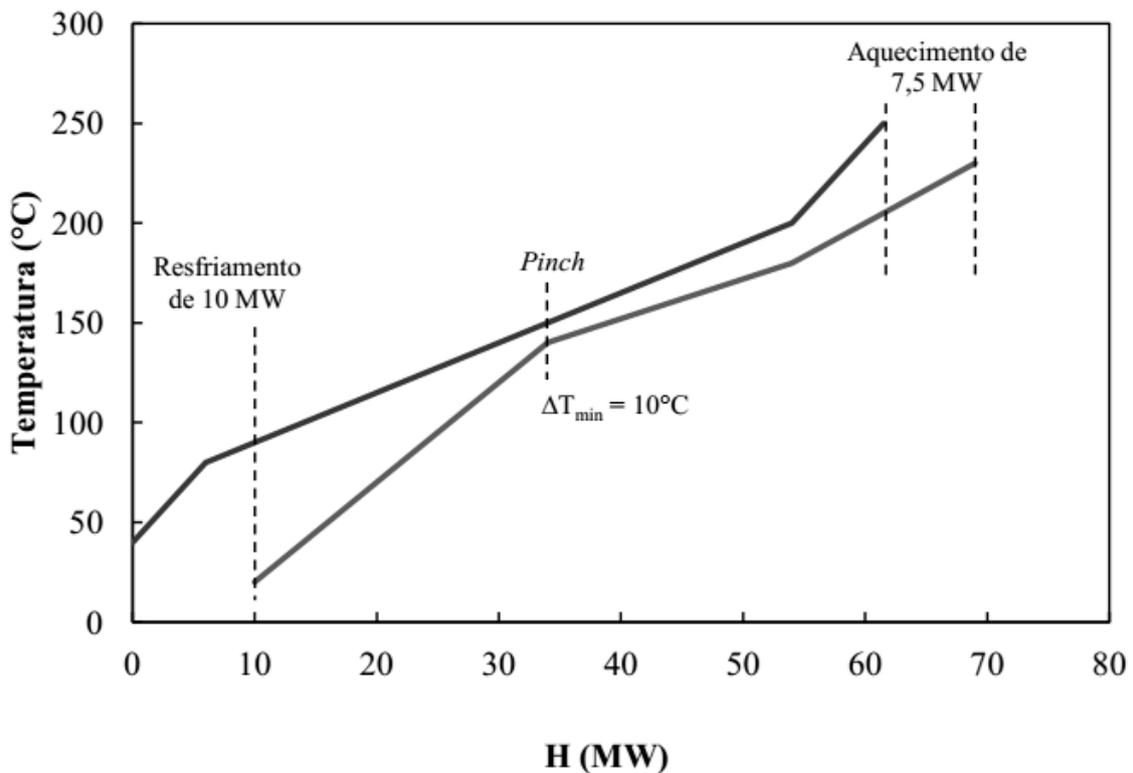
A análise Pinch foi desenvolvida por Linnhoff no final da década de 1970, e fornece ferramentas que permitem averiguar o fluxo de energia dentro do processo e minimizar a demanda de utilidades. Nessa análise as correntes quentes são aquelas que fornecem energia e há queda de temperatura, e as correntes frias são aquelas que recebem energia e há aumento de temperatura (OLIVEIRA, 2014).

#### 2.7.1.1.1 *Curva composta*

A curva composta é uma representação gráfica dos perfis de temperatura versus entalpia das correntes quentes e frias do processo, sendo obtida pela soma de todas as capacidades térmicas disponíveis em cada intervalo de temperatura comum. A curva superior é composta pelas correntes quentes e a curva inferior é composta pelas correntes frias. Um exemplo de uma curva composta é a Figura 10.

No diagrama das curvas compostas a região vertical compreendida entre as duas curvas representa a possibilidade de troca térmica entre as correntes a uma dada diferença mínima de temperatura pré-estabelecida ( $\Delta T_{\min}$ ), geralmente de 10°C. O ponto em que ocorre o  $\Delta T_{\min}$  é chamado de *Pinch* do processo, e divide o diagrama em duas regiões, abaixo e acima do *Pinch*, não sendo possível troca térmica entre as regiões. Nesse exemplo a máxima troca térmica é de 51,5 MW. Na região em que a curva composta quente estende-se além da curva fria e na região em que a curva composta fria estende-se além da curva quente a troca térmica não é possível, sendo necessário utilidade externa para fechar o balanço de energia. A quantidade de energia necessária para fechar o balanço representa o consumo mínimo de utilidades fria e quente que, nesse exemplo são de 10 MW e 7,5 MW, respectivamente.

Figura 10 – Exemplo de uma curva composta.

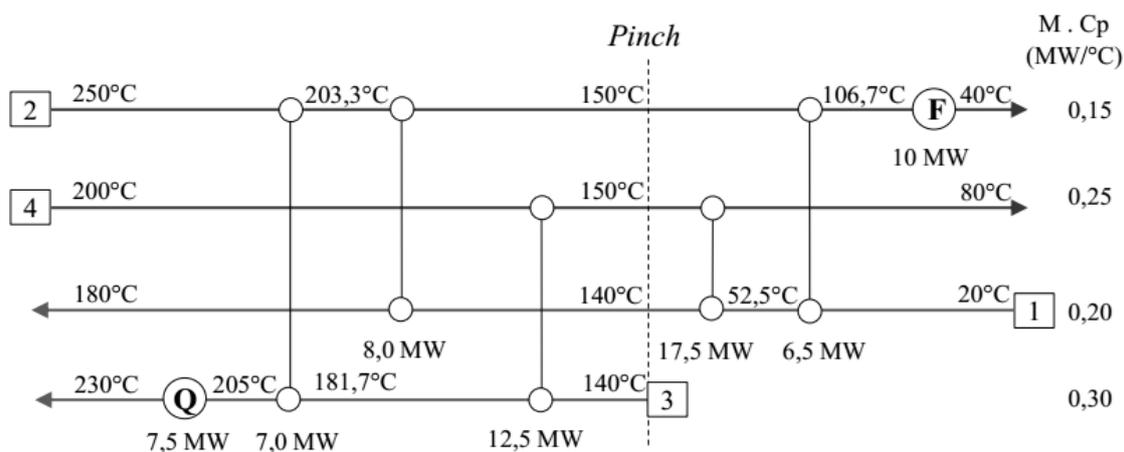


Fonte: Reproduzido de OLIVEIRA (2014).

#### 2.7.1.1.2 Diagrama de grade

No diagrama de grade as correntes são indicadas por linhas horizontais. As correntes quentes partem da esquerda para a direita, e as correntes frias partem da direita para a esquerda. Os círculos ligados por uma linha vertical indicam a combinação entre uma corrente quente e fria por meio de um trocador de calor. A Figura 11 ilustra o diagrama de grade do exemplo descrito acima com os trocadores de calor já integrados, em que F é a utilidade fria e Q é a utilidade quente.

Figura 11 – Diagrama de grade integrada com os trocadores de calor.



Fonte: Reproduzido de OLIVEIRA (2014).

## 2.8 Otimização

Otimizar é melhorar ao máximo o que existe, modificando as condições ou os procedimentos. Quando se estudam problemas com o objetivo de maximizar ou minimizar uma função, recorre-se à otimização. Há diversos métodos matemáticos com o propósito de otimizar um determinado problema.

Modelo matemático é o conjunto de relações matemáticas que são usadas para representar uma abstração do caso a ser estudado. Otimização é o ato de obter o melhor resultado para dadas condições (FLOUDAS, 1995).

A otimização é representada por uma função objetivo, ou seja, uma característica que será manipulada de diversas formas até se obter a melhor alternativa para a mesma. Na maioria dos casos há restrições para a escolha da melhor alternativa, pois as variáveis do projeto não podem ser escolhidas aleatoriamente (RAO, 2009).

O método de otimização pode ser determinístico, em que é possível prever todos os seus passos conhecendo seu ponto de partida; ou seja, sempre será obtida a mesma resposta partindo-se do mesmo ponto inicial. Em oposição, há os métodos estocásticos ou aleatórios, cujos pontos iniciais se baseiam em números aleatórios, sorteados no momento de execução do código. A cada execução do código os números sorteados são diferentes, não ocorrendo a mesma sequência de operações em duas

execuções sucessivas, mesmo que parta do(s) mesmo(s) ponto(s) inicial(is) e, assim, cada execução do código poderá seguir caminhos diferentes, levando a respostas diferentes.

Os tipos de problemas de otimização podem ser classificados, quanto à natureza das equações envolvidas, como: problemas de programação linear; problemas de programação não-linear; problemas de programação linear inteira mista e problemas de programação não-linear inteira mista.

No problema de programação linear, cuja sigla é LP (*Linear Programming*), a função objetivo e as restrições são lineares. No problema de programação não-linear (NLP - *Nonlinear Programming*), há uma ou mais funções entre a função objetivo ou restrições que são não-lineares, sendo o problema de otimização mais comum.

Um problema de programação inteira mista (MIP - *Mixed Integer Programming*) resulta quando algumas das variáveis do modelo são de valor real e algumas das variáveis são de valor inteiro. Um problema linear inteiro-misto (MILP - *Mixed Integer Linear Programming*) caracteriza-se pela função objetivo e suas restrições serem lineares em todo o seu domínio. Também ocorrem programas não-lineares inteiros mistos (MINLP - *Mixed Integer Nonlinear Programming*), que são muito mais difíceis de resolver. Em muitas aplicações de modelos de programação matemática inteira mista as variáveis inteiras são 0-1 (ou seja, variáveis binárias) (FLOUDAS, 1995).

Considera-se o problema de otimização inteira-mista como:

$$\begin{aligned}
 &\min f(x, y) \\
 &h_j(x, y) = 0, j = 1, 2, \dots, l \\
 &g_i(x, y) \leq 0, i = 1, 2, \dots, m \\
 &x \in X \subset R^n \\
 &y \in Y \subset N^p
 \end{aligned} \tag{2.56}$$

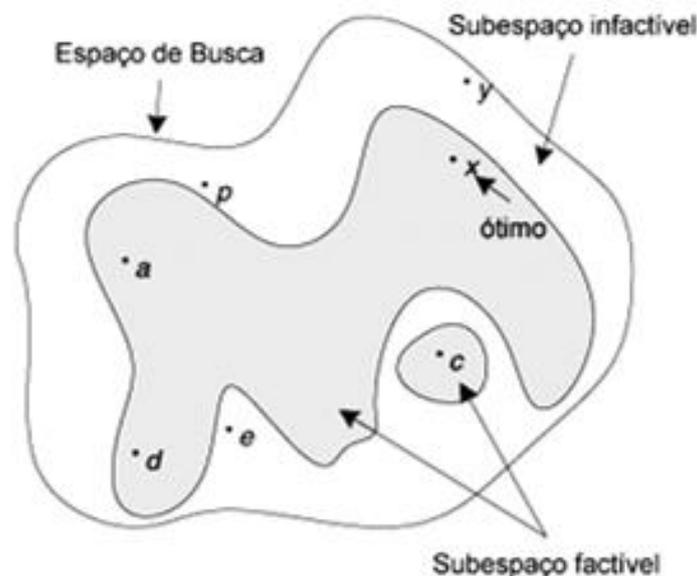
Na Equação 2.56  $x$  é um vetor de  $n$  variáveis contínuas e pode representar fluxos, pressões, composições, temperaturas ou tamanhos de unidades.  $y$  é um vetor de  $p$  variáveis inteiras que podem representar as alternativas entre as escolhas possíveis de equipamentos ou matérias-primas.  $f(x,y)$  é a função objetivo que se deseja otimizar, podendo ser, por exemplo, o custo total anual, consumo de determinado componente ou os critérios termodinâmicos.  $h_j(x,y)$  denotam as restrições de igualdade que são, por

exemplo, os balanços de massa, os balanços de energia ou as relações de equilíbrio.  $g_i(x,y)$  são as restrições de desigualdade, sendo, por exemplo, as especificações de pureza dos produtos de destilação, os regulamentos ambientais, as restrições de viabilidade em sistemas de recuperação de calor ou as restrições lógicas. O vetor  $y$  é o que caracteriza um MIP, de modo que sem esse vetor, haveria apenas um LP ou um NLP.

As restrições tornam o problema de otimização mais complexo por dividir o espaço de busca em duas regiões: factível (que atende todas as restrições simultaneamente) e infactível (que viola uma ou mais restrições).

Geralmente, problemas de otimização geram soluções no espaço infactível, mas em alguns casos soluções infactíveis podem estar mais próximas do ponto ótimo do que uma solução factível. A Figura 12 ilustra o espaço de busca e as regiões factíveis e infactíveis, como também o caso em que a solução infactível (ponto  $y$ ) está mais próxima da solução ótima (ponto  $x$ ) do que as soluções factíveis (pontos  $a$ ,  $c$  e  $d$ ).

Figura 12 – Espaço de busca do problema de otimização e as regiões factíveis e infactíveis.



Fonte: Reproduzido de AMORIN *et al.* (2009).

A otimização pode se valer por caminho viável ou por caminho inviável. A otimização por caminho viável alivia o algoritmo da tarefa de lidar com todos os modelos de equações como restrições do problema de otimização.

Já na otimização por caminho inviável o algoritmo considera todas as equações (balanços de massa, de energia, entre outros), inclusive as especificações, como restrições do problema. Ao mesmo tempo, todas as variáveis são consideradas como

variáveis de decisão e o algoritmo lhes atribui valores durante a busca pelo ótimo, tentando simultaneamente atender às restrições.

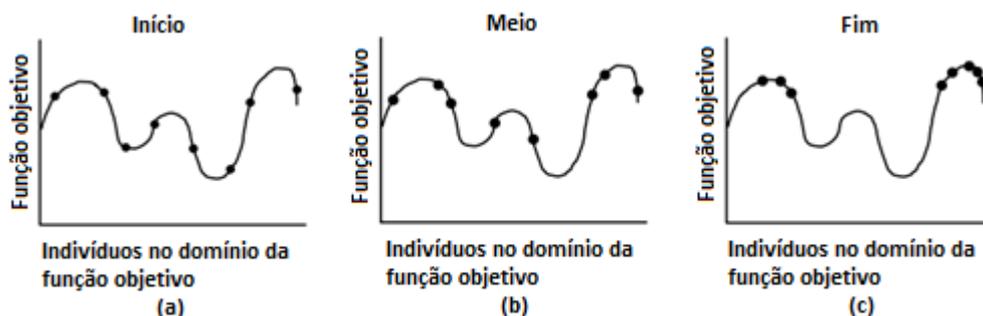
### 2.8.1 Método Aleatório

Também chamado de método estocástico, probabilístico ou não determinístico, é empregado principalmente para casos em que a função objetivo ou as restrições não têm uma representação matemática ou para casos em que função objetivo não é contínua ou derivável.

Esse método realiza buscas simultâneas no espaço de possíveis soluções por meio de um indivíduo ou uma população de indivíduos, e não restringe o ponto de partida para a busca da solução. Mas há a desvantagem de requerer um maior tempo de processamento.

A Figura 13 mostra três etapas do método probabilístico, mostrando como os indivíduos são distribuídos no começo (a), meio (b) e fim (c) do processo de otimização. Inicialmente os indivíduos são aleatoriamente espalhados em todo o espaço de busca, e depois de algumas gerações, a distribuição modifica-se, priorizando, no caso de uma maximização, os pontos de maior valor objetivo. No final, com a condição de parada imposta, toda a população concentra-se em torno de poucos pontos. Pode ocorrer de todos os pontos se concentrarem em torno de um ótimo local em vez de um ótimo global. Essa convergência prematura é conhecida como efeito da perda rápida da diversidade (EIBEN e SMITH, 2003).

Figura 13 – Evolução típica de um método probabilístico, ilustrada de acordo com a distribuição da população



Fonte: Adaptado de EIBEN e SMITH (2003).

Um método bastante conhecido nos meios de otimização é o algoritmo genético (AG). Ele foi inspirado na teoria da evolução de Charles Darwin, em que sobrevive o indivíduo mais adaptado e este passa as suas características para os seus descendentes, ou seja, a cada geração do algoritmo, uma nova população de indivíduos é criada a partir das informações genéticas dos melhores indivíduos da geração anterior, selecionados a partir de um critério específico.

Um problema do algoritmo genético é o alto custo computacional, e para contornar essa desvantagem há um método probabilístico que é inspirado em princípios de cooperação como, por exemplo, cardumes de peixes e bando de pássaros. Esse método é a otimização por enxame de partículas (PSO - *Particle Swarm Optimization*).

### **2.8.1.1 Otimização por enxame de partículas - PSO**

O PSO é uma técnica de computação evolutiva, ou seja, esse método trabalha a partir de uma população de partículas fazendo-as evoluir até que se ache a solução aceitável. Nesse algoritmo, cada partícula tem sua posição e sua velocidade atualizadas a cada iteração por meio de fatores de sua própria memória e seu conhecimento social (AYALA e COELHO, 2007).

No algoritmo PSO cada partícula  $i$  do enxame possui uma posição  $\bar{x}_i = \{x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,n}\}$  e uma velocidade  $\bar{v}_i = \{v_{i,1}, v_{i,2}, \dots, v_{i,n}\}$  no espaço de busca  $R^n$ , onde  $n$  é o número de variáveis de decisão. O vetor posição  $\bar{x}_i$  é formado pelas variáveis de decisão e o vetor  $\bar{v}_i$  representa a mudança dessa posição entre a iteração  $k$  e a  $k + 1$  do otimizador (daí o termo velocidade). As posições iniciais são aleatórias, distribuídas uniformemente pelo espaço de busca. A cada nova iteração, a posição de cada partícula é atualizada somando o vetor velocidade ao vetor posição, com o intuito de se chegar a um melhor resultado para a função-objetivo. O cálculo da velocidade da partícula leva em consideração a melhor posição já ocupada pela partícula  $\bar{p}_i = \{p_{i,1}, p_{i,2}, \dots, p_{i,n}\}$  e a melhor posição ocupada pelo grupo  $\bar{p}_g = \{p_{g,1}, p_{g,2}, \dots, p_{g,n}\}$ , até a iteração  $k$ . A próxima velocidade da partícula será composta, em parte, pela sua velocidade anterior, pois considera-se a inércia da partícula. As Equações 2.57 e 2.58 apresentam, respectivamente, a formulação matemática para a atualização da velocidade e da posição.

$$\bar{v}_i^{k+1} = w\bar{v}_i^k + c_1\bar{r}_1 \times (\bar{p}_i - \bar{x}_i^k) + c_2\bar{r}_2 \times (\bar{p}_g - \bar{x}_i^k) \quad (2.57)$$

$$\bar{x}_i^{k+1} = \bar{v}_i^k + \bar{x}_i^k \quad (2.58)$$

sendo  $\bar{v}_i$  a velocidade da partícula  $i$ ,  $\bar{x}_i$  sua posição,  $\bar{p}_i$  e  $\bar{p}_g$ , respectivamente, a melhor posição da partícula  $i$  e do grupo, até a iteração  $k$ ;  $w$  é o fator de inércia da partícula,  $c_1$  e  $c_2$  são os parâmetros de sintonia do método e representam fatores de aprendizado cognitivo e social, respectivamente;  $\bar{r}_1$  e  $\bar{r}_2$  são números aleatórios gerados usando uma distribuição uniforme no intervalo  $[0,1]$  (FURLAN, 2012).

O pseudocódigo para o método de minimização por enxame de partículas é apresentado na Figura 14.

Figura 14 - Pseudocódigo para o algoritmo PSO.

```

Algoritmo 1: ALGORITMO PSO( $N_p$ )
Gere uma população aleatória e uniforme de  $N_p$  partículas
repeat
  for  $i \leftarrow 1$  to  $N_p$ 
    {
      if  $f(\underline{x}_i) < f(\underline{p}_i)$ 
        then  $\underline{p}_i \leftarrow \underline{x}_i$ 
      if  $f(\underline{p}_i) < f(\underline{p}_g)$ 
        then  $\underline{p}_g \leftarrow \underline{p}_i$ 
      Atualize  $\underline{v}_i$  e  $\underline{x}_i$ 
    }
until Critério de parada == verdade
return ( $P_g$ )

```

Fonte: Reproduzido de FURLAN (2012).

Esse método apresenta um custo computacional relativamente baixo em comparação com outros métodos, pois se utiliza de poucas funções matemáticas para realizar a otimização.

### **2.8.2 Otimização multiobjetivo**

Se o problema de otimização modela um sistema real que envolve apenas uma função objetivo, é denominado de otimização monoobjetivo. Se esse problema envolver mais de uma função objetivo, é denominado de otimização multiobjetivo.

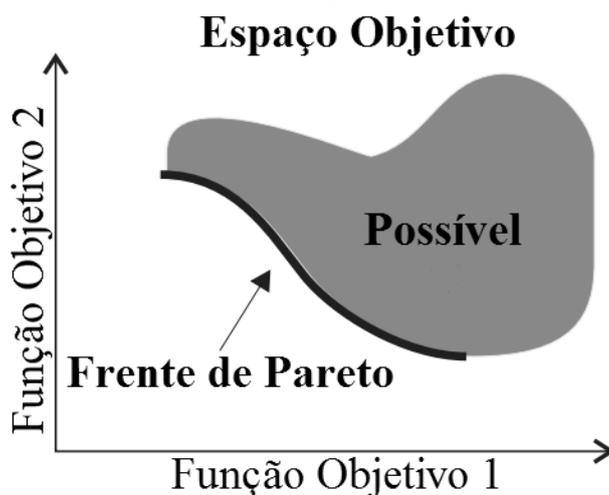
Há alguns métodos simples para a resolução de problemas multiobjetivos como: a soma ponderada dos diferentes objetivos em uma única função objetivo; a escolha de uma das funções objetivo para otimizar e transformar as demais em restrições do problema, limitando cada uma destas restrições em limites predefinidos; além da análise das soluções obtidas por meio da Frente de Pareto (BARRICO, 2007).

Na resolução de problemas multiobjetivos, pretende-se encontrar a melhor solução para o problema, mas dificilmente se obtém uma única solução, o ótimo global, mas sim um conjunto de soluções. Esses conjuntos de soluções se justificam pelas funções objetivo serem conflitantes entre si, ou seja, cada solução obtida não consegue atender da melhor forma possível todas as funções objetivo, havendo soluções que atendem melhor uma solução em detrimento da outra.

Em casos em que os objetivos são conflitantes entre si, a Frente de Pareto é uma ferramenta para auxiliar na escolha das melhores soluções entre as diversas possibilidades. As soluções obtidas pela Frente de Pareto, denominadas soluções não-dominadas, estão relacionadas entre si. Uma solução é considerada não-dominada se uma melhora em um dos objetivos pode ser conseguida unicamente em detrimento de pelo menos um dos outros objetivos, e isso é o que ocorre ao se caminhar sobre a Frente de Pareto (RAO, 2009).

As soluções obtidas que não estão na Frente de Pareto são soluções dominadas, ou seja, um ponto que se encontra fora da Frente de Pareto terá pelo menos um equivalente na Frente de Pareto que terá um melhor valor para uma ou mais funções objetivo sem piorar as demais. A Figura 15 ilustra uma Frente de Pareto, de modo geral, em que o objetivo é minimizar duas funções conflitantes.

Figura 15 – Curva de Pareto.



Fonte: Adaptado de RAO (2009).

### 2.8.2.1 Algoritmo multiobjetivo com enxame de partículas implementado no EMSO

Gonçales *et al.* (2012) implementaram no EMSO o algoritmo de otimização multiobjetivo com enxame de partículas (MOPSO). Esse algoritmo foi desenvolvido por Raquel e Naval (2005) se utilizando da distância inter-partículas (*crowding distance*) na seleção do líder das partículas durante seu voo na busca pelas soluções ótimas. Esse algoritmo se vale da otimização por caminho viável.

Nesse algoritmo, primeiramente a população é inicializada com valores aleatórios e, em seguida, um conjunto de líderes é gerado com as partículas não-dominadas do enxame até aquele momento. Esses líderes são salvos em um arquivo externo de respostas. Determinam-se as distâncias entre cada líder vizinho, esses valores são organizados em ordem decrescente e escolhe-se aleatoriamente um líder do enxame no grupo que contém 10% dos valores mais altos de distância, esse líder do enxame é o *gbest*. Isso ocorre para que haja busca em espaços menos populosos. Tendo a posição do líder local (inicialmente o *pbest* representa a posição da própria partícula da população), do líder do enxame (*gbest*) e da velocidade anterior da partícula (inicialmente nula), atualiza-se a posição da partícula (vôo). Compara-se o líder local da partícula *pbest* com a nova posição da partícula, e se a atual dominar a antiga, atualiza-se o *pbest*. Caso a nova posição da partícula e o *pbest* atual sejam soluções não-dominadas entre si, o algoritmo busca no arquivo externo pela solução com a menor distância euclidiana com o *pbest* e

busca a solução com a menor distância com a nova posição da partícula, e se a solução mais próxima à nova posição da partícula tiver um *crowding distance* maior que a solução mais próxima do *pbest* atual, a nova posição da partícula se torna o novo *pbest*.

Após serem computadas as novas posições, o código analisa a viabilidade das mesmas por meio de uma avaliação da estabilidade do enxame, mantendo as partículas dentro do espaço de busca factível estabelecido pelas restrições do problema de otimização. Se a partícula vai além do valor mínimo, o novo valor da partícula se igualará ao valor mínimo e sua velocidade será invertida, multiplicando-a por -1. Se a partícula vai além do valor de máximo, o novo valor da partícula se igualará ao valor máximo e sua velocidade será invertida também, multiplicando-a por -1. Dessa maneira a exploração se desenvolverá sempre dentro do espaço factível.

#### **2.8.2.1.1 Principais ferramentas do algoritmo**

Com o objetivo de melhorar a capacidade de exploração do enxame ao selecionar como líderes partículas com vizinhanças menos populosas, há a ferramenta do estimador de densidade do vizinho mais próximo. Esse estimador determina as distâncias populacionais entre duas partículas próximas, vizinhas, no conjunto das soluções não-dominadas. Esses valores são utilizados pela ferramenta de seleção de líderes do enxame.

A ferramenta de seleção de líderes do enxame tem como objetivo promover a diversidade entre as soluções armazenadas no arquivo. Os valores das distâncias entre as partículas vizinhas são organizadas em ordem decrescente de valores. A seleção de um líder do enxame é baseada na concentração das partículas, ou seja, o líder é escolhido aleatoriamente na região em que há a concentração dos 10 % de partículas que apresentaram o maior valor de distância. Assim, melhora-se a exploração das regiões menos populosas na busca de ótimos nos voos subsequentes, fornecendo uma distribuição mais igualitária de soluções entre as regiões. Quando o arquivo externo está cheio, exclui-se aleatoriamente um líder de uma região mais populosa para dar lugar a líderes de regiões menos populosas.

Utiliza-se do operador de mutação, que gera valores aleatórios dentro do espaço de busca, substituindo esses valores em uma das variáveis de algumas partículas

do enxame e, assim, ocasionando uma mudança brusca no andamento da otimização. Isso é útil para evitar a convergência prematura. A atuação da mutação vai diminuindo ao longo do tempo.

A ferramenta de tratamento de restrições faz com que a solução  $i$  restrita domine uma solução  $j$  se uma das seguintes condições for verdadeira:

- A solução  $i$  é viável e a solução  $j$  não.
- Ambas as soluções  $i$  e  $j$  são inviáveis, mas  $i$  tem menos grau de violação de restrição.
- Ambas as soluções  $i$  e  $j$  são viáveis e a solução  $i$  domina a solução  $j$ .

#### **2.8.2.1.2 Estrutura do algoritmo**

O algoritmo de Raquel e Naval (2005) é dividido em três rotinas e um arquivo: o código principal, que envolve todo o processo de otimização; uma rotina auxiliar, que gera números aleatórios; outra rotina auxiliar, onde são inseridas as funções-objetivo a serem otimizadas; e um arquivo externo, que é gerado pela execução como resposta final do problema.

Para solucionar um problema de otimização multiobjetivo, deve-se informar as funções-objetivo, se o problema é de maximização ou minimização, as respectivas restrições, o tamanho da população e o número de gerações desejado.

Nas Figuras 16 e 17 é apresentada a estrutura do algoritmo. Os valores *default* para a Equação 2.57 são 0,4 para  $w$ , 2,0 para os parâmetros de aprendizado cognitivo e social ( $c_1$  e  $c_2$ ), um número aleatório entre 0 e 1 para  $r_1$  e outro número aleatório entre 0 e 1 para  $r_2$ .

Quando o número de partículas não-dominadas é zero na inicialização do algoritmo, a posição da primeira partícula do enxame é armazenada no arquivo externo juntamente com os seus valores para cada função objetivo. Essa partícula será a única

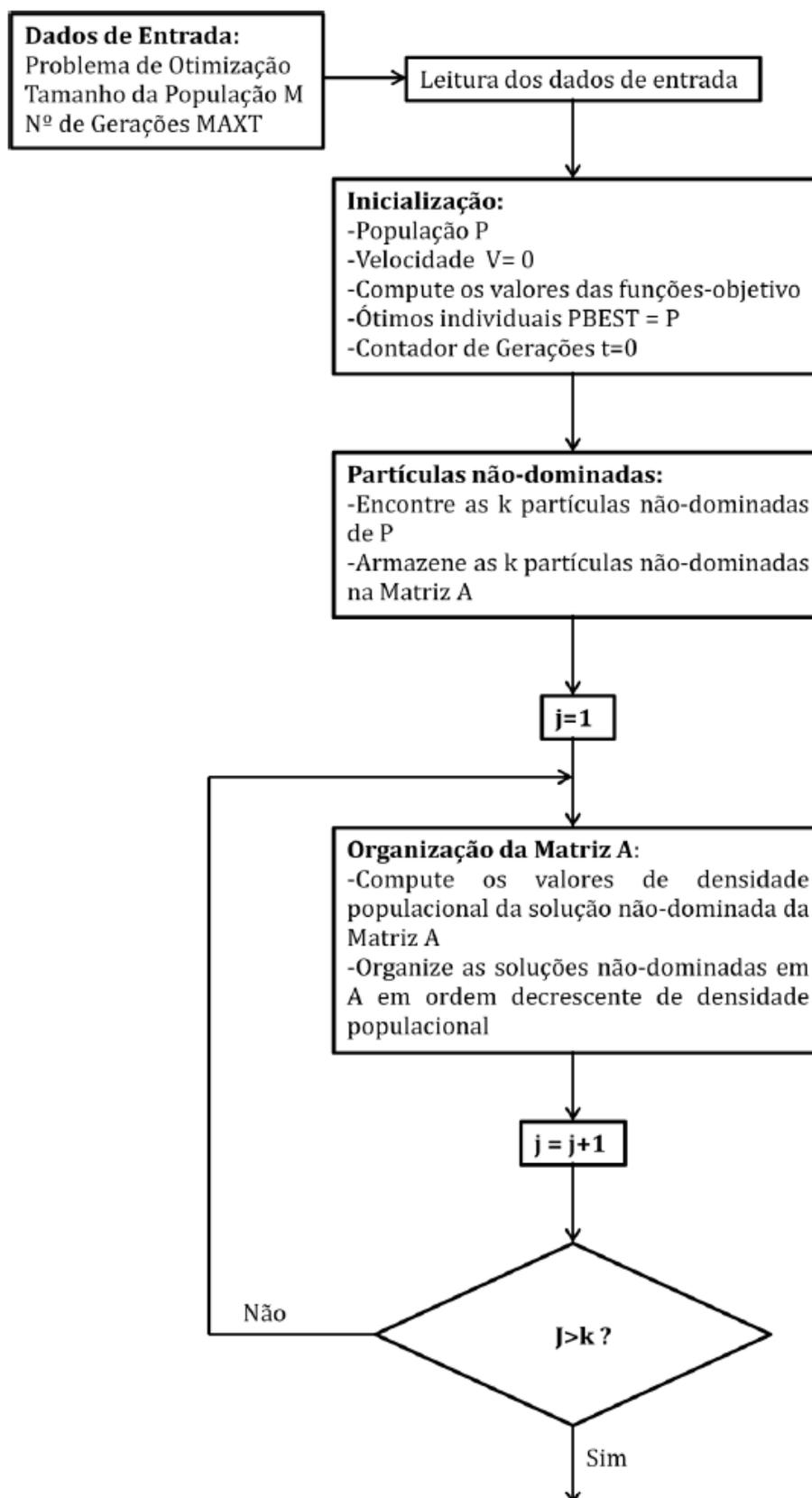
classificada não-dominada no momento. Posteriormente, para a segunda partícula, já há um valor no arquivo para ser comparado, de modo a identificar se há dominância.

Primeiro verifica-se a viabilidade das duas, se houver uma viável e outra não, escolhe-se a partícula viável para permanecer no arquivo externo, enquanto a outra é excluída. Caso ambas sejam inviáveis, escolhe-se aquela com menor grau de violação da restrição. Se ambas forem viáveis, faz-se uma análise de dominância.

A análise de dominância consiste em comparar a nova solução com cada solução não-dominada do arquivo externo. Se a nova solução apresentar melhores valores em todas as funções objetivo do que uma determinada solução presente no arquivo, significa que essa nova solução domina a antiga. A nova solução é então armazenada no lugar da antiga. Caso a nova solução seja dominada pela antiga, ela não ocupará um lugar no arquivo externo. Ainda, no caso de a nova solução ser melhor em um dos objetivos e pior em outro, quando comparada à solução do arquivo, ela é armazenada no arquivo externo.

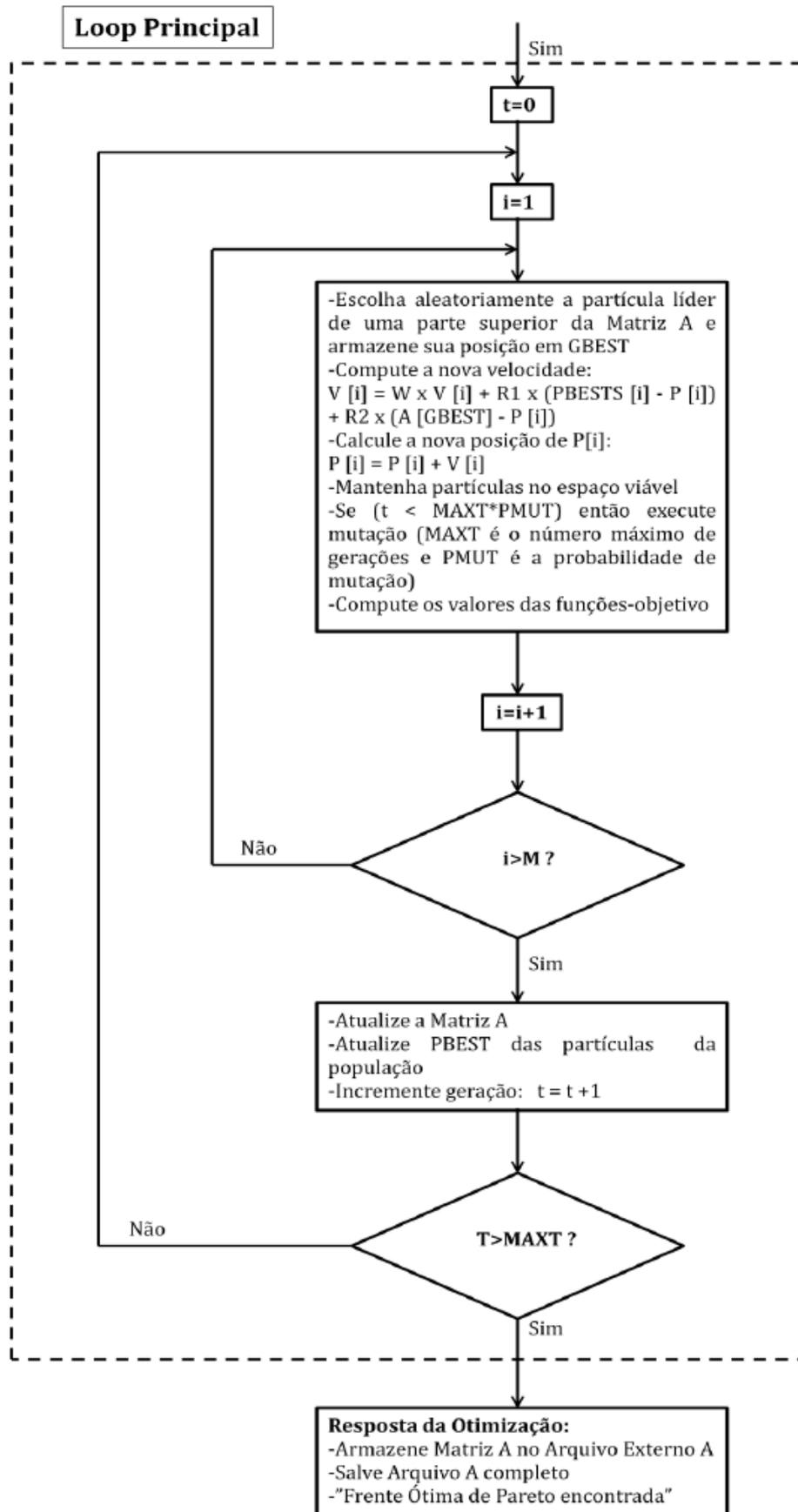
Antes de a nova solução ser armazenada, verifica-se se no arquivo externo há espaço disponível. Caso não haja, a nova solução só entrará no lugar de outra se pertencer a uma região menos povoada.

Figura 16 – Primeira parte do fluxograma do algoritmo.



Fonte: Adaptado de GONÇALES *et al.* (2012).

Figura 17 – Segunda parte do fluxograma do algoritmo.



Fonte: Adaptado de GONÇALES *et al.* (2012).

### **3 Metodologia**

Com base nos modelos já estudados e desenvolvidos pelo grupo de pesquisa em simulação e controle de processos químicos da UFSCar, e principalmente por Furlan (2012), foi desenvolvido um estudo multiobjetivo de caráter ambiental e de processo em uma destilaria autônoma de produção integrada de E1G e E2G.

Devido à utilização pelo grupo de pesquisa e ao grande potencial para resolver problemas de engenharia química, o software EMSO foi usado neste trabalho, havendo como vantagens a presença de modelos que cobrem grande parte das operações unitárias, como por exemplo, reatores, colunas de destilação, trocadores de calor, entre outros equipamentos. O fato do EMSO aceitar o uso de rotinas externas foi fator decisivo para o seu uso, devido à facilidade de integrar o algoritmo multiobjetivo desenvolvido por Gonçalves *et al.* (2012) com o fluxograma do processo e, assim, estudar problemas de otimização multiobjetivos, utilizando conceitos de dominância, no processo modelado.

A Figura 6 ilustra o fluxograma montado no EMSO pelo grupo de pesquisa em simulação, o qual foi a base para o desenvolvimento desse trabalho. O item 2.6 descreveu cada etapa da Figura 6, e suas equações embasaram esta metodologia. Os subitens a seguir descrevem as modificações feitas no fluxograma desenvolvido por FURLAN *et al.* (2012).

#### **3.1 Modelagem**

##### **3.1.1 Correntes**

Além dos 18 componentes que já estavam inseridos na biorrefinaria, mostrados na Tabela 4, foi necessária a inclusão de 3 componentes adicionais: CO, O<sub>2</sub> e N<sub>2</sub>. Esses novos componentes são necessários para uma modelagem mais precisa do processo de combustão que ocorre no interior da caldeira.

### 3.1.2 Operação unitária de limpeza

A etapa de limpeza da cana-de-açúcar já estava modelada, mas a água não estava em circuito fechado. Sendo assim, foi modelado um decantador especificamente para esta função, com uma corrente de entrada, chamada de entrada, e duas correntes de saída, o sobrenadante e a lama. Foi considerada uma eficiência de 95% na separação, ou seja, 95% de tudo que não seja água e sacarose irá para a lama. A relação entre a quantidade de água e a quantidade de sacarose foi mantida em todas as correntes do decantador, e com isso a porcentagem de água perdida para a lama é a mesma porcentagem perdida de sacarose, e essa porcentagem foi considerada 5%. Os seguintes balanços foram considerados no modelo do novo decantador.

Balanço mássico para a água e para a sacarose:

$$F_{Lama} * z_{Componente,Lama} = F_{Entrada} * z_{Componente,Entrada} * (Perda\ de\ água) \quad (3.1)$$

$$F_{Sobrenadante} * z_{Componente,Sobrenadante} = F_{Entrada} * z_{Componente,Entrada} * (1 - Perda\ de\ água) \quad (3.2)$$

Balanço mássico para os demais componentes:

$$F_{Lama} * z_{Componente,Lama} = F_{Entrada} * z_{Componente,Entrada} * (Eficiência) \quad (3.3)$$

$$F_{Sobrenadante} * z_{Componente,Sobrenadante} = F_{Entrada} * z_{Componente,Entrada} * (1 - Eficiência) \quad (3.4)$$

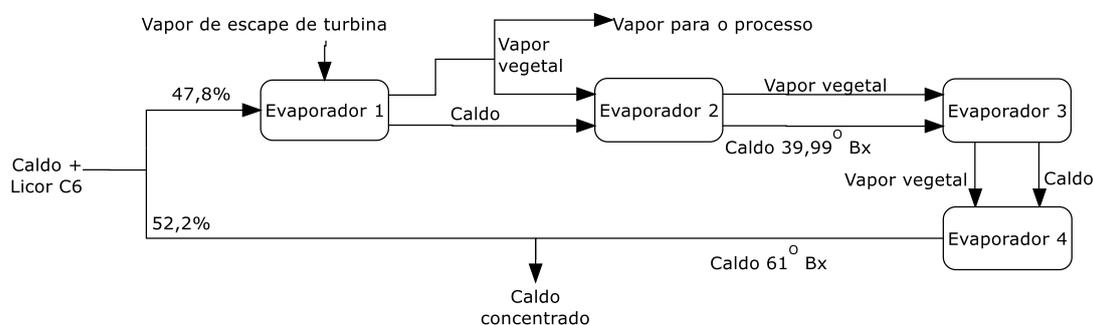
em que  $F_a$  é a vazão mássica da corrente a;  $z_{b,a}$  é a fração mássica do componente b na corrente a; “Perda de água” é a fração estipulada de perda de água, no caso 0,05; “Eficiência” é a eficiência da separação do equipamento, no caso 0,95.

### 3.1.3 Concentração do caldo

A biorrefinaria original contava com apenas um evaporador, que concentrava o caldo até 21,4 °Bx. Com o intuito de economizar vapor de escape de turbina de contrapressão, foram adicionados mais três evaporadores em série, formando um sistema de evaporadores múltiplo efeito.

Esse sistema múltiplo efeito concentra 47,8% do caldo (constituído do caldo advindo do decantador e do licor de glicose advindo da hidrólise da celulose do bagaço) de aproximadamente 13,5 °Bx até 61 °Bx, e esse concentrado se une ao caldo não concentrado, chegando-se, no final, a uma concentração em torno de 21,5 °Bx, dependendo de quanto bagaço é destinado para a produção de E2G. O aquecimento do primeiro evaporador é feito pelo vapor superaquecido de escape da turbina de contrapressão, a 2,5 bar e 153,58 °C. Parte do vapor gerado no primeiro evaporador é usado como vapor vegetal para atender a demanda térmica da planta e outra parte alimenta o segundo evaporador. O vapor gerado pelo segundo evaporador alimenta inteiramente o terceiro evaporador, e o vapor do terceiro evaporador alimenta inteiramente o quarto evaporador. O vapor vegetal é destinado para aquecimento do caldo na entrada do balão flash na etapa de tratamento e, também, para os refeedores da coluna de destilação. O condensado gerado no primeiro evaporador é destinado para água de caldeira devido a ser condensado de vapor de escape de turbina de contrapressão, e os demais condensados não são aproveitados devido à baixa qualidade por serem condensados de vapor vegetal. A Figura 18 ilustra esse processo.

Figura 18 – Fluxograma da etapa de concentração do caldo.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Os dados inseridos no modelo foram retirados de Lino (2013). O sistema de evaporadores de Lino (2013) foi modelado para simular plantas de produção de E1G,

E2G, açúcar e bioenergia. A Tabela 9 apresenta os dados que foram inseridos para que o número de graus de liberdade seja igual a zero. O licor de glicose advindo da hidrólise da celulose depende da quantidade de bagaço destinado para o E2G, e esse licor é misturado ao caldo da cana para ser concentrado nos evaporadores múltiplo efeito, o que ocasiona que a fração de bagaço destinado para o E2G influencia o brix e a temperatura da corrente de alimentação do conjunto de evaporadores. Na Tabela 10 são apresentados os dados calculados pelo EMSO em modelos anteriores ao sistema de evaporadores de múltiplo efeito em uma situação em que 30% do bagaço é destinado para a produção de E2G.

Tabela 9 – Especificações para os evaporadores de múltiplo efeito da concentração do caldo.

	Especificação
°Bx na saída do efeito 2	39,99
°Bx na saída do efeito 4	61,00
Pressão do efeito 1	1,30 bar
Pressão do efeito 2	0,97 bar
Pressão do efeito 3	0,54 bar
Pressão do efeito 4	0,19 bar
Área do efeito 1	1.600 m <sup>2</sup>
Área do efeito 2	800 m <sup>2</sup>
Área do efeito 3	800 m <sup>2</sup>
Área do efeito 4	700 m <sup>2</sup>

Fonte: Adaptado de LINO (2013).

Tabela 10 – Valores calculados pelo EMSO por modelos anteriores ao sistema de evaporadores de múltiplo efeito para concentração do caldo na situação em que 30% do bagaço é destinado para o E2G.

	Especificações
°Bx na entrada	13,67
Temperatura do caldo	88,42 °C

Fonte: Elaborado pelo autor.

Foi necessário especificar o valor de brix do segundo efeito, já que era preciso estimar a quantidade necessária de vapor gerado no primeiro efeito que poderia ser destinada para o restante do processo, e com isso o valor da vazão de vapor vegetal destinado para o processo já fica especificado. O brix do quarto efeito foi também especificado, já que não havia como fixar o valor final do brix da união do caldo concentrado com o não concentrado. Nas situações simuladas, esse valor varia entre 21,5 °Bx e 22 °Bx. As principais equações usadas nos modelos implementados no EMSO são apresentadas na sequência.

Balanço global:

$$F_{\text{Caldo } n} = F_{\text{Concentrado } n} + F_{\text{Vapor vegetal } n} \quad (3.5)$$

$$F_{\text{Vapor turbina}} = F_{\text{Condensado } 1} \quad (3.6)$$

$$F_{\text{Vapor vegetal } 1} = F_{\text{Condensado } 2} + F_{\text{Vapor processo}} \quad (3.7)$$

$$F_{\text{Vapor vegetal } 2} = F_{\text{Condensado } 3} \quad (3.8)$$

$$F_{\text{Vapor vegetal } 3} = F_{\text{Condensado } 4} \quad (3.9)$$

Balanço mássico para a água:

$$F_{\text{Caldo},n} * z_{\text{Água } n, \text{Caldo } n} = F_{\text{Concentrado } n} * z_{\text{Água } n, \text{Concentrado } n} + F_{\text{Vapor vegetal } n} \quad (3.10)$$

Balanço mássico para os demais componentes:

$$F_{\text{Caldo } n} * z_{\text{Componente } n, \text{Caldo } n} = F_{\text{Concentrado } n} * z_{\text{Componente } n, \text{Concentrado } n} \quad (3.11)$$

em que  $F_{a n}$  é a vazão mássica da corrente  $a$  no evaporador  $n$  em kg/h;  $z_{b n, a n}$  é a fração mássica do componente  $b$  na corrente  $a$  no evaporador  $n$ . O balanço de energia foi o mesmo já apresentado nas Equações 2.10 a 2.14.

### 3.1.4 Fermentação

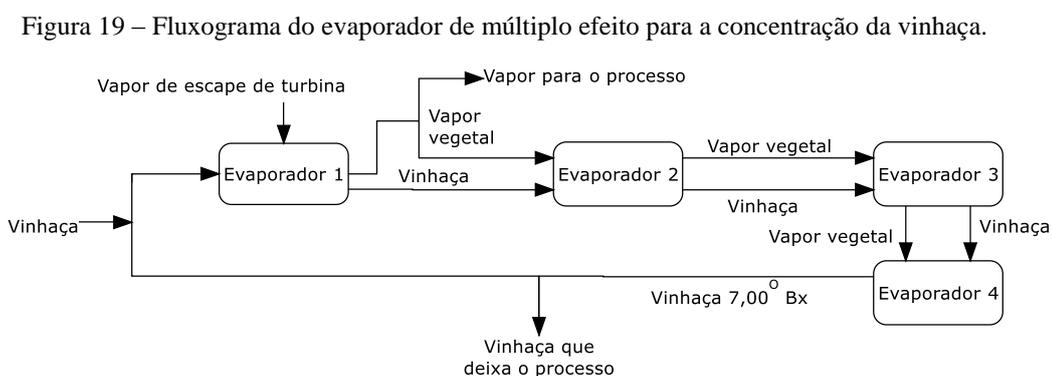
A modelagem original não considerava a liberação de CO<sub>2</sub> pelo fermentador. Com a modificação feita no modelo do fermentador, contemplou-se a

geração de uma corrente de CO<sub>2</sub> que arrasta uma porcentagem de 1,5 % do etanol gerado. Anteriormente, no modelo, o CO<sub>2</sub> gerado pela fermentação ficava junto com a corrente do vinho e era retirado no balão flash anterior ao processo de destilação. No fermentador de pentoses, agora, também há a saída de uma corrente de CO<sub>2</sub> separada, mas sem arraste de etanol.

### 3.1.5 Concentração de vinhaça

A corrente de vinhaça era utilizada apenas para o aquecimento da corrente de entrada da coluna de destilação (vide Figura 6, trocador de calor a esquerda na área “F” em destaque). Porém, no novo fluxograma, a corrente de vinhaça não troca mais calor com a corrente de entrada, de modo a não se diminuir a sua entalpia, já que ela deverá ser concentrada nos evaporadores de múltiplo-efeito. A energia necessária para aquecer a corrente de entrada da coluna de destilação agora vem do vapor de escape de turbina de contrapressão a 2,5 bar.

Foram utilizados quatro evaporadores em série para concentrar a vinhaça, baseados nos dados de modelagem de Carvalho e Silva (2010) e nos coeficientes de troca térmica de Hugot (1986). A porcentagem de vinhaça concentrada depende da quantidade de vapor de escape de turbina de contrapressão destinado para a concentração da mesma. O vapor vegetal gerado é destinado para os refeedores da coluna de destilação. A Tabela 11 apresenta as especificações usadas no modelo, e a Tabela 12 apresenta os valores calculados pelo EMSO em modelos anteriores, na situação em que 30% do bagaço é destinado para a produção de E2G, já que a fração de bagaço influencia diretamente a quantidade da vinhaça produzida e o seu °Bx. A Figura 19 ilustra um fluxograma esquemático do processo de concentração da vinhaça.



Fonte: Elaborado pelo autor.

O brix na saída do quarto efeito foi especificado para que a quantidade de vapor de escape de turbina requerida seja calculada pelo simulador. A quantidade de vapor vegetal que é destinado para o processo depende de quanto vapor ainda é requerido pelo processo, pois já está definida a quantidade de vapor vegetal que é fornecido pelos evaporadores de múltiplo efeito da concentração do caldo.

Tabela 11 – Especificações para os evaporadores de múltiplo efeito da concentração da vinhaça.

	Especificação
°Bx na saída do efeito 4	7,00
Pressão do efeito 1	1,30 bar
Pressão do efeito 2	0,73 bar
Pressão do efeito 3	0,55 bar
Pressão do efeito 4	0,43 bar
Coeficiente global de troca térmica do efeito 1	2,55 kW/m <sup>2</sup> /K
Coeficiente global de troca térmica do efeito 2	1,86 kW/m <sup>2</sup> /K
Coeficiente global de troca térmica do efeito 3	1,39 kW/m <sup>2</sup> /K
Coeficiente global de troca térmica do efeito 4	0,81 kW/m <sup>2</sup> /K

Fonte: Adaptado de CARVALHO e SILVA (2010) e HUGOT (1986).

As equações do modelo dos evaporadores de múltiplo efeito da concentração da vinhaça são as mesmas daquelas apresentadas para a concentração do caldo no item 3.1.3, como também o funcionamento de ambos.

Tabela 12 – Valores calculados pelo EMSO por modelos anteriores ao sistema de evaporadores de múltiplo efeito para concentração da vinhaça na situação em que 30% do bagaço é destinado para o E2G.

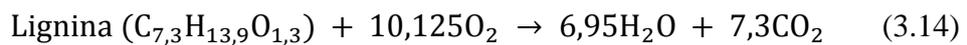
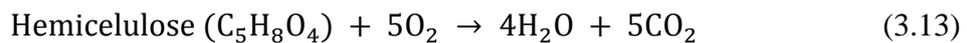
	Especificação
°Bx na entrada	2,30
Temperatura da vinhaça	111,9 °C

Fonte: Elaborado pelo autor.

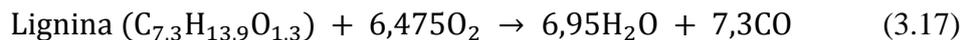
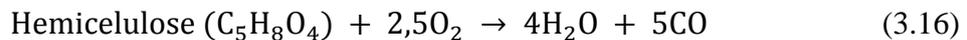
### 3.1.6 Cogeração de energia

A caldeira original havia sido implementada sem considerar a reação de combustão e a geração de gases. Na nova modelagem foi inserida uma corrente de alimentação de ar seco, composta por 79% molar de N<sub>2</sub> e 21% de O<sub>2</sub>, além de uma corrente de saída dos gases de combustão, e uma variável que considera o excesso de oxigênio. O modelo consta de quatro entradas: Bagaço, Palha, Ar e Água, além de duas saídas: Vapor e Gases. Apresentam-se a seguir as equações de reações que foram consideradas para a modelagem matemática do processo.

Combustão completa:



Combustão incompleta:



Baseado nas reações de combustão completa, combustão incompleta e no balanço de cada componente, foram construídos os balanços mássicos que se seguem para a modelagem da caldeira, em que:

$$f = \text{proporção molar de saída de CO/CO}_2 = 0,0202 \quad (3.18)$$

A porcentagem de excesso de oxigênio na queima do bagaço e proporção molar de saída de CO/CO<sub>2</sub> foi estipulada com base no trabalho de Cortez e Gómez (1998), como explicado no subitem 2.1.7.1. Não se considerou a geração de NO<sub>x</sub> devido a sua baixa geração. Maiores explicações de como foi utilizado esse parâmetro f nos balanços de massa se encontram no Apêndice A1.

Balanço mássico para o CO<sub>2</sub> no EMSO:

$$\begin{aligned}
 F_{Gases} * Z_{CO_2,Gases} = & 6 * \frac{1}{1+f} * (F_{Bagaço} * Z_{Celulose,Bagaço} + F_{Palha} * \\
 & Z_{Celulose,Palha}) * \frac{MM_{CO_2}}{MM_{Celulose}} + 5 * \frac{1}{1+f} * (F_{Bagaço} * Z_{Hemicelulose,Bagaço} + F_{Palha} * \\
 & Z_{Hemicelulose,Palha}) * \frac{MM_{CO_2}}{MM_{Hemicelulose}} + 7,3 * \frac{1}{1+f} * (F_{Bagaço} * Z_{Lignina,Bagaço} + F_{Palha} * \\
 & Z_{Lignina,Palha}) * \frac{MM_{CO_2}}{MM_{Lignina}} + F_{Bagaço} * Z_{CO_2,Bagaço} + F_{Ar} * Z_{CO_2,Ar} + F_{Palha} * Z_{CO_2,Palha}
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

Balanço mássico para a água no EMSO:

$$\begin{aligned}
 F_{Gases} * Z_{Água,Gases} = & 5 * (F_{Bagaço} * Z_{Celulose,Bagaço} + F_{Palha} * \\
 & Z_{Celulose,Palha}) * \frac{MM_{Água}}{MM_{Celulose}} + 4 * (F_{Bagaço} * Z_{Hemicelulose,Bagaço} + F_{Palha} * \\
 & Z_{Hemicelulose,Palha}) * \frac{MM_{Água}}{MM_{Hemicelulose}} + 6,95 * (F_{Bagaço} * Z_{Lignina,Bagaço} + F_{Palha} * \\
 & Z_{Lignina,Palha}) * \frac{MM_{Água}}{MM_{Lignina}} + F_{Bagaço} * Z_{Água,Bagaço} + F_{Ar} * Z_{Água,Ar} + F_{Palha} * \\
 & Z_{Água,Palha}
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

Balanço mássico para o CO no EMSO:

$$\begin{aligned}
 F_{Gases} * Z_{CO,Gases} = & 6 * \frac{f}{1+f} * (F_{Bagaço} * Z_{Celulose,Bagaço} + F_{Palha} * \\
 & Z_{Celulose,Palha}) * \frac{MM_{CO}}{MM_{Celulose}} + 5 * \frac{f}{1+f} * (F_{Bagaço} * Z_{Hemicelulose,Bagaço} + F_{Palha} * \\
 & Z_{Hemicelulose,Palha}) * \frac{MM_{CO}}{MM_{Hemicelulose}} + 7,3 * \frac{f}{1+f} * (F_{Bagaço} * Z_{Lignina,Bagaço} + F_{Palha} * \\
 & Z_{Lignina,Palha}) * \frac{MM_{CO}}{MM_{Lignina}} + F_{Bagaço} * Z_{CO,Bagaço} + F_{Ar} * Z_{CO,Ar} + F_{Palha} * Z_{CO,Palha}
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

Balanço mássico para o O<sub>2</sub> no EMSO:

$$\begin{aligned}
 F_{Ar} * Z_{O_2,Ar} = & \left(1 + \frac{Ex_{O_2}}{100}\right) * (6 * (F_{Bagaço} * Z_{Celulose,Bagaço} + F_{Palha} * \\
 & Z_{Celulose,Palha}) * \frac{MM_{O_2}}{MM_{Celulose}} + 5 * (F_{Bagaço} * Z_{Hemicelulose,Bagaço} + F_{Palha} * \\
 & Z_{Hemicelulose,Palha}) * \frac{MM_{O_2}}{MM_{Hemicelulose}} + 10,125 * (F_{Bagaço} * Z_{Lignina,Bagaço} + F_{Palha} * \\
 & Z_{Lignina,Palha}) * \frac{MM_{O_2}}{MM_{Lignina}})
 \end{aligned} \tag{3.22}$$

$$\begin{aligned}
F_{Gases} * Z_{O_2,Gases} &= F_{Ar} * Z_{O_2,Ar} + F_{Bagaço} * Z_{O_2,Bagaço} + F_{Palha} * \\
Z_{O_2,Palha} - (6 * \frac{2+f}{2+2*f} * (F_{Bagaço} * Z_{Celulose,Bagaço} + F_{Palha} * Z_{Celulose,Palha})) * \\
\frac{MM_{O_2}}{MM_{Celulose}} + 5 * \frac{2+f}{2+2*f} * (F_{Bagaço} * Z_{Hemicelulose,Bagaço} + F_{Palha} * Z_{Hemicelulose,Palha}) * \\
\frac{MM_{O_2}}{MM_{Hemicelulose}} + (2,825 + 7,3 * \frac{2+f}{2+2*f}) * (F_{Bagaço} * Z_{Lignina,Bagaço} + F_{Palha} * \\
Z_{Lignina,Palha}) * \frac{MM_{O_2}}{MM_{Lignina}}
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Balanço mássico para o N<sub>2</sub> no EMSO:

$$F_{Ar} * Z_{N_2,Ar} = F_{Gases} * Z_{N_2,Gases} \tag{3.24}$$

Balanço mássico dos componentes para a corrente de saída Gases:

$$Z_{CO_2,Gases} + Z_{Água,Gases} + Z_{CO,Gases} + Z_{O_2,Gases} + Z_{N_2,Gases} = 1 \tag{3.25}$$

Para os demais componentes na corrente Gases a fração mássica é igual a zero:

$$Z_{Componente,Gases} = 0 \tag{3.26}$$

em que:

$Ex_{O_2}$  é a percentagem de excesso de oxigênio na queima do bagaço, que no caso foi considerado 16,5 %.

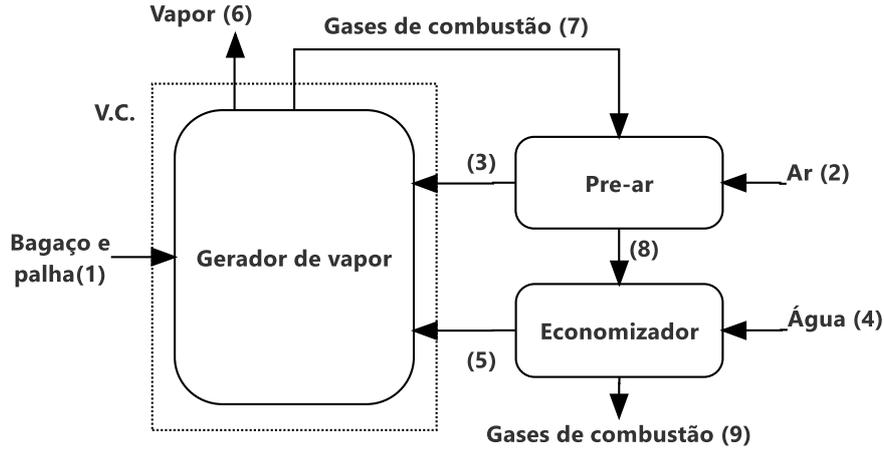
$F_a$  é a vazão mássica da corrente a em kg/h.

$z_{b,a}$  é a fração mássica do componente b na corrente a.

$MM_c$  é a massa molar do componente c.

O sistema de cogeração está esquematizado na Figura 20, e é composto pelo gerador de vapor (caldeira), pré-ar (aquecedor de ar) e economizador (aquecedor de água).

Figura 20 – Sistema composto pelo Gerador de vapor, Pré-ar e Economizador.



Fonte: Baseado em ENSINAS et al. 2014.

O balanço de energia utilizado no modelo da caldeira implementado no EMSO, considerando o volume de controle (V.C.) da Figura 20, é o seguinte:

$$(Q_{Combustão} + H_{Entrada} + H_{Ar} - H_{Gases}) * Eficiência = H_{Útil} \quad (3.27)$$

$$Q_{Combustão} = F_{Bagaço} * (PCI_{Celulose} * z_{Celulose,Bagaço} + PCI_{Hemicelulose} * z_{Hemicelulose,Bagaço} + PCI_{Lignina} * z_{Lignina,Bagaço} - h_{vaporização\ da\ água} * z_{Água,Bagaço}) + F_{Palha} * PCI_{Palha} \quad (3.28)$$

$$H_{Entrada} = F_{Bagaço} * h_{Bagaço} + F_{Palha} * h_{Palha} \quad (3.29)$$

$$H_{Ar} = F_{Ar} * Cp_{Ar} * (T_{Ar} - 273,15) \quad (3.30)$$

$$H_{Útil} = F_{Água} * (h_{vapor} - h_{Água}) \quad (3.31)$$

$$H_{Gases} = F_{Gases} * h_{Gases} \quad (3.32)$$

$$h_{Gases} = (z_{Água,Gases} * Cp_{vapor} + z_{CO_2,Gases} * Cp_{CO_2} + z_{CO,Gases} * Cp_{CO} + z_{O_2,Gases} * Cp_{O_2} + z_{N_2,Gases} * Cp_{N_2}) * (T_{Gases} - 273,15) \quad (3.33)$$

em que:

$h_b$  é a entalpia específica em kJ/kg da corrente ou do componente b.

$H_b$  é o fluxo de entalpia em kJ/h da corrente ou do componente b.

$PCI_b$  é o poder calorífico inferior em kJ/kg da corrente ou do componente b.

As Equações 3.30 e 3.33 têm o termo de temperatura de referência de 273,15 K. As demais equações não precisam pois se baseiam na entalpia calculada pelo brix que já considera essa referência, e no caso da água os valores de entalpia são calculados pelo *Propterm*.

As eficiências das turbinas foram atualizadas para valores mais atuais. Na antiga biorrefinaria os valores de eficiência da turbina de contrapressão e de condensação eram de 68% e de 70%, respectivamente. Foi calculada uma eficiência média baseada nos valores levantados por Alves (2011), e chegou-se à eficiência de 82% para ambas as turbinas.

Os dados de temperatura e pressão utilizados como especificações da caldeira encontram-se na Tabela 13, em que a numeração das correntes corresponde àquela da Figura 20.

Tabela 13 – Especificações utilizadas na caldeira.

<b>Corrente</b>	<b>Temperatura (°C)</b>	<b>Pressão (MPa)</b>
<b>2</b>	30	1
<b>3</b>	240,2	1
<b>5</b>	170,8	69
<b>6</b>	500	65
<b>7</b>	400,9	1

Fonte: Baseado em ENSINAS et al. (2014).

A corrente 1 é composta pelo bagaço, cujos dados são fornecidos pelos equipamentos anteriores à caldeira, e pela palha, que é especificada em 30 °C, pressão de 1 atm e vazão de 35.000 kg/h. A corrente 4 é composta pela água de alimentação e também seus dados são fornecidos pelos equipamentos anteriores à caldeira. A água virgem necessária para suprir as perdas é fornecida como líquido saturado a 2,5 bar. A título de ilustração, a temperatura da corrente de bagaço quando a fração destinada para o E2G é de 0,3 é de 33,14 °C e pressão de 1 atm. As correntes 8 e 9 têm suas propriedades calculadas pelo EMSO.

### 3.1.7 Integração energética

Foram inseridos trocadores de calor na biorrefinaria virtual com o intuito de fazer um melhor aproveitamento da energia térmica das correntes. Foi feita a análise Pinch para determinar as trocas térmicas possíveis. O coeficiente de troca térmica nos trocadores de calor foi fixado em 600 kcal/m<sup>2</sup>/°C/h (0,7 kW/m<sup>2</sup>/K), que é um valor aproximado para trocadores de calor limpos (HUGOT, 1986).

Escolheu-se para fazer a análise Pinch correntes que não variassem ou variassem menos de 10% em suas vazões e/ou temperaturas quando se varia a fração de bagaço destinado para a produção de E2G. Foram escolhidas 3 correntes, sendo duas frias e uma corrente quente. Foi fixada em 30% a fração de bagaço destinado para o E2G e foi estipulada uma diferença mínima de temperatura ( $\Delta T_{\min}$ ) de 10 °C para que ocorra a troca térmica.

A corrente quente é a corrente proveniente da saída dos evaporadores de múltiplo efeito de concentração de caldo (Caldo concentrado). As correntes frias são a corrente que sai das moendas e se destina para a etapa de calagem (Corrente para a calagem) e a outra corrente é a corrente de saída da etapa de calagem e que se destina ao balão flash (Caldo antes do flash-limp). A Tabela 14 contém os dados das correntes, em que H é o calor disponível para ser trocado entre as correntes; quando o sinal é positivo, é o calor a ser recebido pela corrente, quando o sinal é negativo, é o calor a ser fornecido pela corrente.

Tabela 14 – Dados das correntes que foram utilizadas para a análise Pinch.

Corrente	Descrição	Tipo	Temp. Entrada (°C)	Temp. Saída (°C)	H (kW)
1	Caldo concentrado	Quente	82,5	32,0	-19382,8
2	Corrente para a calagem	Fria	32,1	58,4	14880,7
3	Caldo antes do flash-limp	Fria	58,3	97,0	22385,6

Fonte: Elaborado pelo autor.

Na Figura 21 encontra-se o diagrama de grade com a temperatura Pinch, os trocadores de calor necessários e as utilidades quente e fria necessárias. Os valores sobre as linhas são as temperaturas em Kelvin, os valores dentro dos retângulos são os valores de troca térmica em kW dos trocadores de calor (trocadores 1 e 2 representados



### 3.2 Otimização multiobjetivo

A partir do *diagram* gera-se um *flowsheet* que contém todas as informações do processo. Para proceder estudos de otimização, deve-se escolher variáveis para otimizar funções objetivo determinadas para o processo, além de aumentar o número de graus de liberdade.

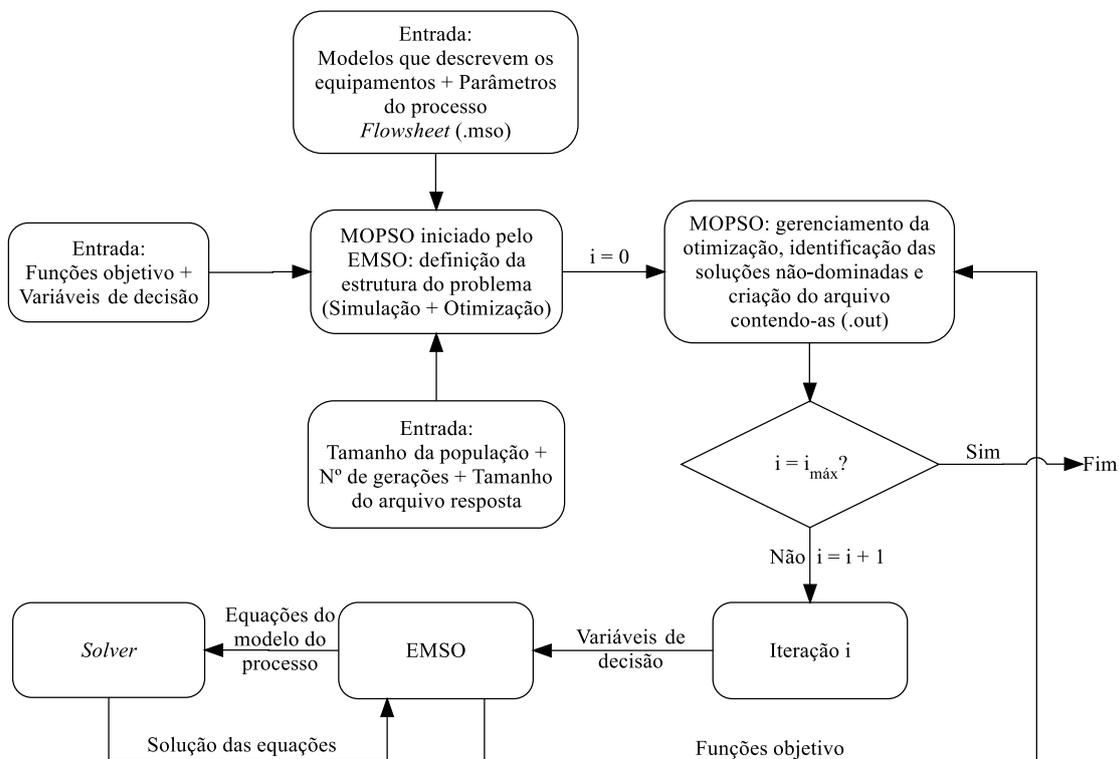
Definem-se quais serão as variáveis de decisão e as funções objetivo, como maximizar a produção de etanol, maximizar a produção de energia elétrica, minimizar a produção de vinhaça, ou minimizar a produção de CO<sub>2</sub>. As funções objetivo podem ser conflitantes e por isso há a utilização de algoritmo multiobjetivo, como descrito no item 2.8, que se utiliza dos conceitos de dominância e não-dominância.

Em seguida, escolhe-se o número de partículas que serão utilizadas como estimativas iniciais e quantos movimentos fará cada partícula no espaço amostral, além de definir o tamanho do arquivo de resposta, ou seja, quantas das respostas não-dominadas geradas serão armazenadas. O arquivo resposta gerado tem extensão .out, é aberto no bloco de notas e seus dados são usados para construção de gráficos em um software gráfico. O tempo de processamento dos cálculos é proporcional ao número de partículas e de seus movimentos, ou seja, quanto maior o número, maior será o tempo.

O fluxograma da Figura 22 ilustra a integração do algoritmo MOPSO com o EMSO. Com os modelos e os parâmetros do processo, as funções objetivo, as variáveis de decisão, o tamanho da população, o número de iterações do algoritmo e com o tamanho do arquivo resposta, inicia-se o algoritmo MOPSO. O algoritmo gera tantos valores quanto são o número de partículas para cada uma das variáveis de decisão, que são passadas para o EMSO. O EMSO, então, através de um solver, tenta solucionar o conjunto de equações constituintes do modelo do processo da biorrefinaria. A solução do conjunto de equações determina o valor das diferentes funções objetivo do problema de otimização em questão. Caso os valores das variáveis de decisão passadas pelo MOPSO para o EMSO constituam uma partícula não-viável, isto é, que não permite convergência das equações do modelo, o MOPSO, ao detectar que o EMSO retornou uma mensagem de não convergência, atribuirá a cada função objetivo valores desfavoráveis (muito altos, para funções a serem minimizadas, e muito baixos, para funções a serem maximizadas).

De posse dos valores das funções objetivo para todas as partículas da iteração em questão, o MOPSO faz uma análise de dominância das partículas do enxame e salva as partículas não-dominadas com os seus respectivos valores de funções objetivo, no arquivo resposta (.out). Novas posições para as partículas são geradas e uma nova iteração é realizada, até que se atinja o número máximo de iterações. Em um caso extremo, caso, durante todo o processo de busca do MOPSO, nenhuma partícula viável seja gerada, o arquivo resposta conterá a primeira partícula da primeira iteração, já que não houve nenhuma outra partícula que a dominasse para a sua substituição (conforme explicado no item 2.8.2.1).

Figura 22 – Fluxograma esquemático do algoritmo integrado EMSO + MOPSO.



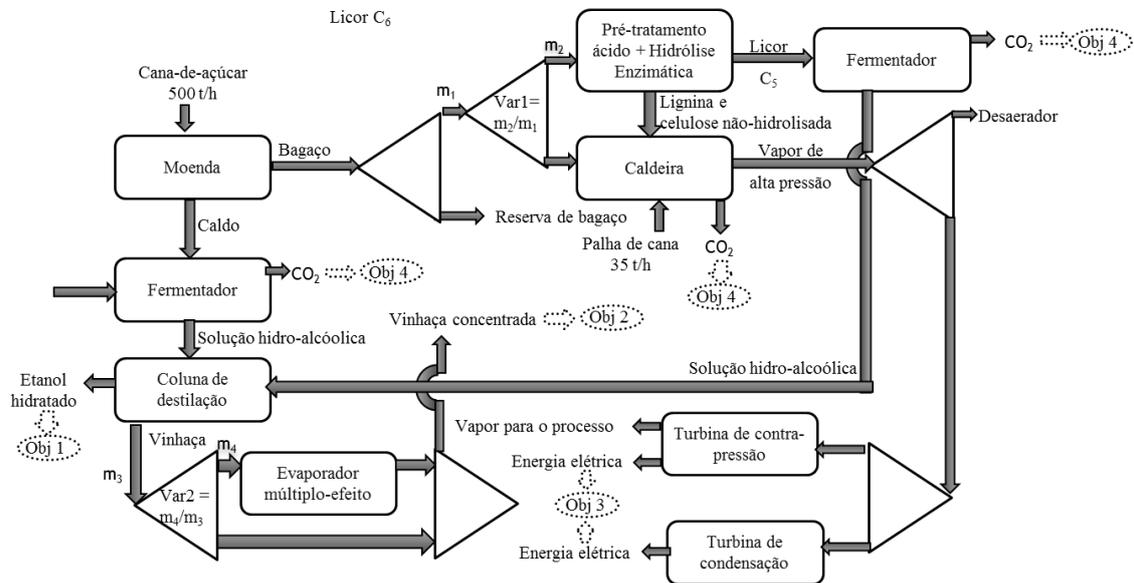
Fonte: Elaborado pelo autor.

Foram utilizadas 15 partículas iniciais para percorrer o espaço de busca e cada partícula teve 15 iterações. O tamanho definido para o arquivo externo foi de no máximo 30 soluções não-dominadas. Cinco problemas de otimização multiobjetivo foram analisados, como descritos a seguir, variando 4 funções objetivo e duas variáveis de decisão, como pode ser visto na Figura 23.

Em todos os problemas de otimização, à exceção do último, as variáveis de decisão são a fração de bagaço que será destinada para a produção de E2G (Var 1), já considerando que 5% do bagaço será deixado como reserva, e a fração de vinhaça que

será concentrada até 7,00 °Bx (Var 2). No último problema, apenas Var 2 é uma variável de decisão.

Figura 23 – Fluxograma esquemático das funções objetivo e das variáveis de decisão.



Fonte: Elaborado pelo autor

Quanto maior a fração de bagaço destinada para o E2G, mais etanol é gerado pela planta (Obj 1) e, conseqüentemente, uma maior vazão de vinhaça é gerada pela coluna de destilação, influenciando na vazão de vinhaça que deixa o processo (Obj 2) e mais CO<sub>2</sub> é gerado nas dornas de fermentação. Quanto menor a fração de bagaço destinado para o E2G, maior é a quantidade de vapor de alta pressão gerado na caldeira, que é, então, destinado para a turbina de condensação (contribuindo para uma maior geração de energia elétrica, Obj 3) e/ou para a turbina de contrapressão e posteriormente para os evaporadores de múltiplo efeito que concentram a vinhaça, reduzindo a quantidade de vinhaça que deixa o processo (Obj 2), além de haver uma maior geração de CO<sub>2</sub> pela combustão da caldeira. O Objetivo 4 compreende a liberação de CO<sub>2</sub> pelas dornas de fermentação e pelo processo de combustão na caldeira. Se houver uma menor quantidade de bagaço sendo queimada e/ou uma maior quantidade de vapor de alta pressão destinado para a geração de energia elétrica na turbina de condensação, haverá uma menor fração de vinhaça sendo concentrada.

O primeiro problema de otimização estudado nessa pesquisa (4.34) tem como objetivos minimizar a vazão de vinhaça que deixa o processo (Obj 2) e, ao mesmo tempo, maximizar a produção de etanol (Obj 1). Essas funções objetivo são conflitantes, pois quando se produz mais etanol, mais vinhaça é produzida na coluna de destilação e

há menos vapor disponível para os evaporadores de múltiplo efeito que concentram a vinhaça.

$$\text{Problema 1} \left\{ \begin{array}{l} \max_{Var1, Var2} (Obj1) \\ \min_{Var1, Var2} (Obj2) \\ s.a. \quad 0 \leq Var1 \leq 1 \\ \quad \quad 0 \leq Var2 \leq 1 \end{array} \right. \quad (4.34)$$

O segundo problema tem como objetivos maximizar a vazão de etanol que deixa o processo (Obj 1) e, ao mesmo tempo, maximizar a energia elétrica produzida pelas duas turbinas (Obj 3). Além do etanol, a usina também fatura com a venda de energia elétrica, mas etanol e energia são duas funções conflitantes, como explicado anteriormente.

$$\text{Problema 2} \left\{ \begin{array}{l} \max_{Var1, Var2} (Obj1) \\ \max_{Var1, Var2} (Obj3) \\ s.a. \quad 0 \leq Var1 \leq 1 \\ \quad \quad 0 \leq Var2 \leq 1 \end{array} \right. \quad (4.35)$$

O terceiro problema tem como objetivos maximizar a energia elétrica produzida pelas duas turbinas (Obj 3) e, ao mesmo tempo, minimizar a vazão de vinhaça que deixa o processo (Obj 2). São duas funções objetivos conflitantes, pois, ou se destina mais vapor para a concentração da vinhaça e se produz menos energia elétrica pela turbina de contrapressão, ou se destina esse vapor para a turbina de condensação e se produz mais energia elétrica.

$$\text{Problema 3} \left\{ \begin{array}{l} \min_{Var1, Var2} (Obj2) \\ \max_{Var1, Var2} (Obj3) \\ s.a. \quad 0 \leq Var1 \leq 1 \\ \quad \quad 0 \leq Var2 \leq 1 \end{array} \right. \quad (4.36)$$

O quarto problema envolve todas as funções objetivo: maximizar a produção de etanol (Obj 1), minimizar a vazão de vinhaça que deixa o processo (Obj 2), maximizar a energia elétrica gerada pela planta (Obj 3) e minimizar a produção de CO<sub>2</sub> gerado pela planta (Obj 4).

$$\text{Problema 4} \left\{ \begin{array}{l} \max_{Var1, Var2} (Obj1) \\ \min_{Var1, Var2} (Obj2) \\ \max_{Var1, Var2} (Obj3) \\ \min_{Var1, Var2} (Obj4) \\ s.a. \quad 0 \leq Var1 \leq 1 \\ \quad \quad 0 \leq Var2 \leq 1 \end{array} \right. \quad (4.37)$$

O quinto problema é referente ao funcionamento de uma usina de E1G, sendo que a fração de bagaço destinado para o E2G (Var 1) é estabelecida com um valor de 0,0001. Evita-se usar valores de zero para qualquer especificação, pois pode ocasionar problemas na convergência do EMSO. Fixar a fração de bagaço destinado para o E2G ocasiona um valor fixo na produção de etanol e de geração de CO<sub>2</sub>. Com isso há apenas uma variável de decisão, a fração de vinhaça destinada para a concentração nos evaporadores de múltiplo efeito (Var 2). As funções objetivo do quinto problema são: minimizar a vazão de vinhaça que deixa o processo (Obj 2) e maximizar a energia elétrica gerada pela planta (Obj 3).

$$\text{Problema 5} \left\{ \begin{array}{l} \min_{Var2} (Obj2) \\ \max_{Var2} (Obj3) \\ s.a. \quad 0 \leq Var2 \leq 1 \end{array} \right. \quad (4.38)$$

## 4 Resultados e Discussão

O fluxograma que compreende toda a biorrefinaria, incluindo sua integração energética e o fechamento do circuito de água da caldeira, está representado na Figura 24. Na Figura 25 o fluxograma do processo está representado em um diagrama de blocos para uma melhor compreensão. A inclusão de um novo decantador, além do fechamento do circuito de água, na etapa da lavagem da cana pode ser visto na área em destaque “a” da Figura 24. O lodo do decantador produzido pela simulação tem uma umidade de 88,87%, e o reaproveitamento de água nessa etapa é de 95,24%.

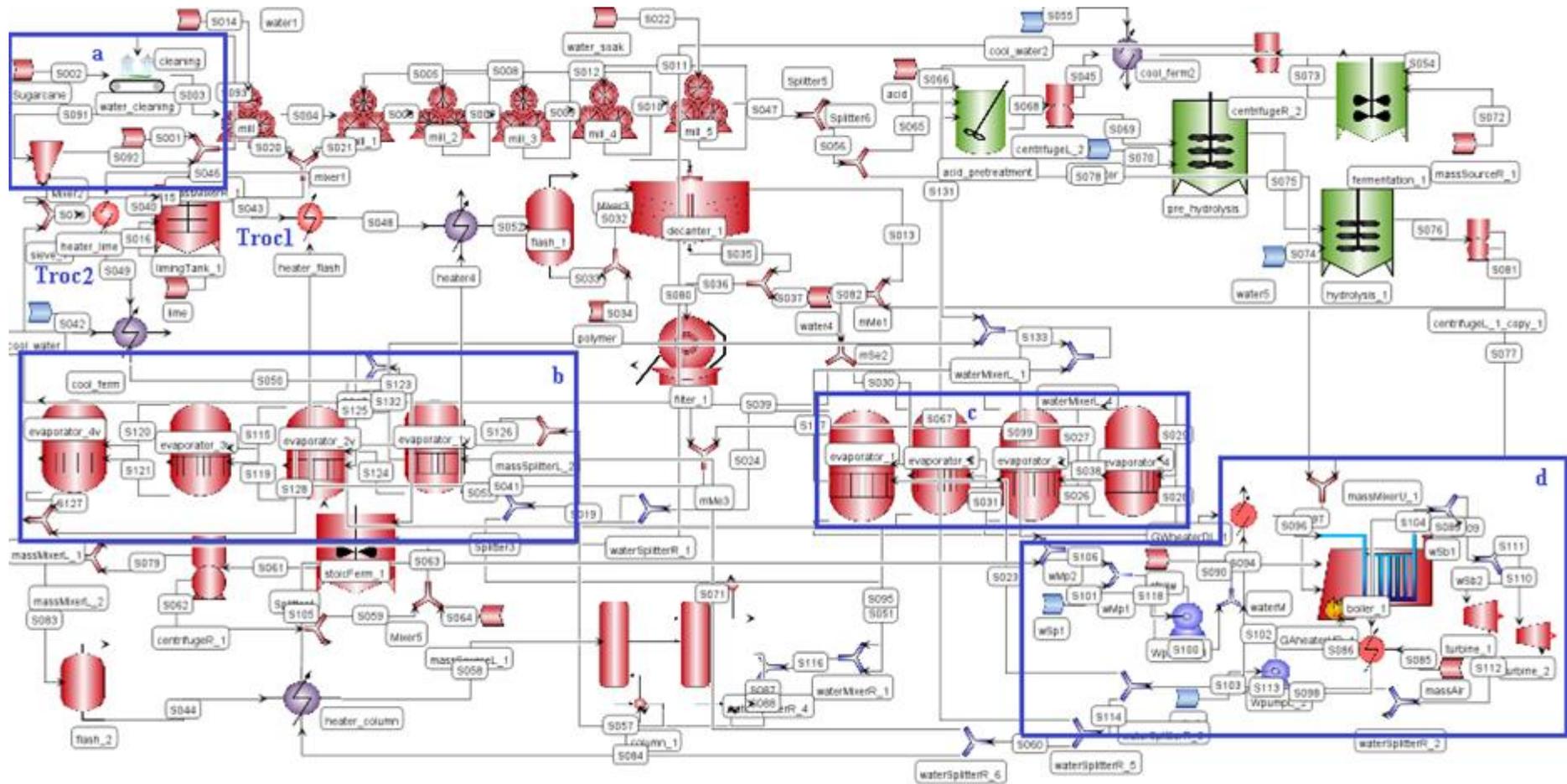
A simulação da etapa de concentração do caldo forneceu os mesmos valores de brix do primeiro e do terceiro efeito obtidos por Lino (2013). O vapor vegetal purgado, que é o vapor produzido no primeiro efeito dos evaporadores de concentração do caldo e que é utilizado como utilidade quente, varia entre 92,54% a 92,80% do total do vapor produzido pelo primeiro evaporador, valor próximo ao obtido por Lino (2013), que foi de 91,45%. Essa diferença entre as quantidades de vapor purgado se deve à quantidade de bagaço destinado para o E2G, pois quanto mais se destina bagaço para a produção de E2G, mais licor C6 é destinado para a concentração nos evaporadores e mais vapor vegetal é requerido nas colunas de destilação. Considerando apenas o evaporador múltiplo efeito para a concentração do caldo, houve uma economia de vapor de escape de turbina de cerca de 18% em comparação ao consumo quando a planta utiliza um evaporador de efeito simples. Na área em destaque “c” da Figura 24 é mostrado o fluxograma da etapa de concentração do caldo e na Tabela 15 são apresentados os valores calculados pelo EMSO, em que U é o coeficiente global de troca térmica.

Tabela 15 – Valores calculados pelo EMSO para os evaporadores de múltiplo efeito da concentração do caldo.

	Calculado
°Bx na saída do efeito 1	35,00
°Bx na saída do efeito 3	47,68
Percentual de vapor vegetal purgado	92,54 - 92,80%
U do efeito 1 (kW/(m <sup>2</sup> .K))	1,32 – 1,54
U do efeito 2 (kW/(m <sup>2</sup> .K))	1,08 – 1,20
U do efeito 3 (kW/(m <sup>2</sup> .K))	0,63 - 0,71
U do efeito 4 (kW/(m <sup>2</sup> .K))	0,52 - 058

Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 24 – Fluxograma completo da biorrefinaria no EMSO.



Fonte: Elaborado pelo autor.



efeitos para os evaporadores múltiplo efeito, mas isso envolveria estudos de otimização estrutural, o que está fora do escopo desse trabalho de dissertação.

Tabela 16 – Valores calculados pelo EMSO para os evaporadores de múltiplo efeito da concentração da vinhaça.

	Calculado
°Bx na saída do efeito 1	2,24 - 6,11
°Bx na saída do efeito 2	2,86 - 6,31
°Bx na saída do efeito 3	4,04 - 6,60
Percentual de vapor vegetal purgado	42,49% - 99,88%
Área do efeito 1 (m <sup>2</sup> )	172,3 – 499,1
Área do efeito 2 (m <sup>2</sup> )	0,8 – 1.018,7
Área do efeito 3 (m <sup>2</sup> )	25,7 – 3.757,3
Área do efeito 4 (m <sup>2</sup> )	70,7 – 7.960,4

Fonte: Elaborado pelo autor.

A temperatura dos gases de combustão após o pré-ar (Corrente 8 da Figura 20) é de 259,18 °C na situação em que 0,01% do bagaço é desviado para a produção de E2G e é de 257,19 °C na situação em que esse desvio é de 50,09%. Após o economizador (Corrente 9 da Figura 20) a temperatura dos gases de combustão cai para 184,91 °C para a situação de 0,01% de bagaço e para 181,53 °C para a situação de 50,09% de desvio. Os valores obtidos por ENSINAS (2014) foram de 260 °C dos gases de combustão após o pré-ar e de 165 °C após o economizador. A diferença na temperatura do economizador se deve à diferença de temperatura da água que alimenta o economizador (Corrente 4 da Figura 20). Enquanto ENSINAS considerava a temperatura de 120 °C, na simulação essa temperatura varia entre 123,78 °C e 124,86 °C em virtude de a Corrente 4 corresponder à união da água de reposição de caldeira e do retorno de condensado coletado no circuito fechado de água de caldeira. A etapa de cogeração de energia, considerando a entrada de ar na caldeira, é mostrada na área em destaque “d” da Figura 24. A Tabela 17 contém a composição dos combustíveis que alimentam a caldeira. Nesse tabela, a chamada “Corrente residual de hidrólise” corresponde à corrente que contém a lignina e a celulose e a hemicelulose não hidrolisadas do bagaço e que é enviada para a caldeira para servir como combustível complementar.

Com o fechamento do circuito de água do processo e o retorno de condensado para o sistema de cogeração, há o reuso de 57,32% a 97,36% da água. Essa grande variação no reuso se deve a variações possíveis na quantidade de vapor destinada para a turbina de condensação para a exclusiva geração de eletricidade. O condensado dessa turbina não é reutilizado devido à sua baixa pressão. Como se optou por não incluir

mais uma bomba no fluxograma, reutilizar esse condensado acarretaria problemas na convergência da simulação. Futuros trabalhos poderiam incluir uma nova bomba para aumentar a pressão do condensado e fechar o circuito, já que pode-se chegar a perdas de mais de 30% de água na corrente de condensado da turbina de condensação.

Tabela 17 - Combustíveis da caldeira e sua composição.

	<b>Bagaço</b>	<b>Corrente residual da hidrólise</b>	<b>Palha</b>
<b>% Celulose</b>	18,26	10,23	37,62
<b>% Hemicelulose</b>	17,35	9,15	16,16
<b>% Lignina</b>	10,04	20,38	26,44
<b>% Umidade</b>	50,00	50,00	15,00

Fonte: Elaborado pelo autor.

O vapor de alta pressão que sai da caldeira passa um *splitter* em que se considera uma perda de 1,5% devido a perdas do processo no interior da caldeira. O vapor de escape de turbina de contrapressão passa por outro *splitter* em que há perda de 3.545 kg/h de vapor para simular as perdas de entalpia no desaerador.

O consumo de água na planta é de 0,84 m<sup>3</sup> de água para cada tonelada de cana processada quando se destina 50% do bagaço para a produção de E2G. Se não houver produção de E2G, o consumo decai para 0,60 m<sup>3</sup> de água para cada tonelada de cana processada. Essa diferença se deve quase unicamente ao consumo de água na etapa de pré-tratamento ácido do bagaço. Para essa cálculo de consumo de água desconsiderou-se a água de resfriamento e a água de reposição de caldeira. Com reaproveitamento do condensado na caldeira acima de 80%, o consumo de água se mantém abaixo do requerido pela SMA (Secretaria do Meio Ambiente do Estado de São Paulo), que é 1m<sup>3</sup> de água por tonelada de cana.

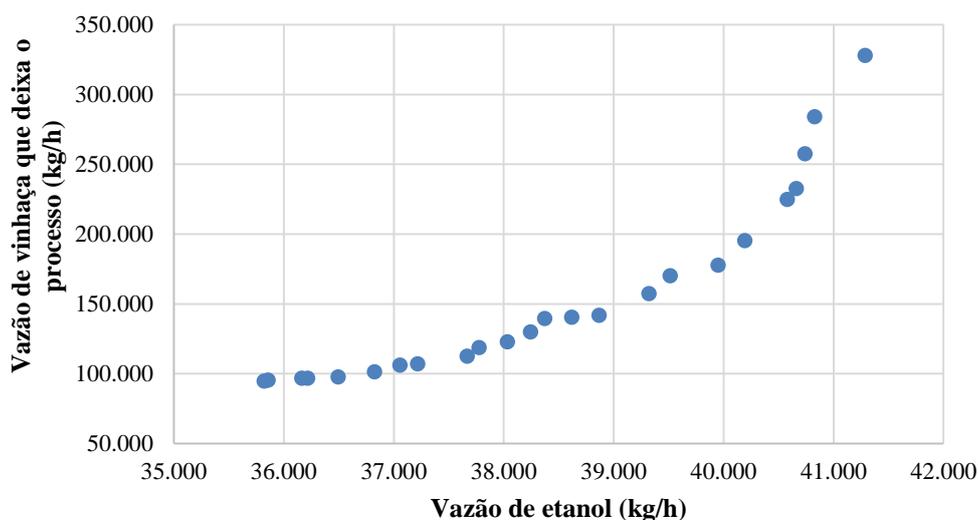
Os trocadores de calor Troc1 e Troc2 da Figura 24 foram obtidos pela análise *Pinch* discutida na seção 4.1.7. Na simulação da biorrefinaria, os trocadores de calor foram o que mais apresentaram problemas de convergência. Quando se aumenta o número de equipamentos na biorrefinaria, aumenta-se a complexidade para a convergência. Um exemplo disso foi que a convergência dos evaporadores de múltiplo efeito da concentração da vinhaça foi mais complexa do que os evaporadores de múltiplo efeito da concentração do caldo, pois a concentração da vinhaça foi a última etapa a ser implementada na simulação da biorrefinaria.

Com 500.000 kg/h de cana se obtêm 131.791 kg/h de bagaço (50 % umidade), sendo reservado 5 % desse valor para o período de entressafra, restando 125.201 kg/h. Com essa quantidade de cana, destinando-se apenas 0,01% de bagaço para o E2G, obteve-se uma produção de 35.730 kg/h de etanol, 309.514 kg/h de vinhaça de 1,67 °Bx na saída da coluna de destilação, geração de 378.618 kg/h de vapor a 65 bar na saída da caldeira, e houve a geração de 187.048 kg/h de CO<sub>2</sub> no processo.

A turbina de condensação produz energia elétrica 1,59 vezes mais que a turbina de contrapressão para uma mesma vazão de vapor de alta pressão alimentada.

No primeiro problema de otimização multiobjetivo foi analisada a relação entre a concentração da vinhaça e a produção de etanol. A otimização gerou 24 soluções não-dominadas, usadas para construir o gráfico da Figura 26, e as variáveis que geraram essas soluções estão na Figura 27.

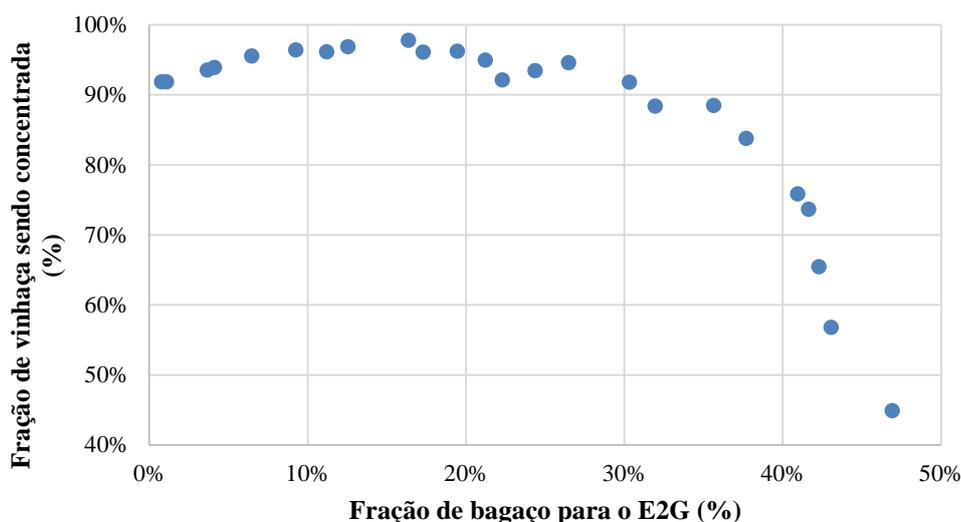
Figura 26 – Soluções não-dominadas encontradas para o Problema 1 com as funções objetivo de minimizar a vazão de vinhaça que deixa o processo e maximizar a vazão de etanol.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Na Figura 26 pode-se ver que ao se aumentar a vazão de etanol produzido há um aumento na vazão de vinhaça que deixa o processo. Isso se deve ao aumento da quantidade de vinhaça produzida na coluna de destilação com o aumento da produção de etanol, além do fato de que, ao se destinar mais bagaço para a geração de etanol, há menos bagaço para ser queimado e, assim, menos vapor será produzido pela caldeira e menos vapor estará disponível para a concentração da vinhaça. A produção de etanol, nas soluções não-dominadas, variou de 35.821,2 kg/h a 41.288,5 kg/h, e a vazão de vinhaça que deixa o processo variou de 94.749 kg/h a 328.133 kg/h.

Figura 27 – Valores das variáveis de decisão correspondendo às soluções não-dominadas obtidas para o Problema 1.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Nas soluções não-dominadas da Figura 27 a fração de bagaço destinada para o E2G variou de 0,78% a 46,93%, e a fração de vinhaça destinada para a concentração variou de 44,90% a 97,77%. É interessante observar que, nas soluções não-dominadas encontradas, quando se desvia até 31% de bagaço para o E2G, consegue-se concentrar mais de 90% da vinhaça produzida. Entretanto, quando se ultrapassa esse percentual de desvio de bagaço, a fração de vinhaça concentrada cai acentuadamente entre as soluções não-dominadas, chegando a 44,90% quando 46,93% de bagaço é destinado para a produção de E2G.

No apêndice A2, na Tabela A1, encontram-se os valores de fração de bagaço destinado à produção de etanol de segunda geração, da fração de vinhaça destinada à concentração e das respectivas vazões de vinhaça concentrada que deixa o processo e de etanol para as soluções não-dominadas do Problema 1. A Tabela 18 apresenta uma análise mais detalhada de quatro dessas soluções.

Na Tabela 18 pode-se notar que, quando há um aumento na fração de bagaço destinado para o E2G, há um aumento na produção de etanol total, havendo uma produção mínima de etanol de 35.821,2 kg/h para a fração de bagaço de 0,78% e para a fração de vinhaça sendo concentrada de 91,83%. A produção máxima de etanol é de 41.288,5 kg/h para a fração de bagaço de 46,93% e fração de vinhaça de 44,90%. Naturalmente, a vinhaça produzida na coluna de destilação também aumenta quando há aumento na fração de bagaço destinada para o E2G, com uma produção mínima de

311.940 kg/h e a máxima de 457.862 kg/h. A relação entre a quantidade de vinhaça produzida pela quantidade de etanol produzido aumenta de 8,71 quilogramas de vinhaça por quilograma de etanol na fração de bagaço de 0,78% para o valor de 11,09 na fração de bagaço de 46,93%.

Tabela 18 – Principais dados calculados pelo EMSO para quatro soluções não-dominadas para o Problema 1 (funções objetivo destacadas em itálico).

	<b>Fração de bagaço destinado para E2G (%)</b>			
	0,78	16,37	30,33	46,93
<b>Fração de vinhaça concentrada até 7,0 °Bx (%)</b>	91,83	97,78	91,81	44,90
<i>Etanol total produzido (E1G + E2G) (kg/h)</i>	35.821,2	37.668,7	39.322,5	41.288,5
<b>Vinhaça total produzida na coluna de destilação (kg/h)</b>	311.940	361.114	405.226	457.862
<b>°Bx da vinhaça da coluna de destilação</b>	1,69	2,07	2,34	2,58
<i>Vinhaça concentrada que deixa o processo (kg/h)</i>	94.748,4	112.675	157.392	328.133
<b>°Bx da vinhaça concentrada que deixa o processo</b>	5,57	6,65	6,02	3,60
<b>Fração de vapor de alta pressão destinada para a turbina de condensação (%)</b>	30,67	18,09	7,34	0,46
<b>Produção de energia total pelas duas turbinas (kW)</b>	78.666,5	69.842,4	62.567,8	56.396,1
<b>Geração de CO<sub>2</sub> (kg/h)</b>	186.725	180.180	174.320	167.349

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Em contrapartida, ao se aumentar a fração de bagaço destinado para o E2G, uma menor fração de bagaço é queimada na caldeira, produzindo menos vapor e, conseqüentemente, menor é a disponibilidade de vapor de escape de turbina para a concentração da vinhaça. Além do mais, ao se aumentar a fração de bagaço destinado para o E2G, diminui-se a fração de vapor destinado para turbina de condensação, o que contribui para uma menor quantidade de energia elétrica sendo produzida. O máximo de energia elétrica gerada entre as soluções não-dominadas é de 78.666,5 kW para a fração de bagaço destinado para o E2G de 0,78% e fração de vinhaça sendo concentrada de 91,83%, e a mínima geração de energia elétrica é de 56.396,1 kW para a fração de bagaço de 46,93% e fração de vinhaça de 44,90%.

Mesmo havendo uma mesma fração de vinhaça sendo concentrada, o brix da vinhaça que deixa o processo pode ser diferente pois depende diretamente do brix da

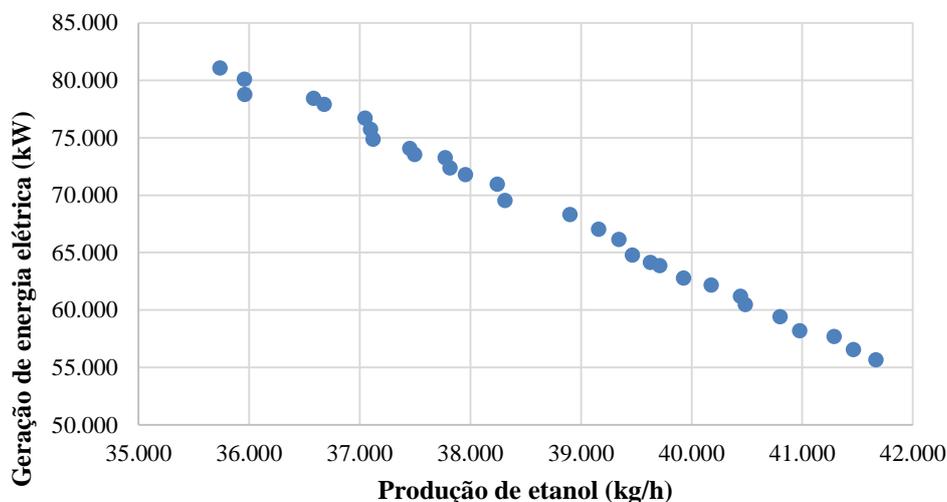
vinhaça gerada na coluna de destilação. Pode-se ver que, com uma fração de vinhaça sendo concentrada de 91,83% e fração de bagaço sendo destinado para o E2G de 0,78%, o brix da vinhaça que deixa o processo é de 5,57 °Bx, enquanto que, para uma fração de vinhaça ligeiramente menor (91,81%) e fração de bagaço de 30,33%, o brix da vinhaça concentrada que deixa o processo é de 6,02 °Bx. Essa diferença se deve aos diferentes valores de brix da vinhaça que deixa a coluna de destilação (1,69 °Bx no primeiro caso e 2,34 °Bx no segundo). No caso em que a fração de vinhaça sendo concentrada cai para o valor de 44,90% e a fração de bagaço é de 46,93%, o brix da vinhaça que deixa o processo é de apenas 3,60 °Bx. É importante notar que, embora para essa solução o brix da vinhaça que sai da coluna de destilação seja o maior entre as quatro soluções não-dominadas, a fração que é concentrada é a menor (44,90%) dentre as quatro soluções, de modo que se observa, pela operação de concentração, um incremento muito pequeno no brix dessa vinhaça (menor valor entre as quatro soluções).

Entre as soluções não-dominadas, a redução do volume de vinhaça, calculada pela Equação 4.1, variou entre 28,33% e 70,37%.

$$\text{Redução do volume(\%)} = 1 - \frac{\text{Vinhaça concentrada que deixa o processo}}{\text{Vinhaça total produzida na coluna de destilação}} \quad (4.1)$$

Na otimização do Problema 2 foram geradas 30 soluções não-dominadas, que foram usadas para construir as Figuras 28 e 29.

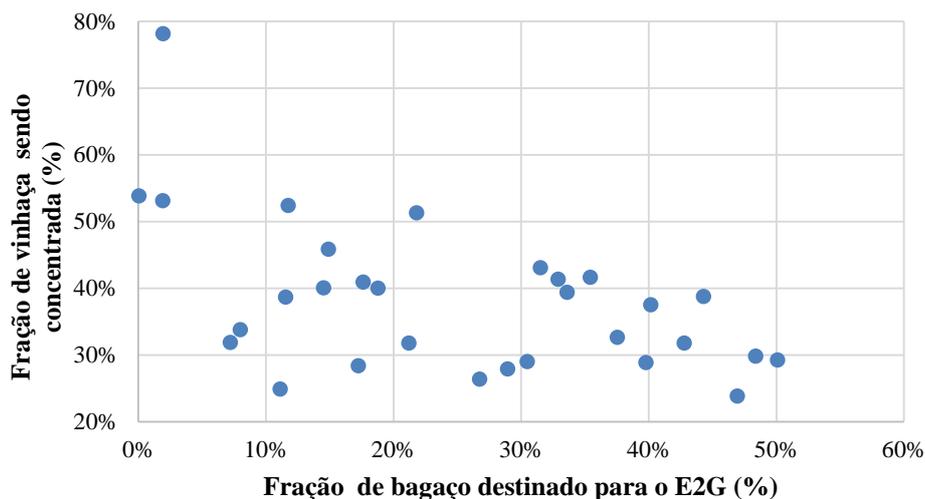
Figura 28 – Soluções não-dominadas encontradas para o Problema 2 com as funções objetivo de maximizar a produção de etanol e maximizar a geração de energia.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Nas soluções não-dominadas da Figura 28, a vazão de etanol variou de 35.735,1 kg/h até 41.663,3 kg/h, a geração de energia elétrica variou entre 55.672,1 kW e 81.078,3 kW. Nota-se uma tendência inversamente proporcional entre a produção de etanol e a geração de energia elétrica: quando se produz mais etanol menos energia elétrica é gerada.

Figura 29 – Valores das variáveis de decisão correspondendo às soluções não-dominadas obtidas para o Problema 2.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Na Figura 29 a fração de bagaço destinada para o E2G variou de 0,05% a 50,09%, e a fração de vinhaça destinada para a concentração variou de 23,84% a 78,19%. Dentre as soluções não-dominadas, 25 soluções (83,33%) têm valor da fração de vinhaça abaixo de 50%, e apenas uma solução não-dominada tem uma fração de vinhaça sendo concentrada acima 60%. Isso pode ser explicado pelo fato de não ter sido objetivo desse problema a minimização da vazão de vinhaça que deixa o processo. Pode-se notar na Figura 29 que os dados estão dispersos, mas ao avançar nos valores do eixo das abscissas (Fração de bagaço destinado para o E2G) os dados diminuem sua dispersão e vão se afunilando.

Os valores de fração de bagaço destinado à produção de etanol de segunda geração e da fração de vinhaça destinada para a concentração, bem como as respectivas vazão de etanol e a taxa de energia produzida para as soluções não-dominadas do Problema 2 são apresentados na Tabela A2 do Apêndice A2. A Tabela 19 apresenta uma análise mais detalhada de quatro soluções não-dominadas para o Problema 2.

Na Tabela 19 pode-se notar que, geralmente, quando se destina uma fração maior de bagaço para o E2G, há uma fração menor de vapor destinado para a turbina de condensação e, também, uma menor produção de energia elétrica. A maior produção de energia elétrica foi de 81.078,3 kW para a fração de bagaço destinado para o E2G de 0,05% e fração de vinhaça destinada para a concentração de 53,88%. Nessas mesmas condições ocorreu a menor produção de etanol (35.735,1 kg/h). Para a fração de bagaço de 50,09% e fração de vinhaça de 29,29% ocorreu a menor produção de energia (55.672,1 kW), e nessas condições ocorreu a maior produção de etanol (41.663,3 kg/h).

Tabela 19 – Principais dados calculados pelo EMSO para quatro soluções não-dominadas para o Problema 2 (funções objetivo destacadas em itálico).

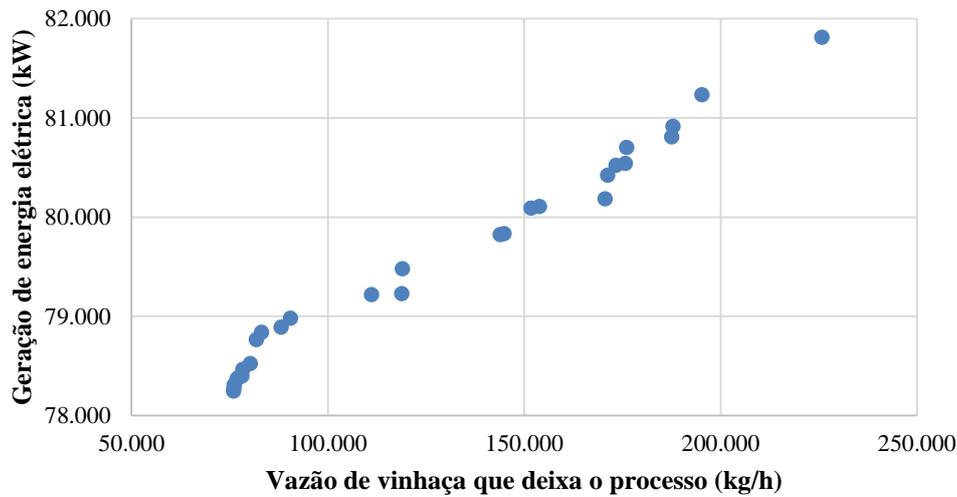
	<b>Fração de bagaço destinado para E2G (%)</b>			
	0,05	1,94	46,93	50,09
<b>Fração de vinhaça concentrada até 7,0 °Bx (%)</b>	53,88	78,19	23,84	29,29
<b><i>Etanol total produzido (E1G + E2G) (kg/h)</i></b>	35.735,1	35.959,1	41.288	41.663,3
<b>Vinhaça total produzida na coluna de destilação (kg/h)</b>	309.649	315.613	457.848	467.895
<b>°Bx da vinhaça da coluna de destilação</b>	1,67	1,73	2,58	2,62
<b>Vinhaça concentrada que deixa o processo (kg/h)</b>	182.666	129.670	388.963	382.213
<b>°Bx da vinhaça concentrada que deixa o processo</b>	2,83	4,20	3,04	3,21
<b>Fração de vapor de alta pressão destinada para a turbina de condensação (%)</b>	36,28	31,69	4,36	0,40
<b><i>Produção de energia total pelas duas turbinas (kW)</i></b>	81.078,3	78.763,7	57.700,1	55.672,1
<b>Geração de CO<sub>2</sub> (kg/h)</b>	187.030	186.236	167.351	166.021

Fonte: Elaborado pelo autor.

Na Tabela 19 o brix da vinhaça concentrada que deixa o processo não aumenta significativamente em comparação ao brix da vinhaça produzida na coluna de destilação. O maior valor de brix da vinhaça concentrada não é obtido quando a vinhaça produzida na coluna de destilação possui o maior valor de brix, mas sim quando uma maior fração de vinhaça é concentrada (78,19%).

Na otimização do Problema 3 foram geradas 28 soluções não-dominadas. As Figuras 30 e 31 apresentam essas soluções respectivamente no espaço de funções e no espaço de variáveis de decisão.

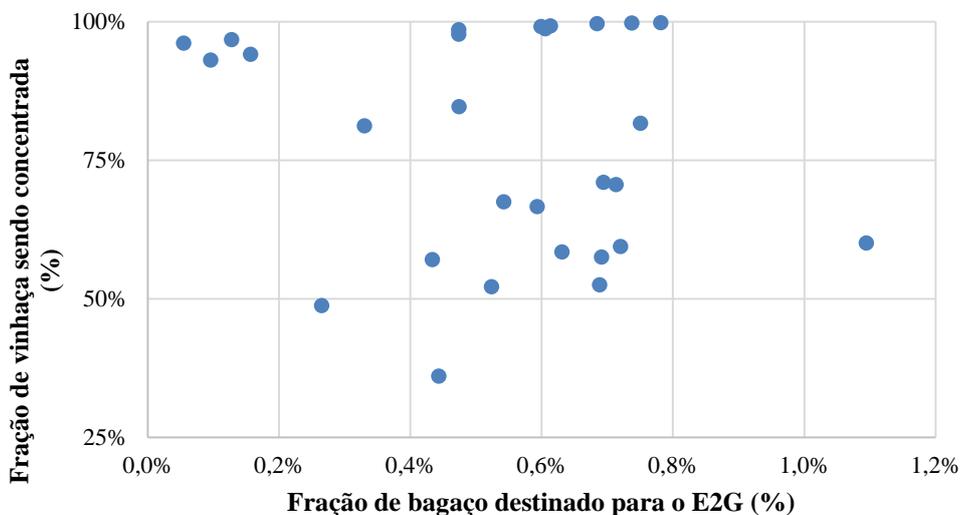
Figura 30 – Soluções não-dominadas encontradas para o Problema 3 com as funções objetivo de maximização da geração de energia e minimização da produção de vinhaça.



Fonte: Elaborado pelo autor.

No gráfico da Figura 30, a vazão de vinhaça que deixa o processo variou de 75.909,3 kg/h a 225.800 kg/h, e a energia elétrica gerada variou de 78.248,1 kW a 81.814,4 kW. Pode-se ver uma relação praticamente linear entre a vazão de vinhaça que deixa o processo e a energia elétrica produzida nas soluções não-dominadas. Quando se aumenta a vazão de vinhaça que deixa o processo, há o aumento da quantidade de energia elétrica gerada, mas, enquanto entre os pontos de máximo e de mínimo da vazão de vinhaça nas soluções não-dominadas há uma diferença de 197,5%, a diferença entre os pontos de extremos para a energia elétrica é de apenas 4,56%.

Figura 31 – Valores das variáveis de decisão correspondendo às soluções não-dominadas obtidas para o Problema 3.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Na Figura 31 a fração de bagaço destinada para o E2G variou de 0,05 % a 1,09%, indicando que o Problema 3 tem uma tendência apenas de produção de E1G, enquanto a fração de vinhaça sendo concentrada variou de 36,03% a 99,80 %. A fração de bagaço se manteve baixa pois não se tinha o objetivo de maximizar a geração de etanol, mas sim a geração de energia elétrica, ao mesmo tempo que se desejava minimizar a produção de vinhaça pelo processo, o que implicou em uma alta quantidade de bagaço sendo queimada para a geração de vapor em todas as soluções não-dominadas.

Os valores de fração de bagaço destinada à produção de etanol de segunda geração e da fração de vinhaça sendo concentrada, bem como as respectivas taxa de energia elétrica e vazão de vinhaça concentrada que deixa o processo para as soluções não-dominadas do Problema 3 encontram-se no Apêndice A2 na Tabela A3. A Tabela 20 apresenta uma análise mais detalhada de quatro soluções não-dominadas para o Problema 3.

Tabela 20 – Principais dados calculados pelo EMSO para quatro soluções não-dominadas para o Problema 3 (funções objetivo destacadas em itálico).

	<b>Fração de bagaço destinado para E2G (%)</b>			
	0,44	1,09	0,05	0,78
<b>Fração de vinhaça concentrada até 7,0 °Bx (%)</b>	36,03	60,10	96,14	99,80
<b>Etanol total produzido (E1G + E2G) (kg/h)</b>	35.781,3	35.858,5	35.735,3	35.821,4
<b>Vinhaça total produzida na coluna de destilação (kg/h)</b>	310.879	312.935	309.654	311.946
<b>°Bx da vinhaça da coluna de destilação</b>	1,68	1,70	1,67	1,69
<i>Vinhaça concentrada que deixa o processo (kg/h)</i>	<i>225.801</i>	<i>170.580</i>	<i>83.056,9</i>	<i>75.909,3</i>
<b>°Bx da vinhaça concentrada que deixa o processo</b>	2,32	3,12	6,23	6,97
<b>Fração de vapor de alta pressão destinada para a turbina de condensação (%)</b>	38,42	34,73	30,61	29,60
<i>Produção de energia total pelas duas turbinas (kW)</i>	<i>81.814,4</i>	<i>80.186,1</i>	<i>78.834,2</i>	<i>78.248,1</i>
<b>Geração de CO<sub>2</sub> (kg/h)</b>	186.866	186.592	187.028	186.724

Fonte: Elaborado pelo autor.

Na Tabela 20 nota-se que, como a fração de bagaço variou apenas 1,04% (em valor absoluto) entre os pontos extremos, a vazão de etanol e de vinhaça deixando a coluna de destilação, que dependem diretamente da fração de bagaço, não variaram muito

entre as soluções não-dominadas. A vazão de etanol variou entre 35.735,3 kg/h e 35.858,5 kg/h, representando uma variação de apenas 0,34% entre os pontos de máximo e de mínimo. Essa mesma porcentagem de variação ocorreu para a vazão de vinhaça que sai da coluna de destilação. Por consequência, também o brix dessa vinhaça não variou muito entre as soluções não-dominadas.

Com isso, a fração de vinhaça destinada para a concentração foi a variável que fundamentalmente determinou as condições de processo das soluções não-dominadas, sendo que uma fração de vinhaça maior implicou em uma concentração da vinhaça maior e uma geração de energia elétrica menor, enquanto uma fração de vinhaça menor ocasionou uma concentração de vinhaça menor e uma geração de eletricidade maior.

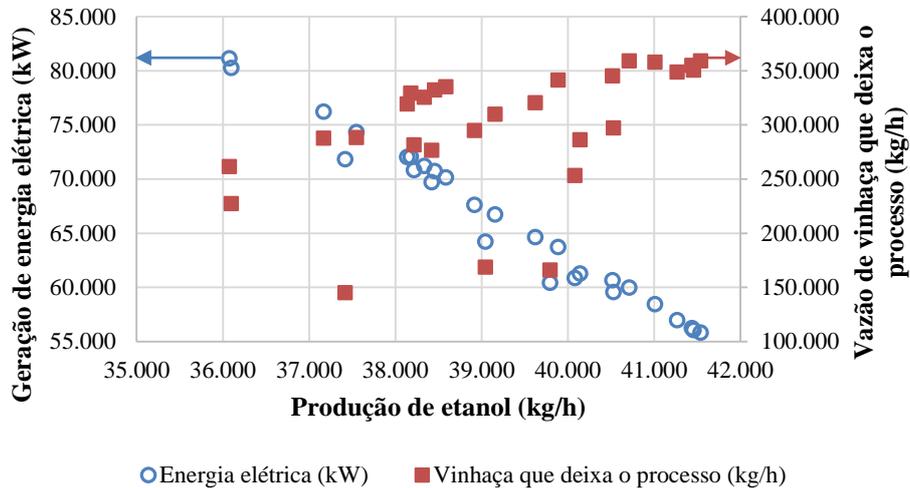
A solução não-dominada que destina 99,80% da vinhaça para concentração tem o menor valor de energia elétrica gerada (78248,1 kW) e reduz 75,67% do volume de vinhaça advinda da coluna de destilação (vazão final de 75.909,3 kg/h). Já a solução não-dominada em que a fração de vinhaça é de 36,03% corresponde a maior produção de energia elétrica (81.814,4 kW) e a menor concentração da vinhaça e, assim, a maior vazão de vinhaça que deixa o processo (225.801 kg/h), com 27,37% de redução no volume desde a coluna de destilação. O brix da vinhaça na saída da coluna de destilação variou apenas 1,19% entre as soluções não-dominadas, enquanto que a variação de brix da vinhaça concentrada que deixa o processo foi de 200,4%. Quanto maior a fração de vinhaça destinada para a concentração maior será o valor de brix de vinhaça que deixa o processo.

Na otimização do Problema 4 foram geradas 28 soluções não-dominadas, que foram usadas para construir os gráficos das Figuras 32, 33, 34 e 35.

No gráfico da Figura 32 a produção de etanol variou de 36.072,3 kg/h a 41.536,0 kg/h, a geração de energia elétrica variou de 55.819,4 kW a 81.145,4 kW, e a vazão de vinhaça que deixa o processo variou de 145.157 kg/h a 359.226 kg/h. A maioria das soluções mostra uma tendência de proporcionalidade entre a produção de etanol e de energia elétrica entre as soluções não-dominadas: quando se aumenta a produção de etanol há um decaimento na produção de energia elétrica, e quando se diminui a produção de etanol há um aumento na produção de energia elétrica. O mesmo já não se pode dizer com relação à produção de etanol e de vinhaça concentrada que deixa o processo. Não

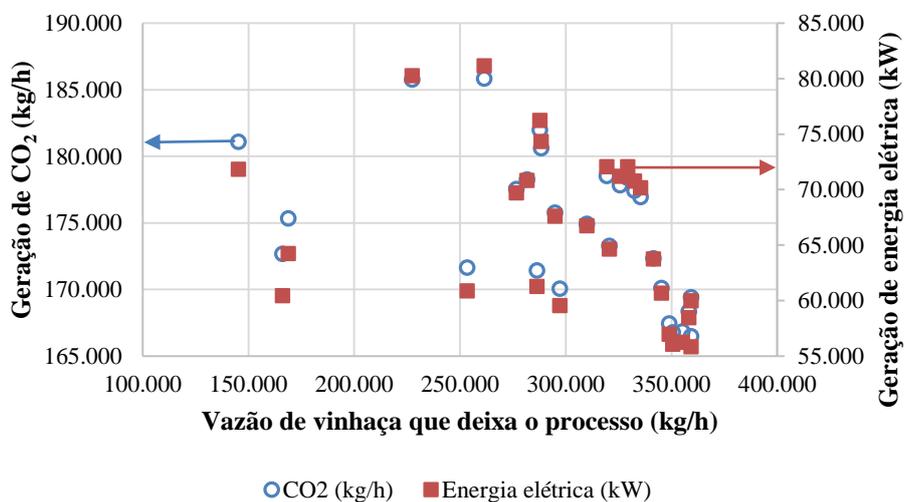
parece haver uma relação entre essas duas saídas de processo nas soluções não-dominadas.

Figura 32 – Análise das soluções não-dominadas de produção de energia elétrica, de etanol e de vinhaça concentrada que deixa o processo para o Problema 4 com as funções objetivo de maximização de produção de etanol, de maximização da geração de energia, de minimização da produção de vinhaça e de minimização de geração de CO<sub>2</sub>.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 33 – Análise das soluções não-dominadas de geração de CO<sub>2</sub>, de produção de energia elétrica e de vinhaça concentrada que deixa o processo para o Problema 4 com as funções objetivo de maximização de produção de etanol, de maximização da geração de energia, de minimização da produção de vinhaça e de minimização de geração de CO<sub>2</sub>.

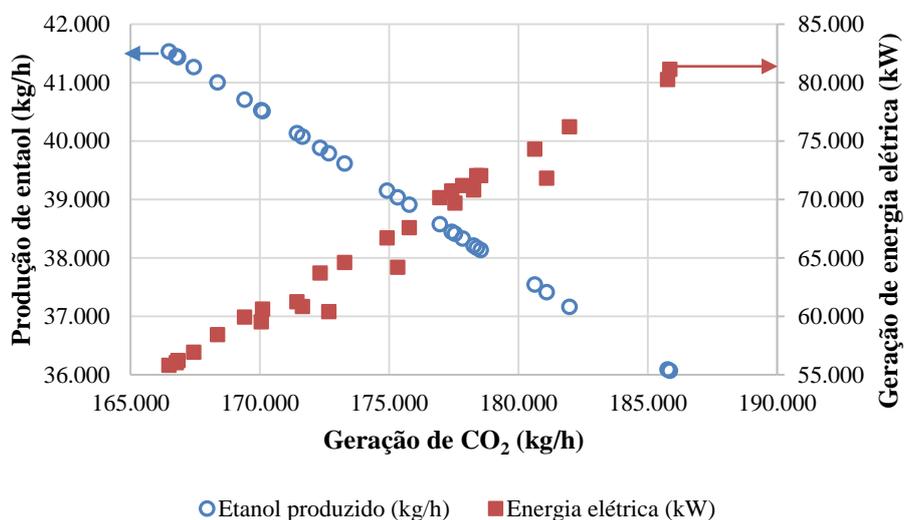


Fonte: Elaborado pelo autor.

Na Figura 33 a geração de CO<sub>2</sub> variou de 166.472 kg/h a 185.835 kg/h. Pode-se ver que não há, nas soluções não-dominadas, uma relação muito clara entre a geração de CO<sub>2</sub> e a vazão de vinhaça que deixa o processo, nem uma relação de produção de energia elétrica com a vazão de vinhaça que deixa o processo. Entretanto, observa-se nessas soluções uma certa tendência entre a geração de CO<sub>2</sub> e a geração de energia

elétrica. Geralmente ambos crescem e decaem na mesma proporção, o que é melhor ilustrado na Figura 34.

Figura 34 - Análise das soluções não-dominadas de geração de CO<sub>2</sub>, de energia elétrica e de produção de vinhaça concentrada que deixa o processo para o Problema 4 com as funções objetivo de maximização de produção de etanol, de maximização da geração de energia, de minimização da produção de vinhaça e de minimização de geração de CO<sub>2</sub>.

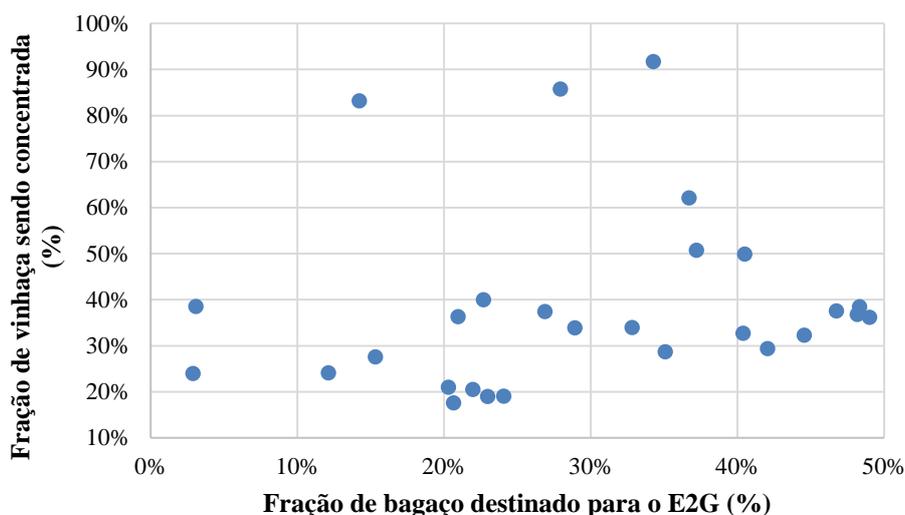


Fonte: Elaborado pelo autor.

Na Figura 34 pode-se perceber a relação linear entre a geração de CO<sub>2</sub> e a produção de etanol nas soluções não-dominadas, o que pode ser explicado pelo fato de a geração de CO<sub>2</sub> ser computada de modo estequiométrico nas reações de combustão e de fermentação. Como não há alteração, entre as diferentes soluções, na relação CO/CO<sub>2</sub> na caldeira nem na composição do bagaço, e o aumento na produção de etanol se deve ao aumento na fração de bagaço sendo destinada para o E2G, o aumento na fração de bagaço leva a diminuição proporcional na produção de CO<sub>2</sub>. É importante observar que a produção específica de CO<sub>2</sub> (isto é, por massa de bagaço) é maior quando o bagaço é queimado do que quando ele é destinado à produção de E2G, justificando a produção de etanol e a geração de CO<sub>2</sub> serem inversamente proporcionais. A maioria das soluções não-dominadas entre a geração de CO<sub>2</sub> e de energia elétrica segue uma tendência linear.

Nas soluções não-dominadas da Figura 35 a fração de bagaço destinado para o E2G variou de 2,90% a 49,02%, e a fração de vinhaça destinada para a concentração variou de 17,55% a 91,70%.

Figura 35 – Valores das variáveis de decisão correspondendo às soluções não-dominadas obtidas para o Problema 4.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Os valores de fração de bagaço destinado à produção de etanol de segunda geração e da fração de vinhaça destinada para a concentração, bem como as respectivas taxa de energia elétrica, vazão de vinhaça concentrada que deixa o processo, vazão de etanol produzido e vazão de CO<sub>2</sub> gerado pelos dois fermentadores e pela caldeira para as soluções não-dominadas do Problema 4 encontram-se na Tabela A4 do Apêndice A2. A Tabela 21 apresenta uma análise mais detalhada de quatro soluções não-dominadas para o Problema 4.

Pela Tabela 21 pode-se ver que não se pode estabelecer uma relação unicamente entre a fração de vinhaça sendo concentrada e o brix da vinhaça que deixa o processo ou entre a fração de vinhaça sendo concentrada e a diminuição de sua vinhaça, isto é, não há uma tendência clara entre esses pares de variáveis de processo, pois se depende também das condições (vazão e a) com que essa vinhaça sai da coluna de destilação. Como já observado, a vazão de CO<sub>2</sub> decai com o aumento da produção de etanol. A produção específica de CO<sub>2</sub> (relativa à quantidade de etanol produzido) decai de 5,15 kg de CO<sub>2</sub>/kg de etanol para 4,01 kg de CO<sub>2</sub>/kg de etanol, quando se passa da solução não-dominada de menor fração de bagaço sendo desviada para a produção de E2G para a de maior fração.

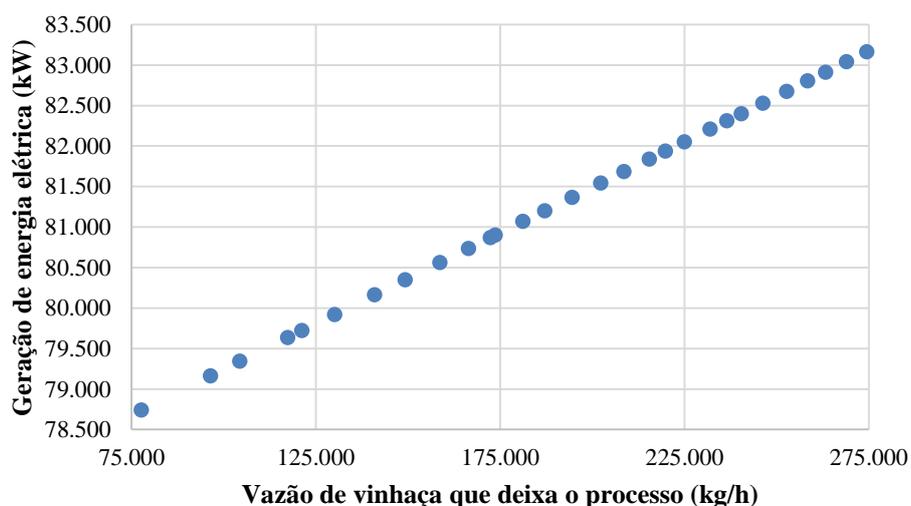
Tabela 21 – Principais dados calculados pelo EMSO para quatro soluções não-dominadas para o Problema 4 (funções objetivo destacadas em itálico).

	<b>Fração de bagaço destinado para E2G (%)</b>			
	2,90	20,67	34,28	49,02
<b>Fração de vinhaça concentrada até 7,0 °Bx (%)</b>	23,95	17,55	91,70	36,17
<i>Etanol total produzido (E1G + E2G) (kg/h)</i>	36.072,3	38.178,1	39.791,1	41.536,0
<b>Vinhaça total produzida na coluna de destilação (kg/h)</b>	318.626	374.672	417.770	464.487
<b>°Bx da vinhaça da coluna de destilação</b>	1,75	2,16	2,40	2,61
<i>Vinhaça concentrada que deixa o processo (kg/h)</i>	261.399	329.230	166.087	359.111
<b>°Bx da vinhaça concentrada que deixa o processo</b>	2,14	2,46	6,04	3,38
<b>Fração de vapor de alta pressão destinada para a turbina de condensação (%)</b>	38,43	26,98	3,83	0,12
<i>Produção de energia total pelas duas turbinas (kW)</i>	81.145,4	72.052,3	60.419,7	55.819,4
<i>Geração de CO<sub>2</sub> (kg/h)</i>	185.835	178.376	172.659	166.472

Fonte: Elaborado pelo autor.

Na otimização do Problema 5 foram geradas 29 soluções não-dominadas, que foram usadas para construir os gráficos das Figuras 36 e 37.

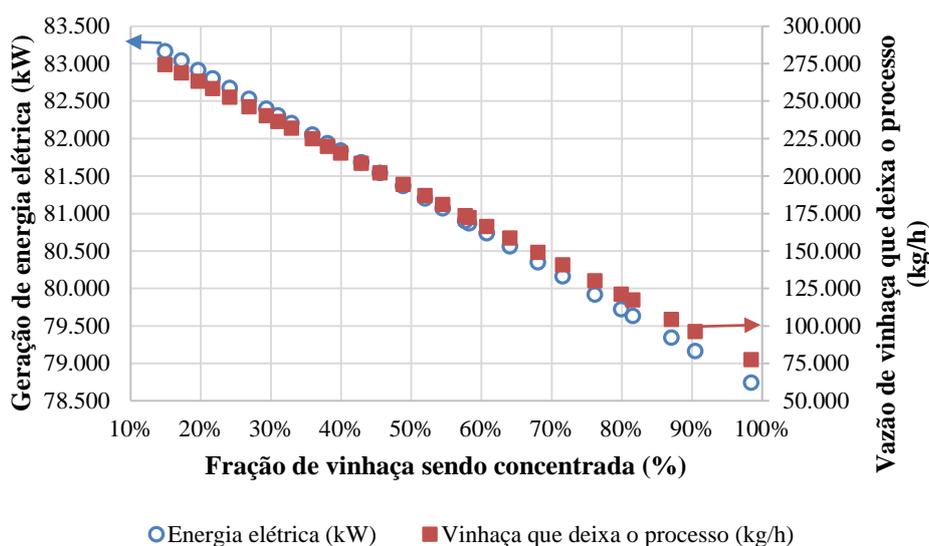
Figura 36 – Soluções não-dominadas encontradas para o Problema 5 com as funções objetivo de minimizar a vazão de vinhaça que deixa o processo e maximizar a geração de energia em uma usina de primeira geração.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Pode-se ver no gráfico da Figura 36 uma relação linear entre a vazão de vinhaça que deixa o processo e a energia elétrica produzida. A vazão de vinhaça varia de 77.577,0 kg/h a 274.402 kg/h (253,7% de variação), e energia elétrica gerada varia de 78.743,0 kW a 83.165,1 kW (5,62% de variação).

Figura 37 - Valores das funções-objetivo (maximização da geração de energia elétrica e minimização da vazão de vinhaça concentrada que deixa o processo) em função da variável de decisão nas soluções não-dominadas obtidas para o Problema 5.



Fonte: Elaborado pelo autor.

No gráfico da Figura 37 a fração de vinhaça sendo concentrada variou de 14,90% a 98,43%. Nota-se um comportamento linear entre a geração de energia elétrica e a fração de vinhaça sendo concentrada. O mesmo ocorre entre a vazão de vinhaça que deixa o processo e a fração de vinhaça. Esse comportamento linear se explica devido ao fato de que o vapor de alta pressão produzido pela caldeira tem apenas dois caminhos possíveis, ou esse vapor vai para a turbina de condensação e produz unicamente energia elétrica ou vai para a turbina de contrapressão e posteriormente para os evaporadores de múltiplo efeito e trocadores de calor.

Os valores de fração de vinhaça sendo concentrada, bem como as respectivas taxa de energia elétrica e vazão de vinhaça que deixa o processo para as soluções não-dominadas do Problema 5 encontram-se no Apêndice A2 na Tabela A5. A Tabela 22 apresenta uma análise mais detalhada de quatro soluções não-dominadas para o Problema 5. Em todas elas, como explicitado anteriormente, produz-se 35.730 kg/h de etanol (apenas E1G), 309.514 kg/h de vinhaça a 1,67 °Bx, 378.618 kg/h de vapor a 65 bar na saída da caldeira e 187.048 kg/h de CO<sub>2</sub>.

Tabela 22 - Principais dados calculados pelo EMSO quatro soluções não-dominadas para o Problema 5 (funções objetivo destacadas em itálico).

	<b>Fração de vinhaça concentrada até 7,0 °Bx (%)</b>			
	14,90	35,90	58,25	98,43
<i>Vinhaça concentrada que deixa o processo (kg/h)</i>	274.402	224.915	172.267	77.577,0
<b>°Bx da vinhaça concentrada que deixa o processo</b>	1,88	2,30	3,00	6,67
<b>Fração de vapor de alta pressão destinada para a turbina de condensação (%)</b>	41,53	38,72	35,73	30,34
<i>Produção de energia total pelas duas turbinas (kW)</i>	83.165,1	82.053,3	80.870,5	78.743,0

Fonte: Elaborado pelo autor.

Na Tabela 22 nota-se que quando aumenta a fração de vinhaça destinada para a concentração diminui-se a fração de vapor destinada para a turbina de condensação e, com isso, há uma queda na geração de energia elétrica. A redução no volume de vinhaça variou de 11,34%, quando a fração de vinhaça a ser concentrada é de 14,90%, a 74,94%, para o valor de fração de vinhaça de 98,43%.

Fazendo-se uma análise global a partir dos resultados obtidos para todos os problemas de otimização estudados, nota-se que cada quilograma de bagaço destinado para o E2G produz em torno de 95 g de etanol. Há a produção de 4,10 kg de vapor de 65 bar para cada quilograma de biomassa seca quando se destina 0,01% do bagaço para o E2G, e de 4,12 kg de vapor de 65 bar para quilograma de biomassa seca quando se destina 50,09% do bagaço, mostrando que a corrente residual de hidrólise (vide Tabela 17) é mais eficiente para a queima do que o bagaço (devido ao maior poder calorífico da lignina). Segundo Paoliello (2006), a quantidade de vapor produzida por quilograma de bagaço úmido (50 % de umidade) varia entre 2,0 kg e 2,7 kg, ou seja, para cada quilograma de bagaço seco queimado se produz entre 4,0 kg e 5,4 kg de vapor. Nota-se que o valor obtido pela simulação está dentro desse intervalo. Desconsiderando a vazão de 35.000 kg/h de palha sendo queimada, para a situação de 50,09% de bagaço destinado para o E2G a corrente que alimenta a caldeira é constituída de 66,90 % de bagaço e 33,10% de corrente residual de hidrólise, enquanto para a situação de 0,01% de bagaço destinado para o E2G só há bagaço.

Comparando-se os problemas de otimização 3 e 5, já que tiveram as mesmas funções objetivo de maximizar a produção de energia elétrica e minimizar a vazão de vinhaça que deixa o processo, nota-se que no Problema 3, que tratava de um

processo de produção integrada de energia elétrica, E1G e E2G, a fração de vinhaça destinada para a concentração teve uma variação menor (36,03 – 99,80%) em comparação ao Problema 5, em que apenas E1G e energia elétrica eram produzidos (14,90 – 98,43%). Com isso, no Problema 5 foram encontradas soluções não-dominadas com maiores valores de geração de energia elétrica.

Nos cinco problemas estudados, a fração de bagaço destinado para o E2G teve o valor mínimo de 0,01% (Problema 5) e o valor máximo de 50,09% (Problema 2), a fração de vinhaça sendo concentrada variou de 14,90% (Problema 5) a 99,80% (Problema 3), a vazão de etanol variou de 35.730,0 kg/h (Problema 5) a 41.663,3 kg/h (Problema 2), a vazão de vinhaça que deixa o processo variou de 75.909,3 kg/h (Problema 3) a 388.963 kg/h (Problema 2), a energia elétrica produzida variou de 55.672,1 kW (Problema 2) a 83.165,1 kW (Problema 5) e o CO<sub>2</sub> gerado pelo processo variou de 166.021 kg/h (Problema 2) a 187.048 kg/h (Problema 5).

A fração de bagaço destinado para a produção de E2G não ultrapassa os 51% devido à necessidade de queimar uma quantidade de bagaço suficiente para atender a demanda energética da usina. Já a fração de vinhaça sendo desviada para concentração não deve ser inferior a 14%, já que, entre as soluções não-dominadas obtidas, há a necessidade de se produzir vapor vegetal a partir da vinhaça para complementar o vapor vegetal advindo do caldo, de modo a atender a demanda energética da etapa de destilação.

No quesito de complexidade, de modo geral, quando se aumenta o número de variáveis de decisão aumenta-se o tempo necessário para solução da otimização multiobjetivo e diminui-se o número de soluções não-dominadas. Ao aumentar o número de funções objetivo, diminui-se o tempo necessário para solução da otimização multiobjetivo e aumenta-se o número de soluções não-dominadas, devido à maior facilidade de se obtê-las. A quantidade de equipamentos na biorrefinaria também influencia na complexidade, já que quanto maior o número de equipamentos maior é o tempo necessário para solução da otimização multiobjetivo e menor é o número de soluções não-dominadas. Condições de operação como temperatura e vazão das correntes também influenciam no tempo necessário para solução da otimização multiobjetivo e no número de soluções não-dominadas.

## ***5 Considerações Finais e Sugestões para Trabalhos Futuros***

A simulação de uma usina autônoma de produção de etanol de primeira e de segunda geração faz-se importante para estudar os efeitos da mudança de condições de processo na geração de produtos de processo e no quesito ambiental.

Com o fechamento do circuito de água na etapa de limpeza e na etapa de cogeração, e com a integração energética conseguiu-se atender a resolução SMA Nº 88, estando o consumo de água abaixo de 1 m<sup>3</sup> por tonelada de cana moída, independentemente da produção de etanol de segunda geração.

Com a inserção de 3 componentes a mais na lista de componentes da simulação (CO, O<sub>2</sub> e N<sub>2</sub>) e adequando o modelo da caldeira e dos fermentadores, pode-se prever a quantidade de ar requerido para a queima do bagaço, como também, a quantidade de gases liberados na atmosfera.

Com a concentração do caldo por evaporadores de múltiplo efeito houve uma economia de vapor de escape de turbina da ordem de 18%. O vapor vegetal gerado nos evaporadores de primeiro efeito da concentração do caldo e da vinhaça foi usado para suprir a necessidade de vapor na coluna de destilação.

Na otimização multiobjetivo observou-se a influência da fração de bagaço destinado para a produção de E2G e da fração de vinhaça sendo concentrada nos evaporadores de múltiplo efeito na otimização simultânea de funções objetivo que representam aspectos ambientais e de processo.

Para a convergência do fluxograma simulado, a fração de bagaço destinada para a produção de E2G não deve ultrapassar os 51%, pois há a necessidade de uma quantidade mínima de bagaço para a queima para a geração de vapor para atender a demanda energética da planta. Já a fração de vinhaça sendo concentrada tem um valor mínimo de 14,9%, devido a geração de vapor vegetal necessário para a coluna de destilação. Se a biorrefinaria trabalhar fora desses valores pode não haver convergência ou o simulador pode fornecer valores sem consistência física.

A produção de etanol de primeira geração foi de 35.730 kg/h, e a produção máxima de etanol de segunda geração foi de 5.933,3 kg/h nas soluções não-dominadas.

O valor mínimo da vazão de vinhaça que deixa o processo é de 75.909,3 kg/h e pode atingir o valor máximo de 388.963 kg/h. A energia elétrica produzida pela usina varia entre 55.672 kW e 83.165 kW. A biorrefinaria pode produzir entre 166.021 kg/h e 187.048 kg/h de CO<sub>2</sub>.

O algoritmo de otimização utilizado mostrou-se eficiente, gerando soluções não-dominadas para uma melhor análise das opções disponíveis para a configuração da biorrefinaria. Os objetivos propostos foram atendidos. O principal problema enfrentado foi a utilização do software EMSO, devido à pouca experiência do autor com o programa.

### ***5.1 Sugestões para trabalhos futuros***

Alguns aspectos, não compreendidos no escopo deste trabalho, seriam dignos de maiores investigações e aprofundamentos.

Seria adequada uma análise econômica da biorrefinaria, envolvendo custos de equipamentos e operação. Essa análise acarretaria no estudo da viabilidade econômica de concentrar o caldo em evaporadores de múltiplo efeito para economia de vapor; da viabilidade econômica de concentrar a vinhaça para menor gasto em transporte; na análise de qual cenário seria mais vantajoso economicamente, se seria operar em condições de maximização da produção de etanol, de maximização da produção de energia elétrica ou de minimização da produção de vinhaça concentrada que deixa o processo.

Um estudo envolvendo uma usina que produzisse açúcar, etanol e energia elétrica simultaneamente seria de grande interesse para expandir a análise para a produção de açúcar também.

Seria interessante ainda expandir a quantidade de equipamentos, modelando outros equipamentos que poderiam contribuir para o quesito ambiental, como um lavador de gases, de modo a recuperar o etanol arrastado pelo dióxido de carbono na dorna de fermentação

Uma maior integração energética do processo para economia de utilidades quentes e frias, havendo uma maior economia no consumo de água e vapor, seria uma análise a ser estudada.

A análise de outros cenários, como diferentes configurações de caldeira, outros métodos de pré-tratamento do bagaço, lavagem a seco da cana e outras configurações poderiam contribuir para um aprofundamento de estudos multiobjetivos na biorrefinaria.

## ***Referências Bibliográficas***

AFFONSO, L. O. A.; BRAMBILLA, P. A.; RODRIGUES, M.; ALMEIDA, W. P. Análise de causa básica de falha em palheta de turbina a vapor. In: 6ª Conferência sobre Tecnologia de Equipamentos, 6ª COTEQ, 2012.

ALVES, M. Estudo de sistemas de cogeração em usinas de açúcar e álcool, com utilização do bagaço e palha da cana. 2011. 114 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2011.

AMORIM, E. A.; ROMERO, R.; MANTOVANI, J. R. S. Fluxo de potência ótimo descentralizado utilizando algoritmos evolutivos multiobjetivo. Sba Controle & Automação, Natal, v. 20, n. 2, 2009.

ANA, Agência Nacional de Águas; FIESP, Federação das Indústrias de São Paulo: ÚNICA, Manual de conservação e reuso de água na agroindústria sucroenergética. Brasília: 2009.

ANEEL, Agência Nacional de Energia Elétrica. Disponível em: <<http://www.aneel.gov.br>>. Acesso em: nov, 2014.

ANFAVEA - Associação Nacional dos Fabricantes de Veículos Automotores. Disponível em: <<http://www.anfavea.com.br>>. Acesso em: jan, 2015.

AYALA, H. V. H.; COELHO, L. S. A Multiobjective genetic algorithm applied to multivariable control optimization. In: 19th Congress of Mechanical Engineering - COBEM, 2007, Brasília. 2007, p. 1-10.

BADGER, P. C. Ethanol from cellulose: a general review. In: JANICK, J.; WHIPKEY, A. (Ed.). Trends in new crops and new uses. Alexandria: ASHS Press, p. 17-21, 2002.

BARRICO, C. M. C. S. Otimização Evolucionária Multi-Objectivo em ambientes Incertos – Pesquisa de Soluções Robustas. 2007. 119 p. Tese (Doutoramento em Engenharia Electrotécnica e de Computadores, Especialidade de Informática) - Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra, Coimbra, 2007.

CARVALHO, T. C.; SILVA, C. L. Redução da Quantidade de Vinhaça Através da Evaporação. Periódico Eletrônico Fórum Ambiental da Alta Paulista, v.6, p. 1-17. 2010.

CETESB – Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. Norma técnica P4.231 – Vinhaça Critérios e procedimentos para aplicação no solo agrícola. Disponível em: <[http://www.cetesb.sp.gov.br/Tecnologia/camaras/P4\\_231.pdf](http://www.cetesb.sp.gov.br/Tecnologia/camaras/P4_231.pdf)>. Acesso em: abril, 2015.

CITROTEC. Disponível em: <<http://www.citrotec.com.br/>>. Acesso em: abril, 2015.

CORTEZ, L.A.B.; GÓMEZ, E.O. A method for exergy analysis of sugarcane bagasse boilers. Braz. J. Chem. Eng., São Paulo, v. 15, n. 1, 1998.

DEDINI. Disponível em: <[http:// http://www.codistil.com.br/](http://http://www.codistil.com.br/)>. Acesso em: abril, 2015.

DIAS, M. O. S. Simulação do processo de produtivo de etanol a partir do açúcar e do bagaço, visando a integração do processo e a maximização da produção de energia e excedentes do bagaço. 2008. 253 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2008.

DIAS, M. O. S.; JUNQUEIRA, T. L.; JESUS, C. D. F.; ROSSELL, C. E. V.; MACIEL FILHO, R.; BONOMI, A. Improving second generation ethanol production through optimization of first generation production process from sugarcane, Energy, 43, p. 246–252, 2012.

EIBEN, A. E.; SMITH, J. E. Introduction to evolutionary computing. Natural Computing Series. Berlin: Springer, 2003.

ENSINAS, A. V.; CODINA, V.; MARECHAL, F.; ALBARELLI, J.; SILVA, M. A. Thermo-Economic Optimization of Integrated First and Second Generation Sugarcane Ethanol Plant. Chemical Engineering Transactions, 35, p. 523-528, DOI: 10.3303/CET1335087, 2013.

ENSINAS, A.V.; ARNAO, J. H. S.; NEBRA, S. A. Increasing energetic efficiency in sugar, ethanol, and electricity producing plants. In: CORTEZ, A. B.

Sugarcane bioethanol - R&D for Productivity and Sustainability. São Paulo: Editora Edgard Blücher, 2014. p. 583-600.

EQE038 – Simulação e otimização de processos químicos. Aula 1 – Simulação. Disponível em: <<http://www2.peq.coppe.ufrj.br/Pessoal/Professores/Arge/EQE038/>>. Acesso em: abril, 2015.

FLOUDAS C.A. Nonlinear and Mixed-Integer Optimization: Fundamentals and Applications. Oxford University Press, 1995. 462 p.

FURLAN, F. F. Desenvolvimento de ambiente integrado para simulação e otimização estática da produção de etanol a partir de bagaço de cana-de-açúcar por rota bioquímica. 2012. 108p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2012.

FURLAN, F. F.; GONÇALVES, J. A. S.; HENRIQUE, V. M.; SOARES, R. P.; SECCHI, A. R.; GIORDANO, R. C. Método robusto para simulação de coluna de destilação em simuladores baseados em equações: o caso da purificação de bioetanol. In: XVIII Congresso Brasileiro de Engenharia Química, COBEQ 2010, v. 1, p. 3080-3087, 2010.

FURLAN, F. F.; COSTA, C. B. B.; FONSECA, G. C.; SOARES, R. P.; SECCHI, A. R.; CRUZ, A. J. G.; GIORDANO, R. C. Assessing the production of first and second generation bioethanol from sugarcane through the integration of global optimization and process detailed modeling. Computers & Chemical Engineering, v. 43, p. 1–9, 2012.

GOLDEMBERG, J.; GUARDABASSI, P. The potential for first generation ethanol production from sugarcane. Biofuels, Bioproduction and Biorefining, v. 4, p. 17-24, 2009.

GONÇALES, L. C. G.; FURLAN, F. F.; SOARES, R. P.; SECCHI, A. R.; GIORDANO, R. C.; COSTA, C. B. B. Implementation of Pareto Multiobjective Particle Swarm Optimization Algorithm in EMSO. In: EngOpt 2012 - 3rd International Conference on Engineering Optimization, 2012, Rio de Janeiro. EngOpt 2012 - 3rd International Conference on Engineering Optimization, 2012, v. 1, p. 1-7.

GRANATO, E. F. Geração de energia através da biodigestão anaeróbica da vinhaça. Dissertação (Mestrado em Engenharia Industrial) Universidade Estadual Paulista, Bauru, SP, 2003.

HAMELINCK, C. N.; HOOIJDONK, G. V.; FAAIJ, A. P. C. Ethanol from lignocellulosic biomass: techno-economic performance in short-, middle- and long-term. *Biomass and Bioenergy*, v. 28, p. 384–410, 2005.

HUGOT, E. *Handbook of Cane Sugar Engineering*, 3th. edition, ELSEVIER, New York, 1986. 1166 p.

INPI - Instituto Nacional da Propriedade Industrial. GIORDANO, R. L. C.; GIORDANO, R. C.; ZANGIROLAMI, T. C.; TARDIOLI, P. W.; KOPP, W.; MILESSI T. S. S.; SILVA, C. R.; CAVALCANTI-MONTANO, I. D.; GALEANO-SUAREZ, C. A.; ROJAS, M. J.; AQUINO, P. M.; SILVA, F. A. Sistema catalítico e processo de obtenção de bioetanol 2G a partir de xilana/oligômeros de xilose. Número do registro: BR102014023394, 19 set 2014.

JESUS, C. D. F. Desenvolvimento de simulador dinâmico do processo de produção de açúcar cristal. 2000. 131 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2000.

KUMAR, S., SINGH, N., PRASAD, R. Anhydrous ethanol: A renewable source of energy. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 14, p. 1830-1844, 2010.

LINO, A. R. A. Implementação do Processo de Produção de Açúcar no Simulador de Processos EMSO. 2013. 38 p. Relatório Final do Projeto de Pesquisa – Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2013.

LIMA, A. M. Estudos recentes e perspectivas da viabilidade técnico-econômica da produção de etanol lignocelulósico. 1ª Ed. Versão Eletrônica. Circular Técnica 05, Brasília: Embrapa Agroenergia, 2011.

MIRANDA, F. C. A.; CAMELO, M. C. S.; LUCENA, S. Simulação e estudo da integração de unidades produtoras de etanol, *Scientia Plena*, v. 9, Num. 5, 059910, 2013.

MOSIER, N.; WYMAN, C. E.; DALE, B. E.; ELANDER, R. T.; LEE, Y. Y.; HOLTZAPPLE, M.; LADISCH, M. Features of promising technologies for pretreatment of lignocellulosic biomass, *Biores Technol*, v. 96, p. 673-686, 2005.

MURPHY, J. D.; MCCARTHY, K. Ethanol production from energy crops and wastes for use as a transport fuel in Ireland, *Applied Energy*, v. 82, p. 148–166, 2005.

NEUREITER, M.; DANNER, H.; THOMASSER, C.; SAIDI, B.; BRAUN, R. Dilute-acid hydrolysis of sugarcane bagasse at varying conditions, *Applied Biochemistry and Biotechnology*, v.98-100, p .49-58, 2002.

OLIVEIRA, C. M. Integração energética da biorrefinaria de cana-de-açúcar para produção de etanol de primeira e segunda geração e energia elétrica. 2014. 101 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2014.

PAOLIELLO, J. M. M. Aspectos Ambientais e Potencial Energético no Aproveitamento de Resíduos da Indústria Sucroalcooleira. 2006. 180 p. Dissertação (Mestre em Engenharia Industrial) – UNESP, Bauru, 2006.

PELLEGRINI, L. F.; OLIVEIRA JUNIOR, S. Combined production of sugar, ethanol and electricity: Thermoeconomic and environmental analysis and optimization, *ENERGY*, v.36, p.3704-3715, 2011.

PINHEIRO, P. C. C.; VALLE, R. M. Controle de Combustão: Otimização do Excesso de Ar. In: II Congresso de Equipamentos e Automação da Indústria Química e Petroquímica, 1995, Rio de Janeiro. Anais do II Congresso de Equipamentos e Automação da Indústria Química e Petroquímica. Rio de Janeiro, RJ: ABIQUIM, 1995. v. 1. p. 157-162.

PRIMO, K. R.; SALOMON, K. R.; TEIXEIRA, F. N.; LORA, E. S. Evaluation of the atmospheric dispersion of the nitrogen oxides released during the burning of bagasse. *Sugar Industry*, v. 131, p. 239-245, 2006.

RABELO, S. C. Avaliação e otimização de pré-tratamentos e hidrólise enzimática do bagaço de cana-de-açúcar para a produção de etanol de segunda geração. 2010. 414 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) - Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2010.

RAO, S. S., *Engineering Optimization: Theory and Practice*, 4th Edition, Wiley, New York, 2009. 813 p.

RAQUEL, C. R.; NAVAL, Jr. P. C. An effective use of crowding distance in multiobjective particle swarm optimization. In Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference – GECCO, 2005, New York. p. 257–264, 2005.

REZENDE, C. A.; LIMA, M. A.; MAZIERO, P.; AZEVEDO, E. R.; GARCIA, W.; POLIKARPOV, I. Chemical and morphological characterization of sugarcane bagasse submitted to delignification process for enhanced enzymatic digestibility. *Biotechnology for Biofuels*, 4:54, 2011.

RIVERA, E.C; GERALDO, V. C.; SANGHIKIAN, N.; JUNQUEIRA, T. L.; CAPITANI, D. H. D.; JESUS, C. D. F.; FILHO, R. M.; BONOMI, A. A screening design to analyze the influence of technological configurations on Techno-economic parameters for autonomous distilleries in Brazil. *Chemical Engineering Transactions*, v. 37, p. 307-312, 2014.

RODRIGUES, R.; SOARES, R.; SECCHI, A. Teaching chemical reaction engineering using EMSO simulator. *Computer Applications in Engineering Education*, v. 18, n. 4, p. 607-618, 2010.

SALOMON, K. R. Avaliação técnico-econômica e ambiental da utilização do biogás proveniente da biodigestão da vinhaça em tecnologias para geração de eletricidade. 2007. 219 p. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, 2007.

SANTOS, D. S. Produção de Etanol de Segunda Geração por *Zymomona mobilis* Naturalmente Ocorrente e Recombinante, Empregando Diferentes Estratégias de Processamento da Biomassa Lignocelulósica. 2012. 218 p. Tese (Doutorado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2012.

SANTOS, F. A.; QUEIROZ, M. E. L. R.; QUEIROZ, J. H.; De QUEIROZ, J. H.; Colodette, J. L.; MANFREDI, M.; CALDAS, C. S.; SOARES, F. E. F. Otimização do pré-tratamento hidrotérmico da palha de cana-de-açúcar visando à produção de etanol celulósico. *Química Nova (Impresso)*, v. 37, p. 56-62, 2013.

SARKAR, N.; GHOSH, S. K.; BANNERJEE, S.; AIKAT, K. Bioethanol production from agricultural wastes: An overview. *Renewable Energy*, v. 37, p. 19-27, 2012.

SMA – Secretaria do Estado do Meio Ambiente do Estado de São Paulo. Resolução SMA N° 88 de 19 de dezembro de 2008. São Paulo, 2008. Disponível em: <<http://www.ambiente.sp.gov.br/etanolverde>>. Acesso em: maio, 2014.

SERMASA. Disponível em: <<http://www.sermasa.com.br/pt/>>. Acesso em: abril, 2015.

SHARMIN, F.; HUYGENS, F.; HARGREAVES, M. A review of pentose utilizing bacteria from bagasse hemicellulose. *African Journal of Microbiology Research*, v. 7, p. 2694-2700, 2013.

SILVA, N. L. C. Produção de bioetanol de segunda geração a partir de biomassa residual da indústria de celulose. 2010. 109 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2010.

SOARES, R. P.; SECCHI, A.R. EMSO: A new environment for modelling, simulation and optimization. *Comput. Aided Chem. Eng.*, v. 14, p. 947-952, 2003.

SOARES, R. P. Desenvolvimento de um Simulador Genérico de Processos Dinâmicos. 2003. 104 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Escola de Engenharia. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2003.

TAHERZADEH, M. J.; KARIMI, K. Acid-based hydrolysis processes for ethanol from lignocellulosic materials: A review. *BioResources*, v. 2, p. 472–499, 2007.

UNICA - UNIÃO DA INDÚSTRIA DE CANA-DE-AÇÚCAR, Disponível em: <<http://www.unica.com.br/>> Acesso em: jan, 2015.

VRTECH, VRTherm manual do usuário, 2005.

ZANIN, G. M.; SANTANA, C. C.; BON, E. P. S.; GIORDANO, R. C. L.; MORAES, F. F.; ANDRIETTA, S. R.; NETO, C. C. C.; MACEDO, I. C.; LAHR, D.; RAMOS, L. P.; FONTANA, J. D. Brazilian bioethanol program. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, v. 84, n. 1, p. 1147 - 1161, 2000.

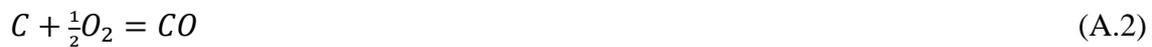
## *Apêndice*

### *A1 - Balanço estequiométrico envolvendo a proporção molar de saída de CO/CO<sub>2</sub> (f)*

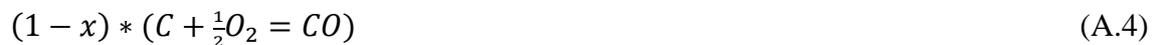
Combustão completa:



Combustão incompleta:



Considerando um caso em que ocorra uma fração “x” de combustão completa e uma fração “(1-x)” de combustão incompleta teremos:



Somando as duas frações:



Considerando que:

$$f = \frac{n_{CO}}{n_{CO_2}} = \frac{1-x}{x} \quad (\text{A.6})$$

Isolando x:

$$x = \frac{1}{1+f} \quad (\text{A.7})$$

Substituindo o valor de x obtemos:



Ou:

$$C_n + n * \left(\frac{2+f}{2+2f}\right) * O_2 = n * \left(\frac{1}{1+f}\right) * CO_2 + n * \left(\frac{f}{1+f}\right) * CO \quad (A.9)$$

Para a molécula de celulose temos:

$$C_6H_{10}O_5 = C_6 + 5H_2O \quad (A.10)$$

$$C_6 + 5H_2O + 6 * \left(\frac{2+f}{2+2f}\right) * O_2 = 6 * \left(\frac{1}{1+f}\right) * CO_2 + 6 * \left(\frac{f}{1+f}\right) * CO + 5H_2O \quad (A.11)$$

$$C_6H_{10}O_5 + 6 * \left(\frac{2+f}{2+2f}\right) * O_2 = 6 * \left(\frac{1}{1+f}\right) * CO_2 + 6 * \left(\frac{f}{1+f}\right) * CO + 5H_2O \quad (A.12)$$

Para a celulose o  $n$  é igual a 6.

Para a molécula de hemicelulose temos:

$$C_5H_8O_4 = C_5 + 4H_2O \quad (A.13)$$

$$C_5 + 4H_2O + 5 * \left(\frac{2+f}{2+2f}\right) * O_2 = 5 * \left(\frac{1}{1+f}\right) * CO_2 + 5 * \left(\frac{f}{1+f}\right) * CO + 4H_2O \quad (A.14)$$

$$C_5H_8O_4 + 5 * \left(\frac{2+f}{2+2f}\right) * O_2 = 5 * \left(\frac{1}{1+f}\right) * CO_2 + 5 * \left(\frac{f}{1+f}\right) * CO + 4H_2O \quad (A.15)$$

Para a hemicelulose o  $n$  é igual a 5.

Para a lignina temos:

$$C_{7,3}H_{13,9}O_{1,3} + 2,825O_2 = C_{7,3} + 6,95H_2O \quad (A.16)$$

$$C_{7,3} + 6,95H_2O + 7,3 * \left(\frac{2+f}{2+2f}\right) * O_2 = 7,3 * \left(\frac{1}{1+f}\right) * CO_2 + 7,3 * \left(\frac{f}{1+f}\right) * CO + 6,95H_2O \quad (A.17)$$

$$C_{7,3}H_{13,9}O_{1,3} + 2,825O_2 + 7,3 * \left(\frac{2+f}{2+2f}\right) * O_2 = 7,3 * \left(\frac{1}{1+f}\right) * CO_2 + 7,3 * \left(\frac{f}{1+f}\right) * CO + 6,95H_2O \quad (A.18)$$

$$C_{7,3}H_{13,9}O_{1,3} + \left(2,825 + 7,3 * \left(\frac{2+f}{2+2f}\right)\right) * O_2 = 7,3 * \left(\frac{1}{1+f}\right) * CO_2 + 7,3 * \left(\frac{f}{1+f}\right) * CO + 6,95H_2O \quad (A.19)$$

Para a lignina o  $n$  é igual a 7,3.

## A2 - Tabelas das soluções não-dominadas obtidas pelo EMSO

Tabela A1 – Valores obtidos na otimização do Problema 1.

<b>Fração de bagaço destinado para o E2G</b>	<b>Fração de vinhaça destinada para a concentração</b>	<b>Vinhaça que deixa o processo (kg/h)</b>	<b>Etanol produzido (kg/h)</b>
0,0078	0,9183	94.748,5	35.821,2
0,0109	0,9183	95.413,4	35.858,1
0,0366	0,9354	96.756,4	36.162,9
0,0411	0,9389	96.881,0	36.216,4
0,0648	0,9556	97.757,8	36.496,2
0,0926	0,9642	101.434	36.826,3
0,1122	0,9613	106.179	37.058,1
0,1255	0,9687	107.109	37.216,6
0,1637	0,9777	112.675	37.668,7
0,1729	0,9607	118.917	37.778,0
0,1946	0,9624	122.957	38.034,5
0,2122	0,9497	129.908	38.244,2
0,2231	0,9210	139.649	38.372,6
0,2438	0,9342	140.544	38.618,1
0,2648	0,9456	141.939	38.866,9
0,3033	0,9181	157.392	39.322,6
0,3194	0,8838	170.156	39.514,1
0,3564	0,8846	177.903	39.952,1
0,3769	0,8377	195.379	40.194,8
0,4094	0,7584	224.937	40.578,9
0,4164	0,7364	232.759	40.662,0
0,4230	0,6544	257.542	40.739,7
0,4306	0,5677	284.071	40.829,8
0,4693	0,4490	328.133	41.288,5

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela A2 – Valores obtidos na otimização do problema 2.

<b>Fração de bagaço destinado para o E2G</b>	<b>Fração de vinhaça destinada para a concentração</b>	<b>Energia elétrica produzida (kW)</b>	<b>Etanol produzido (kg/h)</b>
0,0005	0,5388	81.078,3	35.735,1
0,0192	0,5316	80.109,2	35.956,4
0,0194	0,7819	78.763,6	35.959,1
0,0719	0,3192	78.428,1	36.581,1
0,0799	0,3383	77.898,7	36.675,6
0,1111	0,2490	76.721,7	37.045,8
0,1153	0,3868	75.739,0	37.095,6
0,1174	0,5243	74.873,3	37.119,6
0,1453	0,4011	74.058,8	37.450,3
0,1490	0,4590	73.533,7	37.495,2
0,1723	0,2840	73.271,1	37.770,3
0,1761	0,4094	72.364,1	37.815,4
0,1878	0,4003	71.787,5	37.954,4
0,2120	0,3181	70.960,5	38.240,9
0,2180	0,5135	69.528,7	38.311,9
0,2675	0,2638	68.309,4	38.899,0
0,2895	0,2795	67.046,7	39.158,9
0,3048	0,2902	66.162,6	39.341,1
0,3151	0,4308	64.787,3	39.462,9
0,3288	0,4140	64.149,7	39.625,4
0,3359	0,3943	63.885,4	39.709,5
0,3542	0,4165	62.776,7	39.925,3
0,3753	0,3266	62.179,5	40.175,8
0,3977	0,2887	61.209,2	40.441,2
0,4015	0,3756	60.486,9	40.485,2
0,4278	0,3179	59.427,1	40.797,1
0,4428	0,3878	58.196,3	40.975,0
0,4693	0,2384	57.700,1	41.288,0
0,4838	0,2984	56.555,3	41.459,9
0,5009	0,2929	55.672,1	41.663,3

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela A3 – Valores obtidos na otimização do Problema 3.

<b>Fração de bagaço destinado para o E2G</b>	<b>Fração de vinhaça destinada para a concentração</b>	<b>Vinhaça que deixa o processo (kg/h)</b>	<b>Energia elétrica produzida (kW)</b>
0,0044	0,3603	225.801	81.814,4
0,0026	0,4877	195.246	81.234,7
0,0052	0,5219	187.853	80.914,4
0,0069	0,5253	187.475	80.807,7
0,0043	0,5710	176.023	80.702,4
0,0069	0,5752	175.682	80.541,2
0,0063	0,5846	173.296	80.523,5
0,0072	0,5944	171.202	80.423,3
0,0109	0,6010	170.580	80.186,2
0,0059	0,6666	153.828	80.108,8
0,0054	0,6750	151.737	80.092,2
0,0071	0,7060	144.808	79.834,8
0,0069	0,7100	143.828	79.824,5
0,0033	0,8119	118.925	79.481,7
0,0075	0,8164	118.786	79.228,6
0,0047	0,8466	111.037	79.218,8
0,0010	0,9306	90.408,3	78.980,4
0,0016	0,9410	88.090,3	78.892,3
0,0005	0,9614	83.057,0	78.839,7
0,0013	0,9677	81.731,6	78.766,7
0,0047	0,9774	80.156,1	78.525,9
0,0047	0,9854	78.306,4	78.468,4
0,0061	0,9874	78.062,0	78.400,9
0,0060	0,9910	77.185,0	78.384,9
0,0061	0,9925	76.858,1	78.369,0
0,0068	0,9962	76.132,0	78.310,7
0,0074	0,9973	75.979,9	78.275,7
0,0078	0,9980	75.909,3	78.248,2

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela A4 – Valores obtidos na otimização do Problema 4.

<b>Fração de bagaço destinado para o E2G</b>	<b>Fração de vinhaça destinada para a concentração</b>	<b>Vinhaça que deixa o processo (kg/h)</b>	<b>CO<sub>2</sub> gerado (kg/h)</b>	<b>Energia elétrica produzida (kW)</b>	<b>Etanol produzido (kg/h)</b>
0,0290	0,2395	261.399	185.835	81.145,4	36.072,3
0,0310	0,3848	227.244	185.752	80.263,3	36.095,7
0,1213	0,2411	287.622	181.961	76.225,5	37.166,0
0,1423	0,8313	145.157	181.076	71.826,2	37.415,6
0,1534	0,2752	288.244	180.614	74.327,4	37.546,3
0,2031	0,2098	319.316	178.523	72.044,9	38.136,4
0,2067	0,1755	329.230	178.376	72.052,3	38.178,1
0,2097	0,3626	281.591	178.250	70.830,8	38.213,6
0,2197	0,2045	325.527	177.829	71.196,2	38.332,3
0,2269	0,3997	276.637	177.526	69.698,1	38.417,8
0,2297	0,1893	332.426	177.407	70.747,8	38.451,6
0,2407	0,1904	335.370	176.946	70.158,6	38.581,6
0,2688	0,3741	294.785	175.766	67.601,2	38.914,5
0,2795	0,8570	168.689	175.319	64.227,3	39.040,7
0,2891	0,3384	309.946	174.913	66.720,6	39.155,2
0,3283	0,3393	320.598	173.269	64.620,6	39.618,8
0,3428	0,9170	166.087	172.659	60.419,7	39.791,1
0,3508	0,2867	341.348	172.325	63.730,3	39.885,0
0,3671	0,6208	253.350	171.640	60.864,3	40.078,2
0,3722	0,5068	286.283	171.427	61.270,9	40.138,5
0,4039	0,3264	345.258	170.094	60.652,1	40.514,3
0,4051	0,4987	297.086	170.045	59.548,8	40.528,2
0,4205	0,2935	359.227	169.398	59.964,6	40.710,8
0,4455	0,3224	358.046	168.348	58.452,8	41.006,8
0,4674	0,3755	348.859	167.428	56.954,2	41.266,3
0,4818	0,3674	355.126	166.826	56.235,3	41.436,2
0,4833	0,3846	350.535	166.763	56.048,3	41.454,0
0,4902	0,3617	359.111	166.472	55.819,4	41.536,0

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela A5 – Valores obtidos na otimização do Problema 5.

<b>Fração de vinhaça destinada para a concentração</b>	<b>Vinhaça que deixa o processo (kg/h)</b>	<b>Energia elétrica produzida (kW)</b>
0,1490	274.402	83.165,1
0,1725	268.877	83.041,0
0,1965	263.211	82.913,7
0,2170	258.373	82.805,0
0,2414	252.638	82.676,1
0,2687	246.188	82.531,2
0,2934	240.377	82.400,7
0,3103	236.406	82.311,4
0,3294	231.891	82.210,0
0,3590	224.915	82.053,3
0,3808	219.779	81.937,8
0,3993	215.415	81.839,8
0,4286	208.520	81.685,0
0,4553	202.232	81.543,7
0,4884	194.425	81.368,3
0,5197	187.061	81.202,9
0,5448	181.128	81.069,6
0,5767	173.624	80.900,9
0,5824	172.267	80.870,5
0,6078	166.303	80.736,5
0,6404	158.613	80.563,7
0,6807	149.109	80.350,2
0,7158	140.853	80.164,5
0,7616	130.053	79.922,0
0,7993	121.162	79.722,2
0,8158	117.291	79.635,3
0,8708	104.317	79.343,7
0,9045	96.367,1	79.165,1
0,9843	77.577,0	78.743,0

Fonte: Elaborado pelo autor.