



Universidade Federal de Alagoas – UFAL
Unidade Acadêmica Centro de Tecnologia – CTEC



UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
CAMPUS A. C. SIMÕES
UNIDADE ACADÊMICA CENTRO DE TECNOLOGIA
CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA

JOÃO RICARDO CARVALHO SOLETTI

**MODELAGEM, SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE ABSORÇÃO
GASOSA, VISANDO A RECUPERAÇÃO DO ETANOL EVAPORADO,
DURANTE A FERMENTAÇÃO ALCÓOLICA**

Maceió
2022

JOÃO RICARDO CARVALHO SOLETTI

**MODELAGEM, SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE ABSORÇÃO
GASOSA, VISANDO A RECUPERAÇÃO DO ETANOL EVAPORADO,
DURANTE A FERMENTAÇÃO ALCOÓLICA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao curso de engenharia química da Universidade Federal de Alagoas, como requisito parcial à obtenção do título de Bacharelado em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Rodolfo Junqueira Brandão

Maceió
2022

Catálogo na Fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecário: Marcelino de Carvalho Freitas Neto – CRB-4 – 1767

S685m Soletti, João Ricardo Carvalho.
Modelagem, simulação e otimização do processo de absorção gasosa, visando a recuperação do etanol evaporado, durante a fermentação alcoólica / João Ricardo Carvalho Soletti. – 2022.
55 f. il. : figs. ; tabs. color.

Orientador: Rodolfo Junqueira Brandão.
Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso em Engenharia Química).
Universidade Federal de Alagoas. Centro de Tecnologia. Maceió, 2022.

Bibliografia: f. 44-46.
Anexos: f. 47-55.

1. Absorção. 2. Etanol. 3. Simulação. 4. ASPEN HYSYS V.10 (Software).
I. Título.

CDU: 661.188.7



UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS -
UFAL
UNIDADE ACADÊMICA CENTRO DE
TECNOLOGIA
CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA



JOÃO RICARDO CARVALHO SOLETTI

Modelagem, simulação e otimização do processo de absorção gasosa, visando a recuperação do etanol evaporado, durante a fermentação alcoólica.

BANCA EXAMINADORA

Documento assinado digitalmente
gov.br RODOLFO JUNQUEIRA BRANDÃO
Data: 10/11/2022 12:19:56-0300
Verifique em <https://verificador.iti.br>

Prof. Dr. Rodolfo Junqueira Brandão

Documento assinado digitalmente
gov.br ALBANISE ENIDE DA SILVA
Data: 07/12/2022 09:57:51-0300
Verifique em <https://verificador.iti.br>

Prof. Dr. Albanise Enilde da Silva

Documento assinado digitalmente
gov.br FREDE DE OLIVEIRA CARVALHO
Data: 02/12/2022 10:36:04-0300
Verifique em <https://verificador.iti.br>

Prof. Dr. Frede de Oliveira Carvalho

Dedico este trabalho aos meus pais.

AGRADECIMENTOS

Quero primeiramente agradecer aos meus pais por estarem sempre ao meu lado, me ajudando nessa jornada;

Ao Rodolphinho, por não ter me esganado no meio do caminho;

Ao Mozart, por não questionar meus métodos de deixar as coisas para a última hora;

Ao Frede, por permitir a utilização das redes neurais e algoritmos evolucionários;

Ao Rafael e Aline, por terem sido exemplos de conduta na minha sala;

Ao Elber, por ser essa linda e maravilhosa pessoa que ele é;

A Carolina e o Marcos, nosso grupo não seria o mesmo sem vocês;

Ao Leozinho, por me encher o saco me perguntando “e o TCC?”;

E por último, mas não menos importante, a Gabi por me dar apoio e auxílio nessa jornada.

Epígrafe

“Palavras bonitas não mudam o mundo.”

(Lelouch Vi Britannia, 2006).

RESUMO

A produção do álcool etílico, ou ainda etanol, vem ganhando destaque mundial como biocombustível, principalmente para uso automotivo, por se tratar de uma fonte energética renovável e menos poluente. É amplamente utilizado na fabricação de bebidas e como matéria prima em indústrias diversas. No Brasil, é obtido através da fermentação alcoólica do caldo extraído da cana-de-açúcar. Porém, durante o processo fermentativo parte do etanol é arrastado pelo CO₂ produzido. Para evitar perdas no processo, passaram-se a utilizar um sistema de dornas fechadas acopladas por uma coluna de absorção para a recuperação do álcool. Desta forma, este estudo visa a otimização do processo de absorção gasosa proveniente das usinas de produção de álcool, utilizando o software *ASPEN HYSYS V.10*. A simulação foi feita levando em consideração o dimensionamento da coluna e suas variáveis de processo como, pressão, temperatura e vazão de água. Foram obtidos dados da Usina Caeté S/A para realização deste trabalho. A coluna de absorção foi projetada levando em consideração os dados fornecidos referentes ao processo de fermentação, com o objetivo de recuperar o máximo de álcool, gerando um caudal com percentual alcoólico próximo ao do vinho gerado pela usina. Foi projetado um sistema, utilizando-se de otimização por meio de redes neurais, para cumprimento do objetivo proposto recuperando 99,24% do álcool no processo.

Palavras-chave: absorção; etanol; simulação; *ASPEN*; redes neurais.

ABSTRACT

For being a renewable and less polluting energy source, ethanol production has been gaining worldwide prominence as a fuel source. It is a product widely used as a biofuel, in the manufacture of beverages and as a raw material in several industries. In Brazil, it is obtained through the alcoholic fermentation of the juice extracted from the cane. However, during the fermentation process, part of the ethanol is dragged by the CO₂ produced. To avoid losses in the process, a system of closed tanks coupled by an absorption column is used for the recovery of alcohol. This project aims to study and optimize the process of gas absorption from alcohol production plants, using ASPEN HYSYS V.10 software. The simulation was carried out taking into account the dimensioning of the column and its process variables such as pressure, temperature and water flow. Data was obtained from Usina Caeté S/A for this work. The absorption column was designed taking into account the data provided regarding the fermentation process, with the objective of recovering the maximum amount of alcohol, generating a flow with an alcoholic percentage close to that of the wine generated by the plant. A system was designed, using optimization through neural networks to fulfill the proposed objective, recovering 99.24% of the alcohol in the process.

Keywords: absorption; ethanol; simulation; *ASPEN*; neural network.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	- Processo de produção do etanol.	18
Figura 2	- Nossa jornada acadêmica: parte	20
Figura 3	- Coluna com enchimento e coluna de pratos perfurados.	21
Figura 4	- Metodologia de determinação das composições interfaciais e fictícias.	25
Figura 5	- Vista das colunas de absorção.	29
Figura 6	- Simulação da coluna de absorção no pacote computacional Aspen Hysys.	29
Figura 7	- Simulação da coluna de absorção para variação da pressão.	29
Figura 8	- Simulação da coluna de absorção para variação da temperatura.	30
Figura 9	- Curva de operação da coluna de absorção.	32
Figura 10	- Curva de operação da coluna de absorção de 5 pratos.	34
Figura 11	- Coluna de absorção de 5 pratos e suas variáveis.	35
Figura 12	- Coluna de absorção de recheio e suas variáveis.	36
Figura 13	- Curva de operação da coluna de absorção de recheio.	36
Figura 14	- Especificações físicas das correntes simuladas.	38
Figura 15	- Coluna de absorção de recheio para análise da pressão.	39
Figura 16	- Gráfico de dispersão de aptidão da rede neural.	41

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	- Algumas propriedades do etanol.	16
Tabela 2	- Especificações do álcool anidro e álcool hidratado.	18
Tabela 3	- Médias diárias de produção referentes a safra 2021/2022.	31
Tabela 4	- Composição dos produtos da absorção da coluna de 5 pratos.	33
Tabela 5	- Composição da corrente aquosa após tratamento.	37
Tabela 6	- Composição do produto da absorção da coluna de recheio.	39
Tabela 7	- Diferença dos dados operacionais da coluna de recheio	40
Tabela 8	- Fração mássica das correntes da coluna de absorção	40
Tabela 9	- Resultados obtidos da otimização por diferencial evolution	42
Tabela 10	- Fração mássica das correntes da coluna de absorção	42

LISTA DE SÍMBOLOS

x	Composição molar da fase líquida (%)
x_i	Composição global inicial real
x_f	Composição global inicial fictícia
y	Composição molar da fase vapor (%)
y_i	Composição global inicial real
y_f	Composição global inicial fictícia
N_A	fluxo molar de A
$k_{G,L}$	coeficiente de transferência de massa entre o sólido e o líquido
A	área de interface entre os compostos
ΔC_A	variação da concentração de A
C	vetor de concentração
D_{ab}	difusividade molecular de A em mistura binária de A e B
P	Pressão
R	Constante dos gases
T	Temperatura
p_{A1}	pressões parciais de A mantidas constantes nos extremos do percurso de difusão
k_x	taxa de reação para em frações molares para líquido
k_y	taxa de reação para em frações molares para gases
k_{Ox}	o coeficiente de transferência de massa, expressado em termo da força motriz da fase líquida
k_{Oy}	coeficiente de transferência de massa, expressado em termo da força motriz da fase gasosa

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
2	OBJETIVOS	15
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	16
3.1	Etanol	16
3.2	Processo de produção de etanol	17
3.3	Sistema de dornas fechadas	18
3.4	Recuperação do etanol durante o processo de fermentação	19
3.4.1	Absorção	19
3.4.2	Tipos de coluna de absorção	21
3.4.3	Reintegração do álcool no sistema	22
3.5	Modelagem e simulação do processo de absorção	23
3.6	Redes neurais e <i>diferrential Evolution</i>	26
4	METODOLOGIA	27
4.1	Obtenção e análise das variáveis de projeto	27
4.2	Simulação	28
4.3	Otimização utilizando redes neurais	30
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	31
5.1	Análise dos dados de uma coluna de absorção	31
5.2	Simulações	32
5.2.1	Análise do tipo de coluna	33
5.2.2	Análise da Temperatura	37
5.2.3	Avaliação do efeito da pressão	39
5.3	Otimização utilizando redes neurais	40
6	CONCLUSÃO	43
	REFERÊNCIAS	44
	ANEXO A – ANN	47
	ANEXO B –Código do OptimizationDE	52

1 INTRODUÇÃO

A produção de etanol como fonte de combustível vem ganhando destaque mundial, por se tratar de uma fonte energética renovável e menos poluente. O etanol pode ser produzido a partir da cana de açúcar, de forma mais econômica que o petróleo (SILVA, 2007). O Brasil é líder absoluto na produção de etanol obtido a partir da cana de açúcar, apresentando grande importância no setor econômico (GUEVARA et al., 2017).

O álcool etílico, também conhecido por etanol (C_2H_6O), é obtido pelo processo de fermentação de açúcares. Trata-se de um produto amplamente utilizado como biocombustível, na fabricação de bebidas e como matéria prima em indústrias diversas como: perfumaria, solventes, tintas, vernizes, dentre outras. É utilizado como desinfetante em serviços de saúde e, mais recentemente, utilizado de forma generalizada pela população, devido a pandemia do COVID 19. Para comercialização, apresenta-se na forma de álcool PA (puro para análise), anidro, hidratado, e com concentração de 70° INPM (percentagem em massa). Além de sua utilização como combustível na forma de álcool anidro, em 2007, a Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP), determinou pela Portaria nº 143 do Ministério da agricultura, Pecuária e Abastecimento, que o percentual obrigatório de etanol anidro na gasolina é de 25%, (MAPA, 2007).

Na safra 2021/2022 a produção mundial de etanol foi de aproximadamente 40 bilhões de litros, sendo Brasil e Estados Unidos responsáveis por 70% desta produção. Apesar das tecnologias avançadas, no Brasil, várias etapas do processo de produção necessitam de estudos mais aprofundados, dentre eles, a etapa de recuperação de etanol evaporado nas dornas de fermentação, através do processo de absorção gasosa.

No Brasil, o etanol é obtido através da fermentação alcoólica do caldo da cana-de-açúcar. O caldo é transportado para as dornas, onde ocorre a fermentação utilizando a levedura *Saccharomyces cerevisiae*. Em seguida, a suspensão de mosto fermentado é centrifugada, para a remoção das leveduras, obtendo um mosto delevedurado com 8 a 12% de etanol, em massa. O álcool hidratado e o anidro são obtidos pela destilação fracionada do mosto delevedurado.

Durante a fermentação, parte do etanol é evaporado e arrastado pelo CO_2 produzido no processo. Para sua recuperação é necessário que a fermentação ocorra

em dornas fechadas. Para recuperação do álcool arrastado utiliza-se colunas de absorção, com água a temperatura ambiente, em contracorrente com o gás. A quantidade de álcool evaporado varia em função de: concentração do álcool no mosto; temperatura do mosto fermentado; e, projeto das dornas de fermentação. No processo de recuperação, tem-se uma corrente gasosa formada majoritariamente por etanol e gás carbônico (CO₂). Essa corrente alimenta as colunas de absorção gasosa para a recuperação do álcool.

Devido a sua importância no setor econômico e energético do país, o estudo e melhoria do processo produtivo do etanol é essencial. O aumento da eficiência da coluna de adsorção, na recuperação do álcool, apresenta-se como relevante no custo final do processo.

2 OBJETIVOS

Geral

Modelagem, simulação e otimização do processo de absorção da solução alcoólica, evaporada e arrastada pelo CO₂, proveniente das dornas de fermentação, no processo de produção de álcool da Usina Caeté S/A.

Específicos

- Estudo da modelagem de uma coluna de absorção;
- Levantamento dos dados operacionais da coluna de absorção da Usina Caeté Matriz;
- Desenvolvimento e implementação do modelo matemático da coluna de absorção gasosa;
- Simulação, otimização do sistema de absorção do etanol arrastado pelo CO₂; e, obtenção dos resultados.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo serão apresentadas as características do álcool etílico, também chamado de etanol, e seu processo de produção. A produção do etanol ocorre em dornas, através da fermentação dos açúcares contidos no mosto (líquido açucarado). A etapa seguinte é a purificação por destilação, utilizando colunas de pratos ou de recheio. Parte do álcool, produzido durante a fermentação é arrastado em uma corrente gasosa juntamente com CO₂ produzido. Usualmente o processo de recuperação desse álcool se dá em uma coluna de absorção. Dessa maneira, os tópicos associados a este tema serão explorados neste capítulo.

3.1 Etanol

Os álcoois são moléculas que apresentam na sua estrutura um grupo hidroxila ligado a um átomo de carbono saturado, sendo o álcool etílico o mais comum deles. Também conhecido como etanol, é usualmente produzido através da fermentação de açúcares. Trata-se de um líquido incolor, de fácil inflamação e odor ardente. Sua queima apresenta uma chama azulada pálida. É muito higroscópico, sendo também utilizado na conservação de tecidos animais, quando nele submersos, por coagulação das albuminas. Solúvel em substâncias orgânicas e minerais, como ésteres e cetonas, quando desidratado. Solubiliza sulfatos, carbonatos, cloretos e acetatos de potássio. Quando misturado ao cloro, forma acetaldeídos (RASOVSKY, 1973). A Tabela 1 apresenta algumas propriedades físico-químicas do etanol.

Tabela 1 – Algumas propriedades do etanol.

Fórmula molecular	CH ₃ CH ₂ OH
Peso molecular	46,07 g/gmol
Ponto de Ebulição a 1 atm	78,3 °C
Ponto de fusão a 1 atm	-117 °C
Massa específica a 20 °C	0,789 g /cm ³
Solubilidade em água (g/100mL e H ₂ O)	infinito

Fonte: Solomons e Fryhle (2005)

3.2 Processo de Produção de Etanol

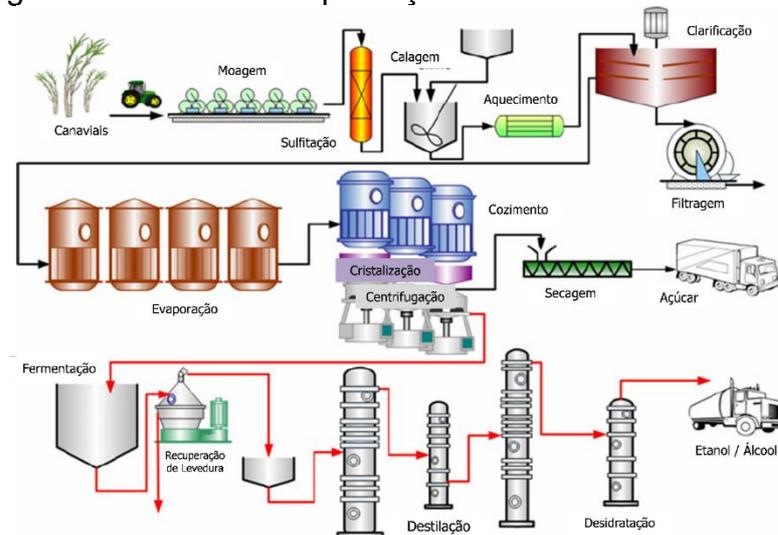
No Brasil, o etanol é produzido quase que exclusivamente a partir da fermentação da cana-de-açúcar. Após a colheita, a cana é levada para a usina onde é armazenada ou depositada nas esteiras de moagem. Na unidade de produção, após a lavagem, é encaminhada para as moendas, onde o caldo é extraído. O bagaço (fibra obtida após a extração do caldo) é usado como combustível para produção de vapor em caldeiras, sendo utilizado como fonte de calor, para geração de trabalho, ou ainda, produção de energia elétrica (BNDES e CGEE, 2008).

O caldo, obtido da moenda, é filtrado para remoção de areia e bagacilho, seguido para o processo de preparação do mosto a ser fermentado, após diluição, para ajuste da concentração de açúcar até 16 °Brix. Acima deste valor, a fermentação torna-se lenta e incompleta, ocasionada pela inibição das leveduras em alto teor alcoólico. Este sistema é complexo e exige um controle da fermentação para que não haja perdas (SANTOS, 2009).

Nas dornas após a adição da levedura *Saccharomyces cerevisiae*, obtém-se o vinho com concentração alcoólica de 6 a 10% em massa, após 8 a 12 horas de fermentação. No Brasil o processo predominante é o Melle-Boinot, onde ocorre a recuperação das leveduras do vinho, mediante a centrifugação. As leveduras recuperadas são tratadas e reutilizadas, enquanto o vinho segue para a destilação, (BNDES e CGEE, 2008).

Para separação do álcool, o vinho passa por um processo de destilação. O álcool obtido no topo da coluna, denominado flegma, contém impurezas e apresenta graduação alcoólica entre 40 e 50° GL. O produto de base, com aproximadamente 0,03° GL, é denominado vinhaça ou vinhoto. A segunda etapa é a retificação, destilação da flegma para a remoção das impurezas. O destilado obtido apresenta graduação alcoólica de aproximadamente 96° GL (etanol hidratado), que pode ser armazenado como produto, ou enviado para a etapa de desidratação. Nesta etapa, obtém-se o álcool anidro, via destilação azeotrópica ou extrativa para separação do azeótropo álcool-água, utilizando respectivamente ciclohexano ou monoetilenoglicol, como solvente (BNDES e CGEE, 2008). A Figura 1 apresenta o diagrama do processo de produção do etanol.

Figura 1 – Processo de produção do etanol.



Fonte: BNDES e CGEE (2008)

A Tabela 2 apresenta as especificações físicas do álcool anidro e hidratado.

Tabela 2 - especificações do álcool anidro e álcool hidratado

Parâmetros	Especificações	
	Anidro	Hidratado
Massa específica (20°C), kg/m ³	Máx. 791,5	807,6 a 811,0
Teor Alcoólico (INPM)	Mín. 99,3	92,6 a 93,8
Grau alcoólico (v/v 20°C)	Mín. 99,6	95,1 a 96,0
Acidez total (como ác. acético), mg/L		Máx. 30,0
pH		6,0 a 8,0
Condutividade elétrica, mS/m		Máx. 500
Aspecto	Límpido e isento de suspensão	

Fonte: Adaptada da ANP (2014)

3.3 Sistema de dornas fechadas

Durante o processo de fermentação, o CO₂ produzido pelo metabolismo da levedura na conversão do açúcar em álcool, promove o arraste de vapor de álcool do meio fermentativo. Para a sua recuperação é necessário que a fermentação ocorra em dornas fechadas, com o objetivo de melhorar a produtividade da etapa.

É importante salientar que o arraste do etanol pelo CO₂, representa uma alternativa de aumento de produtividade do etanol, no processo fermentativo. Neste processo, uma maneira de evitar a inibição das leveduras pelo etanol produzido é a utilização do CO₂ como gás de arraste do álcool no meio fermentativo, propiciando um aumento de produtividade. Trata-se de uma técnica simples e barata que permite

a remoção seletiva de compostos voláteis (EZEJI, 2003). Estudos sobre a utilização do arraste de CO₂ durante a fermentação contínua, em diferentes escalas, apresentaram produtividade de até 17g/L.h (TAYLOR et al., 1997; TAYLOR et al., 2010).

Taylor et al. (1997) observaram um aumento de produtividade superior a 10 vezes àquela obtida em uma dorna convencional, utilizando uma coluna recheada, para a dessorção do etanol com CO₂, a partir de uma planta piloto de 14 litros. Hashi et al. (2010) avaliaram a processo de recuperação do etanol arrastado de uma dorna de fermentação por dessorção utilizando como adsorventes o carvão ativado e zeólitas. Cardoso (2015) em sua dissertação de mestrado, estudou a absorção do vapor de etanol, carregado por gás carbônico, em diferentes solventes e comparou diferentes concentrações de solventes como etilenoglicol, dietilenoglicol e glicerol, ao longo do tempo, em cada absorvente, calculando os coeficientes globais de transferência de massa da fase líquida e correlações para a sua estimativa.

Sonego et al. estudaram o processo fermentativo em batelada de uma solução de sacarose alimentada a uma concentração de 300 g/L. Os autores obtiveram uma produtividade de até 8,6 g/L.h, e uma concentração total de etanol de 136,9 g/L (correspondendo a 17,2° GL). Este resultado equivaleu a uma produtividade 65% maior do que para fermentação sem arraste.

3.4 Recuperação do etanol durante o processo de fermentação

Para a recuperação do etanol arrastado pela corrente de CO₂, utiliza-se a água para separar o álcool do gás, em um processo denominado de absorção.

3.4.1 Absorção

A absorção gasosa trata-se de um processo com o objetivo de remover um ou mais componentes de uma mistura gasosa, por meio do contato com uma corrente líquida, onde esses são dissolvidos. Neste processo a corrente gasosa é composta pelo gás inerte e o gás transferido para fase líquida, denominado de soluto. A fase líquida é composta do solvente para dissolver o soluto (BIRD, STEWART, LIGHTFOOT, 1969).

Para o caso da usina sucroalcooleira, a absorção gasosa do etanol utiliza a

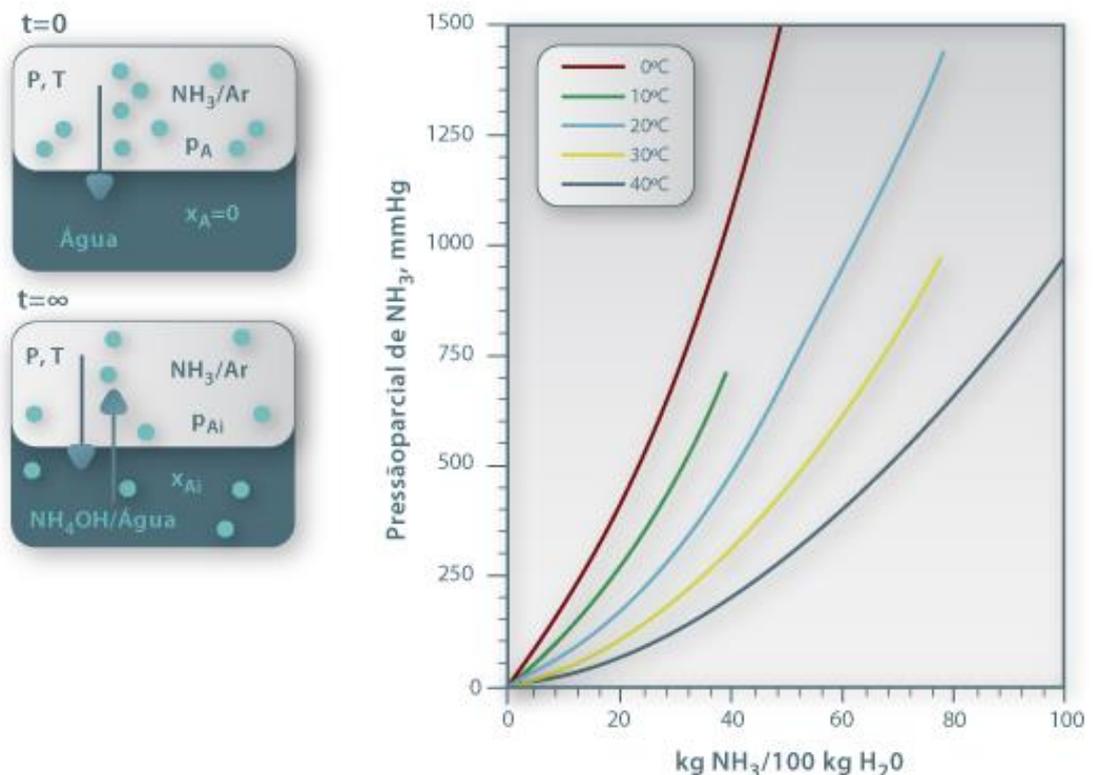
água como solvente, sendo o CO_2 o gás inerte de arraste.

Trata-se de um processo de transferência de massa, que explora as diferenças de solubilidade entre os gases e líquidos dos diferentes compostos de uma mistura. Por isso, um fator crítico para a obtenção de uma separação eficaz é a escolha do solvente. Este, pode ser um líquido que produza uma reação química com um soluto, ou um líquido não reativo, onde a solubilização do produto ocorre em decorrência das forças interativas de Van der Waals (CUSSLER, 1997). Para o caso da usina sucroalcooleira, a absorção gasosa do etanol utiliza a água como solvente, em decorrência da sua eficiência, atrelada ao seu baixo custo.

A capacidade que um solvente tem de absorver um soluto gasoso é função da sua pressão parcial. Esta relação depende da temperatura e do tipo de solvente.

No contato entre uma mistura gasosa e um líquido com um componente solúvel, como o NH_3 , Figura 2, a composição do soluto vai aumentar até atingir o estado de equilíbrio dinâmico. No geral, a solubilidade diminui com o aumento da temperatura e redução da pressão, devido ao deslocamento do equilíbrio entre fases (WANKAT, 2007).

Figura 2 – Equilíbrio $\text{NH}_3/\text{H}_2\text{O}$ para diferentes temperaturas.



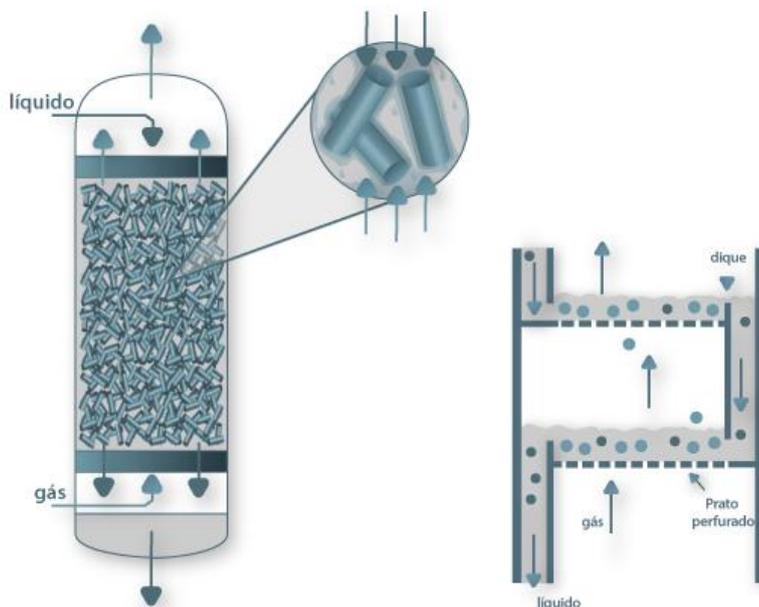
3.4.2 Tipos de colunas de absorção

A coluna de absorção utilizando-se do princípio que o aumento da área de contato (ou transferência) entre a interface líquida e gasosa, aumenta, por sua vez, a velocidade de transferência de massa. Para este fim, as colunas de absorção aumentam a área de transferência utilizando de duas formas diferentes a depender do equipamento utilizado, podendo ser colunas de prato ou de recheio.

Nas colunas de recheio, o gás passa por um leito poroso preenchido por materiais inertes denominados de enchimento, que ficam banhados em líquidos, aumentando assim sua área de contato. O recheio pode ser de diversos materiais, tamanhos e formas, desde que sejam inertes. A coluna de pratos possui pratos com orifícios, nos quais passam pequenas bolhas do gás, que estabelecem contato com a corrente líquida no topo do prato. A Figura 3 apresenta um desenho esquemático o funcionamento de ambos os tipos de coluna, sendo a de pratos a direita e a de recheio a esquerda.

Este processo de separação geralmente ocorre em colunas cilíndricas verticais, ou torres, tendo seu dimensionamento calculado em função da altura, no caso da coluna de recheio, ou do número de pratos e o espaçamento entre eles, no caso da coluna de pratos.

Figura 3 – Coluna de recheio e coluna de pratos perfurados.



O processo é influenciado pela hidrodinâmica, sendo seu escoamento complemento e majoritariamente descrito por correlações empíricas. A escolha do equipamento varia em função de: vazão do gás a ser tratado; grau de separação desejado; razão entre vazão líquida e gasosa; solubilidade do soluto; resistência hidráulica; impureza dos fluidos; e, propriedades físicas do sistema.

Ambas as colunas possuem um custo similar, apesar da coluna de recheio tender a ser um pouco mais caras (SEADER, 2006). A sua seleção deve-se às condições de sistema, sendo as colunas de recheio mais propícias para os seguintes casos: diâmetro inferior a 0,6m; baixa vazão de líquido; e, baixa perda de carga. As colunas de pratos são mais utilizadas para maiores diâmetros; maior tempo de residência de líquidos; melhor controle de temperatura; e, maior facilidade de limpeza e menos problemas de obstrução.

3.4.3 Reintegração do álcool no sistema

Em diversas empresas o processo de recuperação do etanol arrastado pelo CO₂, por meio da absorção gasosa, ocorre com excesso de água, para maximizar a recuperação de etanol, formando uma solução muito diluída com aproximadamente de 1% de etanol (m/m). Isto ocorre em decorrência da utilização de colunas de prato, que necessitam de uma quantidade de água muito elevada, para o funcionamento do equipamento.

Em decorrência da alta quantidade de água na solução, há a redução de seu percentual alcoólico. Em decorrência dessa redução, o custo atrelado a destilação se torna muito elevado. Logo, para retornar o álcool ao processo, a solução é utilizada para a lavagem do mosto, retornando ao processo de fermentação. Kwiatkowski *et al.* (2006) explica um processo similar em um estudo sobre o processo de obtenção de etanol pela fermentação do milho.

Todavia, o álcool é um inibidor do processo fermentativo, de forma que o álcool proveniente do arraste de gás, que retorna ao processo tende a não mostrar resultados significativos no aumento do percentual alcoólico do vinho. Para a resolução deste problema, Dias *et al.* (2011) analisa uma planta de produção de etanol de segunda geração, onde, em decorrência do vinho ter um percentual alcoólico mais baixo, quando comparado ao processo de primeira geração, a corrente do etanol recuperado por absorção se junta ao vinho antes da destilação.

3.5 Modelagem e simulação do processo de produção de etanol

A modelagem de uma coluna de absorção utiliza equações de balanço de massa e da quantidade de movimento, cinéticas de absorção e conceitos de equilíbrio líquido-vapor (RODRIGUES et al., 2019), com vários métodos de solução relativamente difíceis e trabalhosos (HENLEY e SEADER, 1981). Para o caso da coluna de recheio, o dimensionamento é baseado na velocidade de transferência de massa (Equação 1) e no contato contínuo entre fases.

$$N_A = k_{G,L} A \Delta C_A, \quad (1)$$

onde: N_A , $k_{G,L}$, A , C_A representam respectivamente fluxo molar de A, coeficiente de transferência de massa entre o sólido e o líquido, área de interface entre os compostos, variação da concentração de A (LABVIRTUAL, 2022).

As equações básicas que descrevem o processo de absorção são as de transferência relacionadas à primeira Lei de Fick, Equação 2.

$$N_{Adiff} = -C \cdot A \cdot D_{ab} \frac{dx_A}{dz}, \quad (2)$$

sendo, C o vetor de concentração, A a área de transferência de massa, D_{AB} difusividade molecular de A em mistura binária de A e B.

Para o caso específico da absorção, onde o fluxo de B é nulo obtém-se a Equação 3.

$$N_A = \frac{K_{G,L} \cdot A \cdot P}{R \cdot T} \frac{p_{A1} - p_{A2}}{p_{Bml}} \quad (3)$$

onde: p_{A1} , p_{A2} são as pressões parciais de A mantidas constantes nos extremos do percurso de difusão.

Quando os coeficientes de transferência de massa são conhecidos, é possível calcular as composições interfaciais, Equação 4. Porém, devido a difícil determinação dos coeficientes individuais de transferência de massa, frequentemente são utilizados os coeficientes globais tabelados.

$$-\frac{k_x}{k_y} = \frac{y - y_i}{x - x_i} \quad (4)$$

sendo, k_x e k_y respectivamente, as taxas de reação para em frações molares para líquido e gás.

Para que a base de cálculo das composições seja a mesma, é necessário converter a fase líquida, de composição global real x_i , numa fase gasosa fictícia de composição y_f (Fig. 4). Esta conversão é feita substituindo x_i por x e obtendo $y_i (=y_f)$, na equação da curva de equilíbrio. O mesmo procedimento é realizado para as frações líquidas individuais. As Equações (5) a (7) e (6) a (8) relacionam os coeficientes globais com os coeficientes individuais baseados em duas fases gasosas e duas fases líquidas, respectivamente (LABVIRTUAL, 2022).

$$\dot{N}'_A = k_x (x_i - x) \quad (5)$$

$$m_1 = \frac{y_i - y^f}{x_i - x} \quad (6)$$

$$\frac{1}{K_{Oy}} = \frac{1}{k_y} + \frac{m_1}{k_x} \quad (7)$$

Sendo, K_{Oy} o coeficiente de transferência de massa, expressado em termo da força motriz da fase gasosa, x, x_i , as com composição global real e fictícia da fase líquida; e, y_i, y_f , as com composição global real e fictícia da fase gasosa.

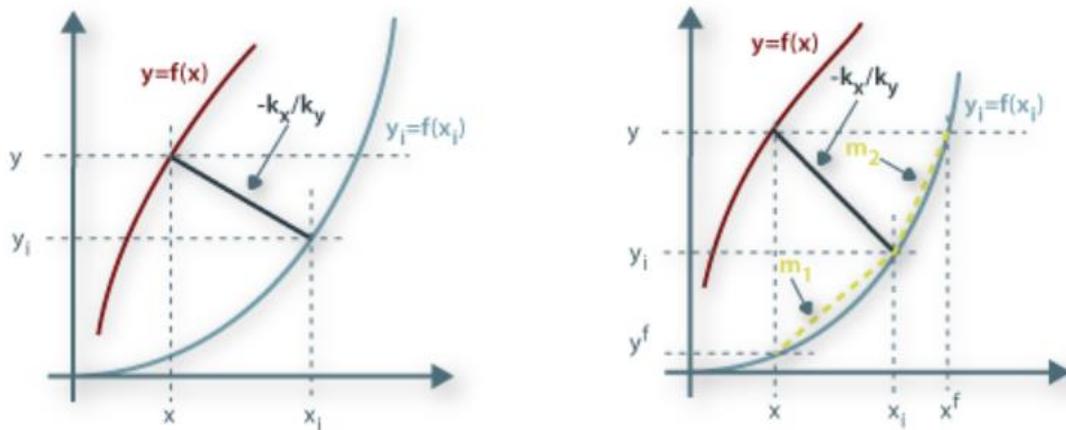
$$\dot{N}'_A = k_y (y - y_i) \quad (8)$$

$$m_2 = \frac{y - y_i}{x^f - x_i} \quad (9)$$

$$\frac{1}{K_{Ox}} = \frac{1}{m_2 \cdot k_y} + \frac{1}{k_x} \quad (10)$$

Sendo, K_{Ox} , o coeficiente de transferência de massa, expressado em termo da força motriz da fase líquida, y, y_i , as com composição global real e fictícia da fase gasosa; e, x_i, x^f , as com composição global real e fictícia da fase líquida.

Figura 4 – Metodologia de determinação das composições interfaciais e fictícias.



Fonte: Portal de engenharia química, fundamentos (2022).

Alguns trabalhos, referente a simulação de projetos para a produção de etanol, utilizando dados industriais apresentam resultados significativos. Black e Ditsler (1974) estudaram a desidratação do etanol a partir do etilenoglicol; Barba et al. (1985) simularam a obtenção do etanol anidro a partir da destilação extrativa com cloreto de cálcio; Chianese e Zinamosca (1990) simularam a destilação azeotrópica usando benzeno para quebra da azeotropia; Restrepo e Arias (2003) simularam uma coluna de destilação extrativa salina, utilizando o CaCl_2 na concentração mássica de 16,7% em base livre de sal, para quebrar o azeótropo etanol-água; e, Gil *et al.* (2005) simularam a desidratação do etanol pela destilação extrativa utilizando uma mistura de etilenoglicol e glicerol. Dá-se destaque ao trabalho de Rodrigues *et al.* (2019), no qual utilizaram duas colunas de absorção, com monoetilenoglicol, visando a recuperação do etanol arrastado, pelo CO_2 , das dornas de fermentação. Segundo os autores, foi recuperado até 93% do etanol presente no gás de arraste, apresentando-se como um processo promissor para a aplicação industrial. Os autores utilizaram diferentes simuladores, tais como *UniSim*, *ASPEN*, *HYSIS*, *COCO*, dentre outros, que permitem estudar os problemas operacionais dos sistemas tais como: destilação, absorção, extração líquido-líquido, dentre outros. Os simuladores permitem a avaliação da eficiência técnica e econômica dos sistemas estudados, bem como, os comportamentos de equilíbrio líquido vapor de sistemas como etanol-água.

3.6 Redes neurais e *diferrential evolution*

Métodos de otimização de dados para problemas relacionados a engenharia podem ser divididos em duas categorias, métodos determinísticos e meta-heurísticos. Os métodos determinísticos são sensíveis a valores iniciais, sendo uma boa resposta para soluções de problemas simples e otimizações lineares, porém, falha na solução de problemas complexos como é o caso de alguns problemas de engenharia. Para estes casos foram desenvolvidos os métodos meta-heurísticos, que são utilizados para a solução de otimização de problemas relacionados a engenharia, apresentando as seguintes características que o permitem obter melhores soluções para este tipo de problema: utilizando uma população no espaço de busca; usando funções objetivos em vez de derivadas de função e outros conhecimentos relacionados; e a utilização de regras probabilísticas, ao invés das determinísticas (ZHANG et al., 2018).

Esses métodos, geralmente, se utilizam de redes neurais artificiais. Estas servem para fins de previsão, na maior parte dos casos, fechando a lacuna entre a solução prevista e a solução de destino (STORN et al., 1997)

Dentro dos métodos meta-heurísticos existentes, estão os algoritmos evolucionário. Esses algoritmos são inspirados em um processo de evolução biológica, como no caso do diferente Evolution, método utilizado nesse projeto (ZHANG et al., 2020).

O algoritmo assume um conjunto uniformemente aleatório de soluções candidatas retirada da base de dados da pesquisa, cada iteração opera por meio dos mesmos passos computacionais empregados por um algoritmo evolutivo padrão. Com o passar das iterações, as diferenças tendem a se adaptar às escalas naturais da função objetivo. Por exemplo, se a população se tornar compacta em uma variável, mas permanece amplamente disperso em outro, os vetores de diferença amostrados a partir dela será menor na primeira variável, mas maior na segunda. Esta adaptação automática melhora significativamente os movimentos de busca do algoritmo permitindo a obtenção de resultados muito precisos (DAS et al., 2016).

4 METODOLOGIA

Este trabalho visa a análise de uma coluna de absorção para recuperação do etanol arrastado pelo CO₂, no processo de fermentação industrial da Usina Caeté, Unidade Matriz. Para este fim foram realizadas as seguintes atividades:

- Obtenção de dados de produção das duas colunas de absorção da Usina Caeté S/A, utilizada para este mesmo fim;
- Estudo do software *Hysys v.10* do pacote computacional *Aspen* para a simulação de colunas de absorção e suas variáveis de projeto e processo;
- Treinamento de uma rede neural e otimização das variáveis de processo.

4.1 Obtenção e análise das variáveis de projeto

A Usina Caeté S/A é uma empresa sucroalcooleira produtora de açúcar, álcool e bioenergia. Dentre os diversos processos que compõe a obtenção de seus produtos, está a absorção gasosa. A empresa forneceu os dados referentes a sua produção e equipamentos para realização deste trabalho.

O sistema atual da usina consiste em duas colunas de absorção, onde uma recebe a alimentação gasosa de 3 dornas de 600m³, e a outra de duas dornas, com o mesmo volume. A primeira, consiste em uma coluna com 15 pratos, 1,5m de diâmetro e 0,5 m entre pratos. A Figura 5 apresenta uma vista das duas colunas.

Adicionalmente, também foram obtidos os dados de vazão de água e produção de etanol diária da usina. Como o sistema de absorção gasosa segue o modelo de Kwiatkowski et al. (2006), todo o etanol produzido sai diretamente do processo de fermentação, permitindo o cálculo da corrente de CO₂ utilizando a estequiometria da reação de fermentação alcoólica, Equação 11.

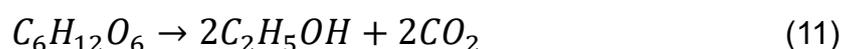


Figura 5 – Vista das colunas de absorção.



Coluna 1

Fonte: Autor, 2022.

Coluna 2

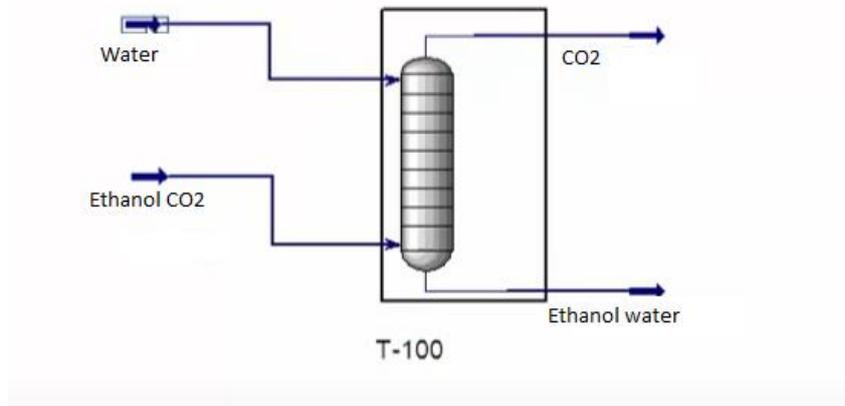
4.2 Simulação

A simulação do processo de absorção gasosa teve por objetivo, maximizar a recuperação do etanol arrastado pelo CO_2 produzido no processo de fermentação. Além disso, aumentar o percentual alcoólico do efluente da absorção, para que se assemelhe ao do vinho, estando propício à destilação.

Para a simulação foi utilizado o pacote computacional *Aspen Hysys V.10*, sendo analisadas as seguintes variáveis de processo: temperatura, pressão e vazão de água. A Figura 6 apresenta a interface gráfica da coluna de absorção no simulador.

Na simulação foi utilizada a equação modificada de UNIQAC como modelo termodinâmico, por se adequar melhor a sistemas de mistura em equilíbrio fase, como no caso do equilíbrio líquido/gás. Os dados referentes ao modelo foram extraídos do próprio software *Aspen Hysys V.10*.

Figura 6 – Simulação da coluna de absorção, pacote computacional *Aspen Hysys*.

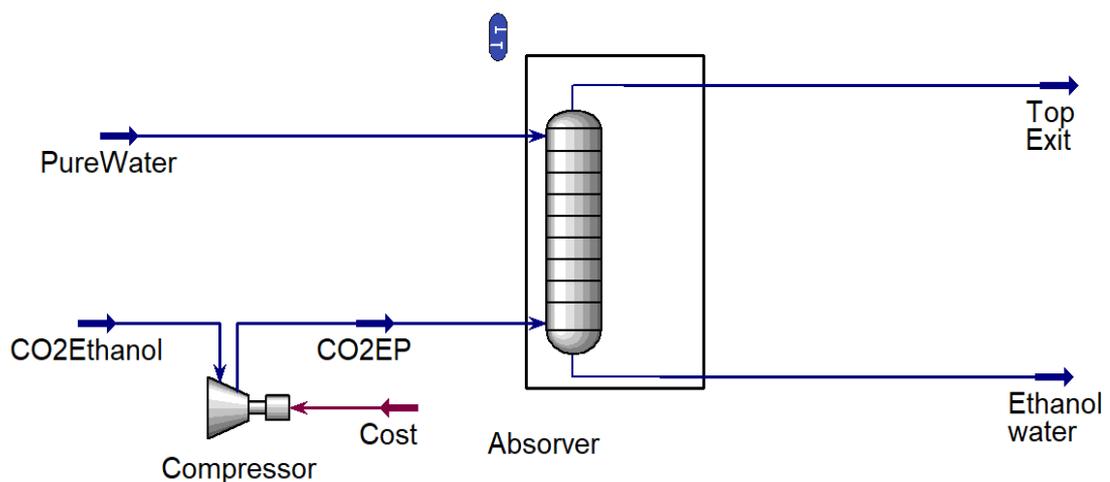


Fonte: Autor, 2022.

As simulações computacionais incluíram colunas de pratos e recheios, para diversas temperaturas e pressões das correntes líquida e gasosa de alimentação. As simulações levaram em consideração o dimensionamento do equipamento e as limitações provenientes da sua curva de operação, limitada aos dados de projeto e de processo.

Durante as simulações foi utilizado um compressor, visando verificar a influência da pressurização do gás no processo, Figura 7. Porém, os resultados iniciais apresentaram-se desfavoráveis, não havendo continuidade ao estudo.

Figura 7 – Simulação da coluna de absorção considerando a variação da pressão.

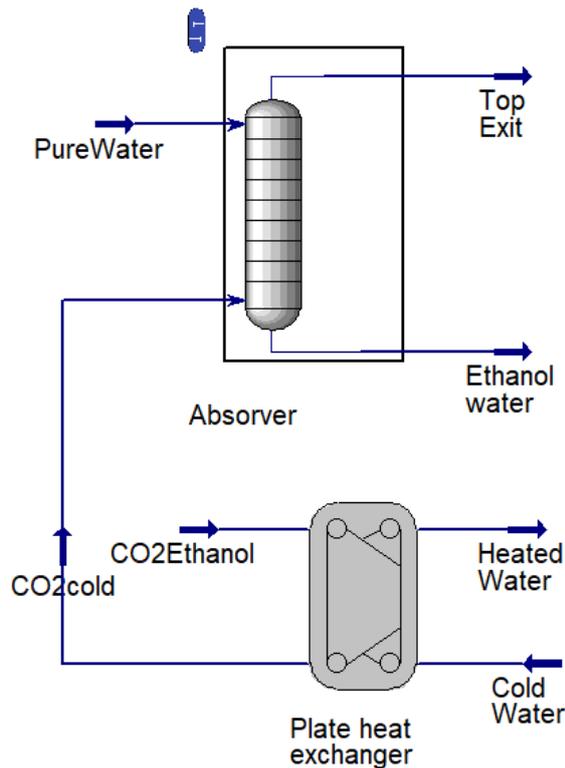


Fonte: Autor, 2022.

Visando estudar a influência da temperatura do gás na absorção foi adicionado, durante a simulação, um trocador de calor utilizando água de resfriamento, por se

tratar de um recurso já presente na usina, Figura 8. Portanto, a temperatura utilizada na simulação para resfriamento da água (fluido absorvente) foi limitada à disponibilizada pelo uso da água de resfriamento.

Figura 8 – Simulação da coluna de absorção para variação da temperatura.



Fonte: Autor, 2022.

4.3 Otimização utilizando redes neurais

Após os cálculos e simulações do processo de absorção gasosa, foi proposta a realização da técnica de regressão utilizando redes neurais artificiais (ANN). O código foi criado na linguagem de programação Python para otimização do número e seleção do tipo de neurônios aplicados à rede.

Para a otimização das variáveis de processo foi criado outro código (*OptimizationDE*), a qual utiliza da rede neural treinada e do método *Differential Evolution*. Trata-se de um algoritmo de busca metaheurística, baseado em população, que otimiza um problema melhorando iterativamente uma solução candidata, com base em um processo evolutivo.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Serão aqui apresentados os resultados das simulações e da otimização do processo de recuperação do etanol das dornas de produção de álcool, utilizando os dados operacionais da Usina Caeté Matriz, Safra 2021-2022, comparando com alguns dados da literatura.

5.1 Análise dos dados de uma coluna de absorção

A partir dos dados provenientes da safra 2021/2022, gentilmente cedidos pela Usina Caeté S/A, e utilizando a estequiometria da reação de fermentação alcoólica, Equação 11, foi possível obter a vazão de CO₂. A Tabela 3 apresenta as médias diárias do atual processo de absorção para recuperação de álcool, da Usina Caeté S/A, unidade Matriz.

Foram utilizados os seguintes dados de produção, referente a safra 2021/2022, Tabela 3: produção horária de etanol; consumo de água utilizado nas colunas de absorção, para recuperação do etanol; teor alcoólico das correntes de saída das torres de absorção (Coluna 1 e Coluna 2), que operam em paralelo; vazão de CO₂, com arraste de etanol, proveniente das dornas de fermentação; e, teor alcoólico do mosto fermentado produzido na fermentação.

Tabela 3 –Médias diárias da atual produção referentes a safra 2021/2022

Variável	Valor
Produção de etanol	6,85 m ³ /h
Consumo de água nas colunas de absorção	18,5 m ³ /h
Teor alcoólico da absorção (Coluna 1)	0,225°INPM
Teor alcoólico da absorção (Coluna 2)	0,267°INPM
Vazão de CO ₂	118,2 kmol/h
Teor alcoólico do mosto fermentado	6,66°INPM

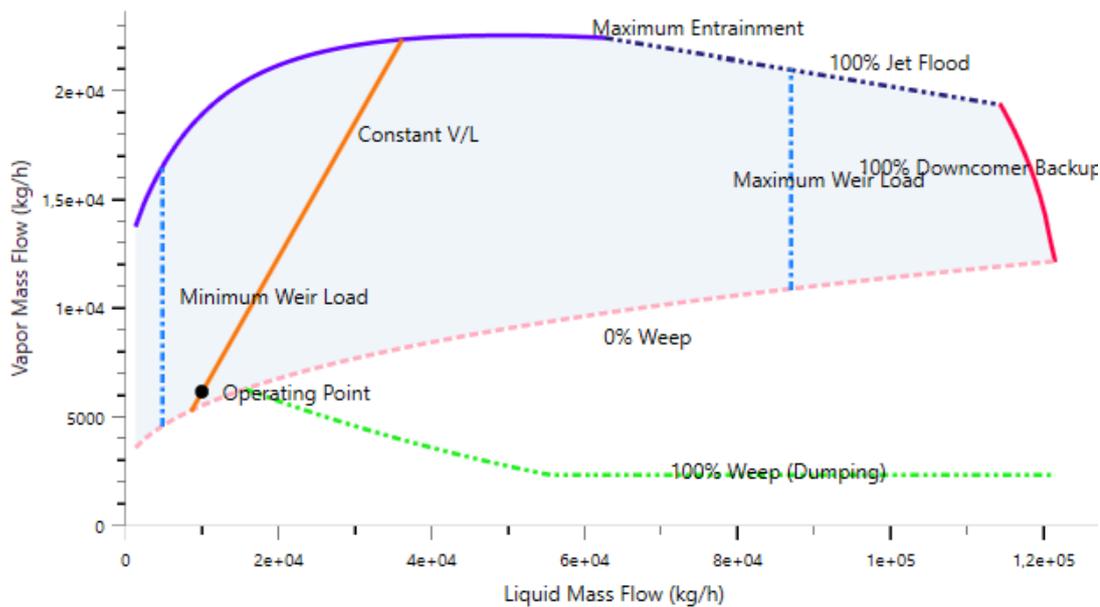
Fonte: Autor, 2022.

De acordo com Rodrigues et al. (2019), o arraste de álcool na corrente gasosa de CO₂, proveniente das dornas de fermentação é na faixa de 1% molar. Esse dado é

reforçado em Dias et al. e Cardoso (2015). Os pesquisadores utilizaram uma corrente de CO₂ de 100 kmol/h. Para fins comparativos, este estudo utilizou os mesmos dados dos trabalhos citados.

Observa-se que o percentual alcoólico resultante do processo de absorção é de aproximadamente 0,25 °INPM, diferente de 1,0 °INPM obtido por Kwiatkowski et al. (2006). Isto se deve ao superdimensionamento das colunas que operam na área industrial. Na realidade, seria necessária uma única torre de absorção, para suprir a demanda da usina. A Figura 9 representa a curva de operação da coluna da empresa, gerada no *Hysys v.10*. Como pode-se observar, a coluna está operando no seu limite inferior, podendo processar até 3 vezes mais que suas condições atuais.

Figura 9 – Curva de operação da coluna de absorção.



Fonte: Autor, 2022.

Um dos objetivos é produzir uma corrente proveniente do processo de absorção que tenha um teor alcoólico similar ao do mosto fermentado, que para este caso representa 6,66 °INPM.

5.2 Simulações

Como citado na metodologia as simulações foram separadas em 3 casos:

- Análise do tipo de coluna;
- Análise da temperatura;
- Análise da pressão;

Para todas as simulações foram consideradas as seguintes condições iniciais da corrente gasosa: 32° C e 110 kpa. Tais valores se deve a: presença de válvulas de alívio, que evitam a pressurização excessiva do gás; e, a ausência de isolamento térmico, que mantém a temperatura próxima à ambiente, de 27°C.

A água alimenta o sistema a 27°C e 1 atm. Por se tratar de uma das principais variáveis de controle da coluna, a vazão de água foi um variável estudada em todas as simulações.

5.2.1 Análise do tipo de coluna

As simulações visaram o comparativo do desempenho, entre a coluna de pratos e recheio, frente a adsorção de álcool. Como resultado da simulação, obteve-se que, para operação das colunas de pratos é necessária uma alta demanda de água para seu funcionamento. Porém, maior vazão de água implica em maior diluição do efluente final, ou seja, da solução alcoólica com o álcool absorvido.

Neste caso, o número de pratos foi reduzido 5 pratos, uma vez que com este quantitativo, já se obteve a absorção máxima de álcool da corrente gasosa. A Tabela 4 apresenta as frações mássicas no efluente de saída da torre de adsorção com pratos.

Tabela 4 –Composição dos produtos da absorção da coluna de 5 pratos.

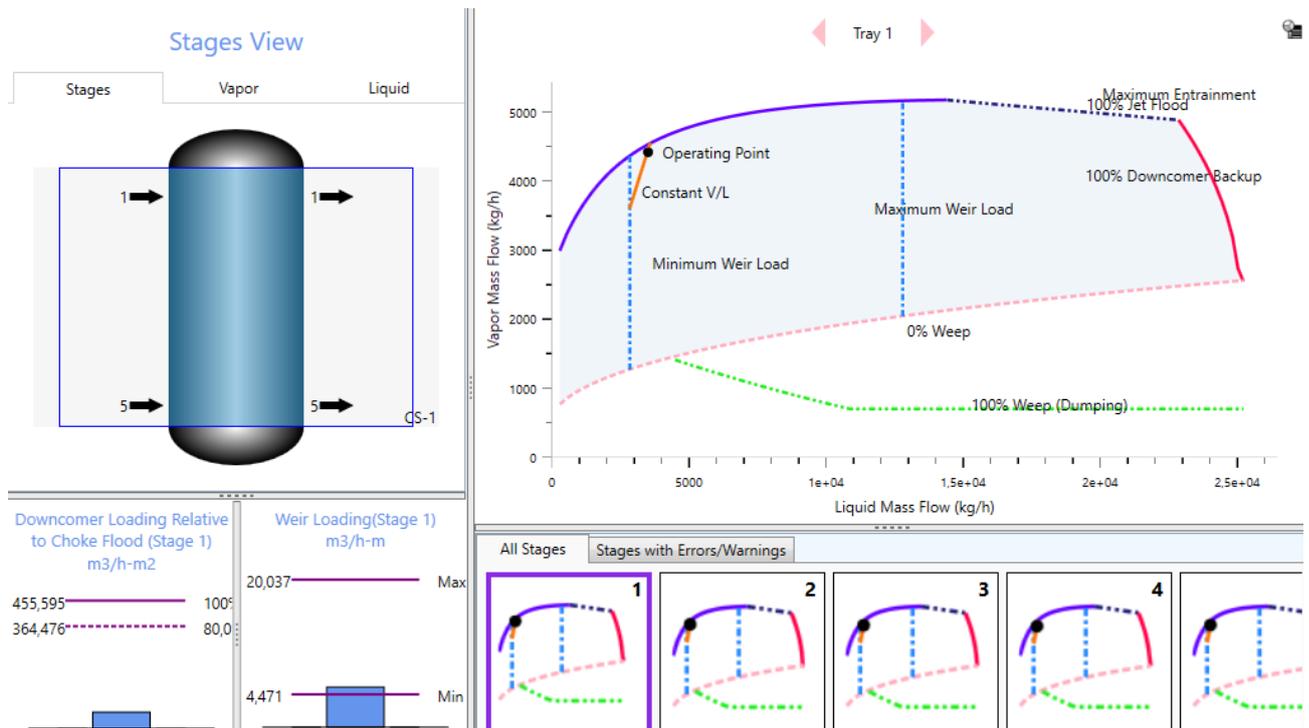
Componentes	Fração mássica
Água	0,985
Etanol	0,013
Gás carbônico	0,016

Fonte: Autor, 2022.

A Figura 10 apresenta os dados obtidos do pacote computacional ASPEN. No lado esquerdo da figura, o *stage view*, apresenta a coluna com 5 pratos, com diâmetro interno de 0,82 m e espaçamento entre pratos de 0,30 m. As dimensões da torre foram determinadas através da simulação. Nesta figura, *downcomer loading* apresenta os dados da vazão de inundação; *weir loading*, a vazão mínima e máxima de água na

corrente de alimentação. O lado direito apresenta a curva de operação da coluna, em função do fluxo mássico de líquido e gás, podendo-se observar o ponto de operação em 3.500 kg/h de água e 4.400 kg/h da corrente gasosa de CO₂ e etanol. Observa-se também que, nestas condições operacionais, a máxima vazão de gás a ser tratada é próximo a 5.000 kg/h. Portanto, a coluna já está operando muito próxima a sua condição limite.

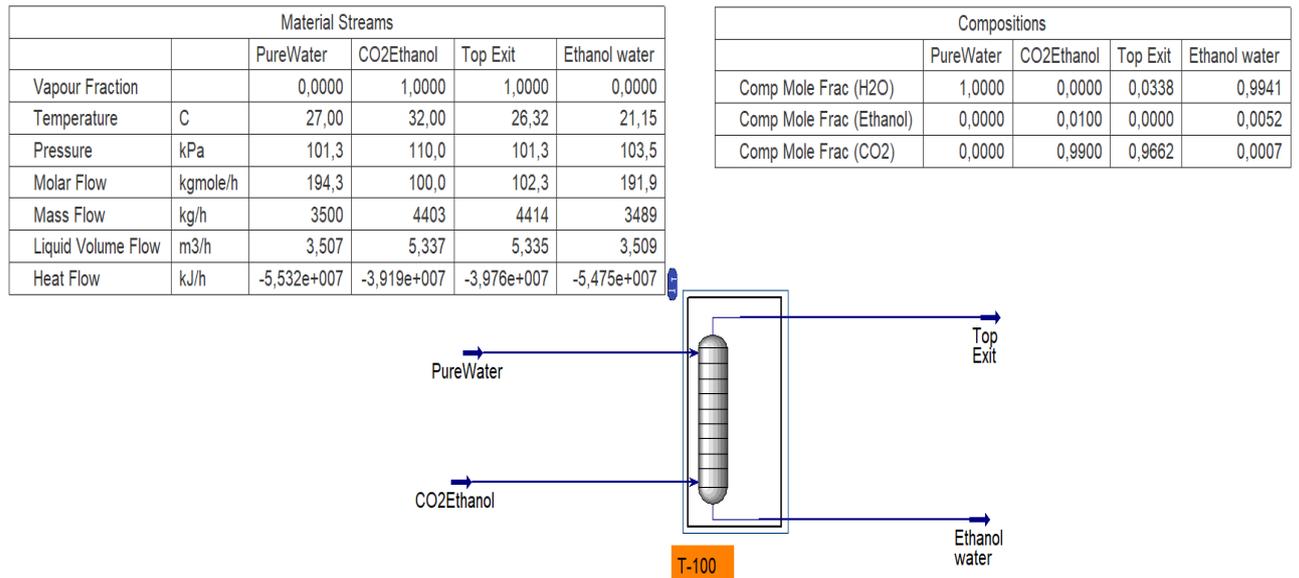
Figura 10 – Curva de operação da coluna de absorção de 5 pratos.



Fonte: Autor, 2022.

A Figura 11 apresenta os dados físicos e de composição das correntes, obtidos do pacote computacional ASPEN, relativos a mesma simulação apresentada na Figura 10. Os resultados se aproximaram dos citados por Kwiatkowski *et al*, (2006), gerando uma corrente com aproximadamente 1 °INPM. Observa-se que todo etanol da corrente gasosa foi absorvido, indicando que o baixo teor alcoólico ocorre, apenas, em decorrência da alta vazão de água.

Figura 11 – Coluna de absorção de 5 pratos e suas variáveis.

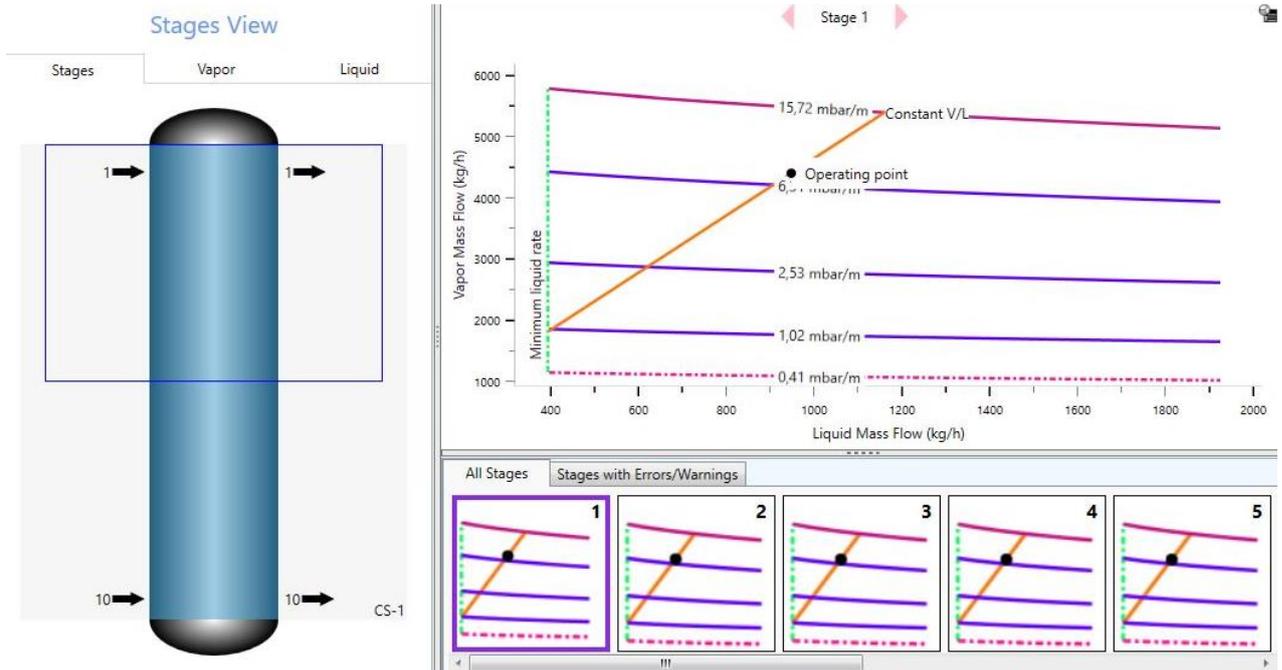


Fonte: Autor, 2022.

A Figura 12 refere-se à simulação da coluna de recheio, com dados obtidos do pacote computacional ASPEN. No lado esquerdo da figura, o *stage view*, apresenta a coluna, com diâmetro interno de 0,64 m, 1,0 m de altura, utilizando anéis de Pall de metal. Assim como na Figura 10, o dimensionamento da torre de recheio foi determinado através da simulação. O lado direito apresenta a curva de operação da coluna, em função do fluxo mássico de líquido e gás, podendo-se observar o ponto de operação em aproximadamente 950 kg/h de água e 4.400 kg/h da corrente gasosa de CO₂ e etanol. Portanto, houve uma redução de 2.550 kg/h de água, o que equivale aproximadamente a 73% de redução de água, para tratar a mesma corrente de gás, alterando o tipo de torre de pratos, para recheio e seus respectivos dimensionamentos.

Atualmente na unidade industrial, são utilizadas duas colunas com 15 pratos cada, 0,50 m de espaçamento entre pratos, e diâmetro interno de 1,5 m.

Figura 12 – Curva de operação da coluna de absorção de recheio.



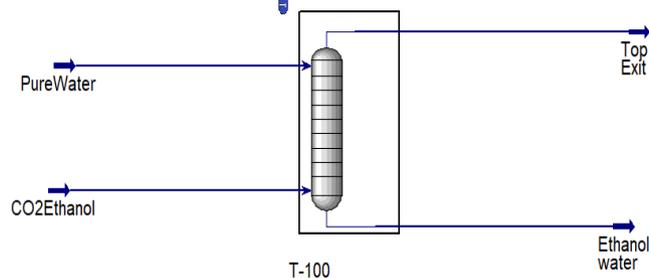
Fonte: Autor, 2022.

A Figura 13 apresenta os dados físicos e de composição das correntes, obtidos do pacote computacional ASPEN, relativos à simulação apresentada na Figura 12, utilizando a torre de recheio. Todo o etanol da corrente gasosa foi absorvido, obtendo-se uma fração molar de CO₂ no topo da coluna de 0,9732, sendo o restante composto por vapor d'água.

Figura 13 – Coluna de absorção de recheio e suas variáveis.

Material Streams					
		PureWater	CO2Ethanol	Top Exit	Ethanol water
Vapour Fraction		0,0000	1,0000	1,0000	0,0000
Temperature	C	27,00	32,00	22,44	16,98
Pressure	kPa	101,3	110,0	101,3	102,5
Molar Flow	kgmole/h	52,73	100,0	101,7	51,04
Mass Flow	kg/h	950,0	4403	4405	948,4
Liquid Volume Flow	m3/h	0,9519	5,337	5,326	0,9624
Heat Flow	kJ/h	-1,502e+007	-3,919e+007	-3,964e+007	-1,457e+007

Compositions					
	PureWater	CO2Ethanol	Top Exit	Ethanol water	
Comp Mole Frac (H2O)	1,0000	0,0000	0,0268	0,9798	
Comp Mole Frac (Ethanol)	0,0000	0,0100	0,0000	0,0195	
Comp Mole Frac (CO2)	0,0000	0,9900	0,9732	0,0008	



Fonte: Autor, 2022.

A Tabela 5 apresenta o comparativo da fração mássica na corrente de água com etanol absorvido, para os dois tipos de torre de absorção: pratos e recheio. Pode-se observar que a fração do etanol é de aproximadamente 5° INPM, revelando um resultado muito melhor, quando comparado à coluna de pratos. Portanto, sabendo-se que nas duas colunas, o álcool foi praticamente exaurido da corrente gasosa, a coluna de recheio apresentou uma maior fração mássica de álcool no efluente aquoso, devido ao menor volume de água utilizado no sistema, cerca de 73%. Levando isto em consideração, as avaliações dos efeitos de temperatura e pressão foram realizadas apenas para coluna de recheio.

Tabela 5 – Fração mássica da corrente aquosa após tratamento

Componentes	Coluna de pratos	Coluna de recheio
Água	0,985	0,950
Etanol	0,013	0,048
Gás carbônico	0,016	0,002

Fonte: Autor, 2022.

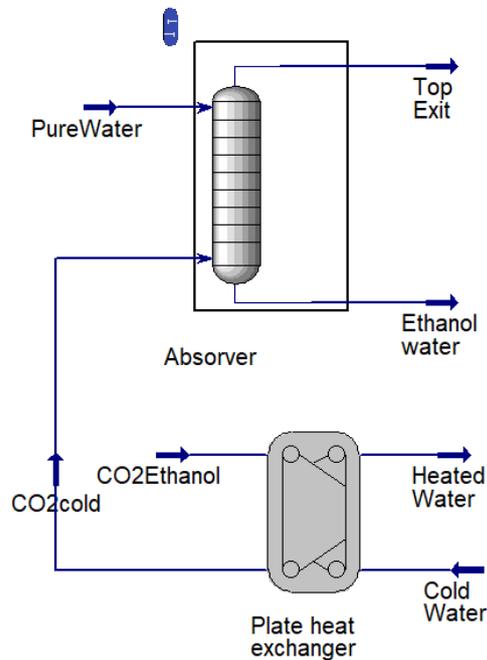
Baseado nestas simulações, a vazão de água é a variável de maior influência no sistema. O aumento desta vazão implica em uma maior recuperação do etanol, caso a água tenha alcançado seu limite de solubilidade, antes da absorção completa do álcool no sistema. Porém pelo balanço de componentes a adição da água diminui o percentual alcoólico do produto da operação.

5.2.2 Avaliação do efeito da temperatura

Para a análise da temperatura foi considerado o intervalo de 15 a 35°C para a corrente gasosa, e de 15 a 30°C para a de água. Esses valores foram selecionados, considerando o resfriamento da corrente por meio de trocadores de calor, utilizando água de resfriamento e/ou gelada.

Os dados da simulação, obtidos do pacote computacional Aspen baseados nos dados apresentados na Figura 8, anteriormente apresentada, alterando apenas o valor da variável temperatura, na corrente gasosa.

Figura 8 – Simulação da coluna de absorção para variação da temperatura.



Fonte: Autor, 2022.

A Figura 14 apresenta os dados físicos das correntes, obtidos do pacote computacional ASPEN, relativos à simulação apresentada na Figura 8, utilizando a torre de recheio. Todo o etanol da corrente gasosa foi absorvido, obtendo-se uma fração mássica de etanol, na corrente aquosa, da base da coluna, de 6%.

Figura 14 –Especificações físicas das correntes simuladas.

		Material Streams						
		PureWater	CO2Ethanol	Top Exit	Ethanol water	CO2cold	Cold Water	Heated Water
Vapour Fraction		0,0000	1,0000	1,0000	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
Temperature	C	27,00	32,00	17,75	9,295	15,00	15,00	25,81
Pressure	kPa	101,3	110,0	101,3	102,4	110,0	120,0	101,3
Molar Flow	kgmole/h	42,00	100,0	101,0	41,01	100,0	80,00	80,00
Mass Flow	kg/h	756,6	4403	4392	767,8	4403	1441	1441
Liquid Volume Flow	m3/h	0,7582	5,337	5,314	0,7814	5,337	1,444	1,444
Heat Flow	kJ/h	-1,196e+007	-3,919e+007	-3,949e+007	-1,173e+007	-3,926e+007	-2,285e+007	-2,279e+007

Fonte: Autor, 2022.

Os Tabela 6 apresenta as frações mássicas obtidas. na corrente aquosa, da base da coluna. Observa-se o aumento do percentual alcoólico no produto, estando muito próximo do valor desejado de 6,66° INPM, o qual corresponde ao teor alcoólico do vinho, obtido das dornas de fermentação.

Tabela 6 – Composição do produto da absorção da coluna de recheio.

Componentes	Fração mássica
Água	0,938
Etanol	0,060
Gás carbônico	0,002

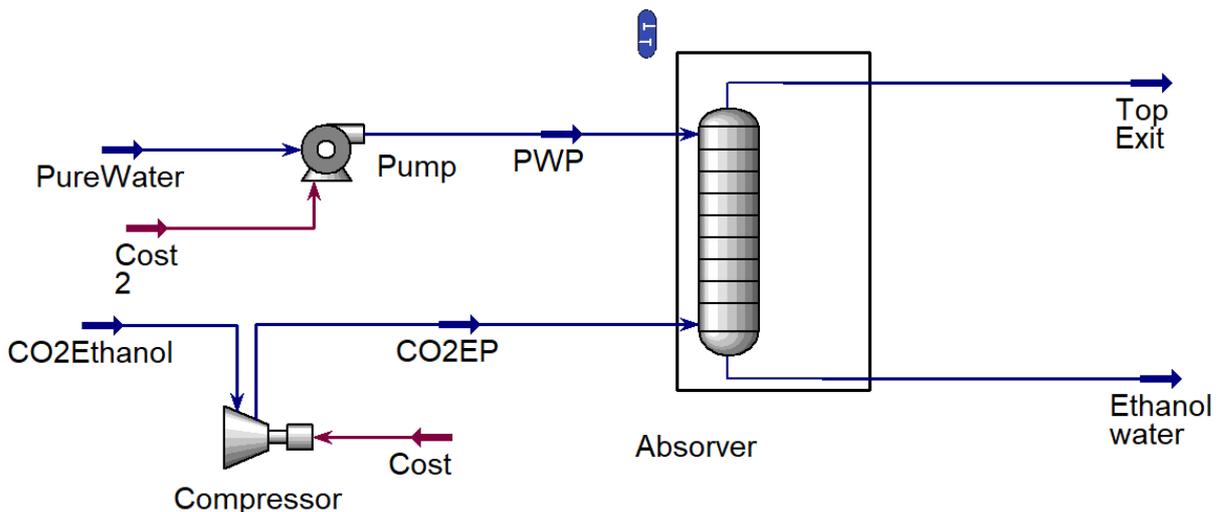
Fonte: Autor, 2022.

5.2.3 Avaliação do efeito da pressão

De um modo geral, o aumento da pressão é benéfico ao processo de absorção, porém, a diferença de pressão é mais significativa em colunas de pratos. Para o caso de colunas de recheio a diferença de pressão do topo para a base é quase nula, havendo a necessidade de pressurizar ambas as correntes de entrada (aquosa e gasosa).

Adicionalmente o processo de pressurização está atrelado a um custo adicional de eletricidade e um aumento de temperatura, ambos os quais não são benéficos para o processo. A Figura 15 apresenta um sistema de uma coluna de absorção de recheio, onde ambas as correntes de entrada foram pressurizadas. Para este caso, foram utilizados os mesmos dados referentes a simulação da Figura 12 e 13 (simulação em coluna de recheio, sem efeito de temperatura), sendo as correntes pressurizadas a 150Kpa.

Figura 15 – Coluna de absorção de recheio para análise da pressão



Fonte: Autor, 2022.

A Tabela 7 apresenta os dados referentes a elevação de temperatura das correntes de entrada, e o respectivo consumo energético, atrelados à elevação da pressão do sistema. Para um aumento de pressão na coluna, na faixa de 50kPa, observa-se um custo energético de superior a 36 kW, e um aumento da temperatura da corrente gasosa superior a 30° C, que é prejudicial ao processo.

Tabela 7 – Diferença dos dados operacionais da coluna de recheio

Componentes	Compressor	Bomba
ΔP	50kPa	48,7 kPa
ΔT	33,56° C	0° C
Gasto energético	36,5 kW	0,017 kW

Fonte: Autor, 2022.

A Tabela 8 apresenta as frações mássicas das correntes de saída do absorvedor. Observa-se que houve perda de álcool na corrente de topo.

Tabela 8 – Fração mássica das correntes da coluna de absorção

Componentes	Topo	Base
Água	0,0137	0,9545
Etanol	0,0012	0,0438
Gás carbônico	0,9851	0,0018

Fonte: Autor, 2022.

Em decorrência do aumento de temperatura, a utilização de um trocador de calor seria necessária para a redução da temperatura do gás proveniente do compressor, visto que nem todo o etanol foi absorvido no processo. Todavia, uma vez que já foram obtidos resultados satisfatórios apenas com a variação da temperatura, não houve necessidade de modificar a pressão no processo.

5.2 Otimização utilizando redes neurais

Utilizando o software *ASPEN HYSYS V.10* foram gerados 60817 dados agrupados, referentes as variáveis de vazão de água e temperatura das correntes líquida e gasosa. Foram considerados os intervalos de temperatura de 15 a 35°C para

a corrente gasosa e 15 a 30°C para a corrente líquida. Para a vazão d'água foi considerado o intervalo de 20 a 200 kmol/h. Os valores máximos e mínimos foram determinados por serem, respectivamente, o menor valor dentro da curva operacional da coluna utilizada, e o menor valor dentro da curva operacional do equipamento, referente a Usina Caeté S/A. Esses dados foram utilizados no código para o treinamento da rede neural.

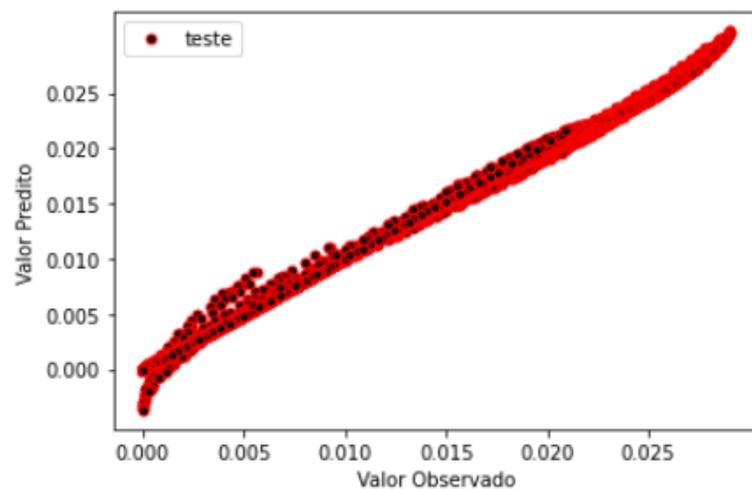
Como função objetivo foi utilizado o algoritmo de desejabilidade, minimizando a vazão de água e, maximizando o percentual mássico de etanol na saída, como também, a vazão de etanol. Desta forma o algoritmo de desejabilidade gera uma função, que varia de 0 a 1, representando o intervalo de valores das variáveis. A Equação 12 representa o cálculo utilizado para cada uma dessas variáveis, a Equação 13, a relação entre elas, onde as variáveis a serem maximizadas são multiplicadas e, as minimizadas divididas.

$$f(x) = \frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}} \quad (12)$$

$$G(x) = \frac{f(\%massico) * f(vazão etanol)}{f(vazão agua)} \quad (13)$$

A otimização das variáveis da rede neural indicou a utilização de dois neurônios do tipo tangente hiperbólica, apresentando um coeficiente de correlação de 0,9988. A Figura 16 apresenta a curva de aptidão da rede neural.

Figura 16 – Dispersão de aptidão da rede neural



Fonte: Autor, 2022.

Em seguida foi utilizado outro código com o algoritmo de *differential evolution* para a otimização das variáveis, objetivando maximizar a função objetivo $G(x)$, Equação 13. As Tabelas 9 e 10 representam, respectivamente, os resultados obtidos pela otimização por *diferencial evolution* e, as frações mássicas resultantes.

Tabela 9 – Resultados obtidos da otimização por *diferencial evolution*.

Variáveis	Valores
Temperatura do gás	15°C
Temperatura do líquido	15°C
Vazão de água	36,34 kmol/h

Fonte: Autor, 2022.

Tabela 10 – Fração mássica das correntes da coluna de absorção

Componentes	Topo	Base
Água	0,0062	0,9300
Etanol	0,0001	0,0678
Gás carbônico	0,9937	0,0023

Fonte: Autor, 2022.

Levando em consideração as vazões, foram recuperados 45,72kg/h dos 46,07kg/h de etanol presentes na corrente gasosa proveniente das dornas de fermentação. Isto representa 99,24% do etanol recuperado, gerando uma corrente com 6,78°INPM, estando acima da média do percentual alcoólico obtido no vinho. Por outro lado, deve-se levar em conta, o custo financeiro de aquisição e montagem de equipamentos e periféricos, bem como operacional, para manter a temperatura a 15°C, o que só poderá ser obtido com uso de água gelada, ou seja, sistema de refrigeração.

4 CONCLUSÃO

Este estudo teve por objetivo a otimização do processo de absorção gasosa proveniente de uma usina de produção de álcool, utilizando o software *ASPEN HYSYS V.10*. A simulação levou em consideração o dimensionamento da coluna e suas variáveis de processo como, pressão, temperatura e vazão de água. Foram obtidos dados da Usina Caeté S/A para realização deste trabalho.

A partir das análises realizada no pacote computacional *ASPEN HYSYS V.10* foi possível isolar as principais variáveis de projeto e de processo, projetando uma coluna de absorção de recheio adequada para a produção da planta. Adicionalmente, foi possível treinar uma rede neural com alta precisão, otimizando os dados através do método de *Differential Evolution*.

Conforme os dados apresentados no trabalho, a substituição da coluna de absorção de pratos por uma de recheio apresenta melhoras significativas para o processo com recuperação superior a 99% do etanol arrastado. Através do controle das variáveis de temperatura e vazão foi possível obter uma solução com um teor alcoólico de 6,78°INPM, enquanto o etanol produzido no processo industrial de apresenta uma concentração de 6,66°INPM. O atual sistema, produz um efluente tratado com 0,25° INPM. Portanto, quanto comparado com torre de pratos, a coluna de absorção de recheio permite a utilização de vazão de água muito inferior, gerando corrente com um percentual de álcool muito mais elevado.

No sistema de absorção proposto, há um aumento da produção de etanol, em decorrência do teor alcoólico da corrente de recuperação de álcool se aproximar do teor alcoólico da corrente produzida no processo industrial de fabricação de etanol. Assim sendo, ambas seguirão para o processo de purificação de álcool. Além disso, haverá uma redução significativa, superior a 95%, do volume de água utilizado no sistema de recuperação do álcool, por absorção, na planta industrial.

Portanto, este processo é muito mais efetivo que o atualmente utilizado, apresentando muitos ganhos para a planta industrial, além do aumento de produção de etanol pela recuperação do álcool arrastado nas dornas. Atualmente, a corrente contendo o álcool recuperado das dornas, com 0,25 °INPM, é misturado ao mosto para fermentação, apenas como forma de não contaminar o meio ambiente, porém, não apresentando ganhos para o processo.

REFERÊNCIAS

- ANP, Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, 2014.
- BIRD R. B., STEWART W. E., LIGHTFOOT E. N., "Transport Phenomena", John Wiley & Sons, Inc., New York, 1969
- BLACK, C., DITSLER, D.E. Dehydration of aqueous ethanol mixtures by extractive distillation. Extractive and Azeotropic Distillation. Advances in Chemistry series, 115, American Chemical Society, Washington, D.C., 1974.
- BNDES/CGEE. Bioetanol de cana-de-açúcar: energia para o desenvolvimento sustentável. BNDES, 2008.
- CARDOSO JÚNIOR, L., FRANÇA, C. I. F., ZAPPAROLI, I. D., FARIA, N. C. "Sustentabilidade e análise de solvência: um estudo de empresas selecionadas de capital aberto do setor de açúcar e álcool no Brasil." *Economia & Região* 3.2, 89, 2015.
- CUSSLER E L "Diffusion Mass transfer in fluid systems" 2nd ed Cambridge University Press ,1997.
- DAS, S., A. ABRAHAM, U.K CHAKRABORTY, AND A. KONAR. "Differential Evolution Using a Neighborhood-Based Mutation Operator." *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* 13.3 (2009): 526-53. Web.
- DAS, SWAGATAM, SANKHA SUBHRA MULLICK, and P.N. SUGANTHAN. "Recent Advances in Differential Evolution – An Updated Survey." *Swarm and Evolutionary Computation* 27 (2016): 1-30. Web.
- DIAS, MARINA O.S., MARCELO P. CUNHA, CHARLES D.F. JESUS, GEORGE J.M. ROCHA, JOSÉ GERALDO C. PRADELLA, CARLOS E.V. ROSSELL, RUBENS MACIEL FILHO, AND ANTONIO BONOMI. "Second Generation Ethanol in Brazil: Can It Compete with Electricity Production?" *Bioresource Technology* 102.19 (2011): 8964-971. Web.
- EYNG, E., DA SILVA, F. V., PALÚ, F., FILETI, A. M. F. Neural Network Based Control of an Absorption Column in the Process of Bioethanol Production. *Brazilian Archives of Biology and Technology* 52.4 (2009): 961-72.
- EZEJI, T. C.; QURESHI, N.; BLASCHEK, H. P. *World J. Microbiol. Biotechnol.* 19, p. 595–603, 2003.
- GIL, I.D., UYAZÁN, A.M., AGUILAR, J.L., RODRÍGUEZ, G., CAICEDO, L.A., Simulation of ethanol extractive distillation with a glycols mixture as entrainer, 4º ENPROMER, Costa Verde, RJ, Brasil, 2005.
- GUEVARA, A. J. H.; SILVA, O. R., HASEGAWA, H., VENANZI, D. Avaliação de sustentabilidade da produção de etanol no Brasil: Um modelo em dinâmica de sistemas. *Brazilian Business Review*, v.14, n.4, p.435-447, 2017.

- HASHI, M. Etahnol recovery from carbom dioxide stripped etanol-water vapor mixture using adsorption. 2010. 143 p Dissertação (mestrado em engenharia química) – Departamento de Engenharia Biológica e Química, Universidade de Ottawa, Ottawa, Canadá, 2010. Disponível em <https://www.ruor.uottawa.ca/handle/10393/28549>, acesso 04 maio 2022.
- HENLEY, E.J., SEADER, J.D. Equilibrium-stage separation operations in Chemical Engineering. John Wiley & Sons, New York, 1981.
- J.D. SEADER AND E.J. HENLEY “Separation Process Principles” 2nd ed. John Wiley & Sons, 2006.
- KWIATKOWSKI, JASON R., ANDREW J. MCALOON, FRANK TAYLOR, DAVID B. JOHNSTON. "Modeling the Process and Costs of Fuel Ethanol Production by the Corn Dry-grind Process." *Industrial Crops and Products* 23.3 (2006): 288-96. Web.
- Labvirtual, <http://labvirtual.eq.uc.pt/siteJoomla/index.php?Itemid=311#inicio>. Acesso em 10/10/2022
- MAPA, Portaria nº 143 do Ministério da agricultura, Pecuária e Abastecimento nº 143 de 27/06/2007 - Normas Brasil, Disponível em https://www.normasbrasil.com.br/norma/portaria-143-2007_200314.html. Acesso em 30/04/2022.
- MARQUINI, M.F. et al., 2007. Simulação e análise de um sistema industrial de colunas de destilação de etanol. *Acta Scientiarum. Technology*, Vol.29, pp12-18, 2007
- RASOVSKY, E. M. Álcool, destilarias. Coleção canavieira, n. 12, Rio de Janeiro: IAA, 1973.
- RESTREPO, M. L.; ARIAS, J. A. Modeling and simulation of saline extractive distillation columns for the production of absolute ethanol. *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, p. 527-549, 2003.
- RODRIGUES, K.C.S. et al., 2019. Ethanol Recovery from Stripping Gas Mixtures by Gas Absorption: Experimental and Modeling. *Energy & fuels*, 33(1), pp.369–378.
- SANTOS, M. C. R. Quantificação e remoção de íons de cobre em aguardente de canadeaçúcar. 2009. Dissertação (Mestre em Engenharia de Processos Químicos e Bioquímicos). Escola de Engenharia Mauá do Centro Universitário do Instituto Mauá de Tecnologia, São Caetano do Sul, 2009.
- SILVA, C. R. et al. Influência das variáveis operacionais na remoção de etanol de vinho devedurado por CO₂, In: Congresso Brasileiro de engenharia química, 10., 2014, Florianópolis. *Blucher Chemistry Engineering Proceedings*, São Paulo: Blucher, v.1, n.2, p 15405-1542, 2014.
- SILVA, J. S. Produção de Álcool Combustível na Fazenda e em Sistemas Cooperativos. Viçosa: [s.n.], 2007.
- SOLOMONS, T.W.G & FRYHLE, C. Química Orgânica, vol. 1, LTC Editora, Rio de Janeiro, RJ, 2005.

- SONEGO, J. L. S.; LEMOS, D. A.; CRUZ, A. J. G.; BADINO, A. C. *Energy Fuels*, 32, p954–960, 2017.
- Storn R., Price K., Differential evolution – A simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces, *J. Global Optim.* 11 (1997) 341–359, <http://dx.doi.org/10.1023/A:1008202821328>
- TAYLOR, F; KURANTZ, M. J.; GOLDBERG, N.; CRAIG, J. C., JR. Effects of ethanol concentration and stripping temperature on continuous fermentation rate. *Appl Microbiol Biotechnology*, v.48, p. 311-316, 1997.
- TAYLOR, F.; MARQUEZ, M. A.; JOHNSTON, D. B.; GOLDBERG, N. M.; HICKS, K. B. *Bioresour. Technol.* 101, 4403–4408, 2010.
- Wankat P. C., “Separation Process Engineering”, 2nd ed., Prentice-Hall, 2007.
- ZHANG J., XIAO M., GAO L., PAN Q., Queuing search algorithm: A novel metaheuristic algorithm for solving engineering optimization problems, *Appl. Math. Model.* 63 (2018) 464–490, <http://dx.doi.org/10.1016/j.apm.2018.06.036>.
- ZHANG, YIYING, ZHIGANG JIN, and YE CHEN. "Hybrid Teaching–learning-based Optimization and Neural Network Algorithm for Engineering Design Optimization Problems." *Knowledge-based Systems* 187 (2020): 104836. Web.

ANEXO A – Código do ANN

```
# -*- coding: utf-8 -*-
```

```
"""jrTCC.ipynb
```

Automatically generated by Colaboratory.

Original file is located at

https://colab.research.google.com/drive/1egeseo5lmgC5yW_3XsLyC_IE-MeFylRT

```
"""
```

```
# Commented out IPython magic to ensure Python compatibility.
```

```
import os
```

```
import numpy as np
```

```
import pandas as pd
```

```
import matplotlib.pyplot as plt
```

```
from sklearn.neural_network import MLPRegressor
```

```
from sklearn.metrics import mean_squared_error
```

```
from sklearn.metrics import r2_score
```

```
import random
```

```
# %matplotlib inline
```

```
# Commented out IPython magic to ensure Python compatibility.
```

```
!git clone https://github.com/johnnypirolise/TCC
```

```
# %cd TCC
```

```
!ls
```

```
# funcao normaliza dados
```

```
def Normaliza(x):
```

```
    strings=list(x)
```

```
    for i in strings:
```

```
        max_x=x[i].max()
```

```
        min_x=x[i].min()
```

```

a=(max_x+min_x)/2
b=(max_x-min_x)/2
x[i]=(x[i]-a)/b
return x

```

```

def Original(x,x_old):
    strings=list(x)
    for i in strings:
        max_x=x_old[i].max()
        min_x=x_old[i].min()
        a=(max_x+min_x)/2
        b=(max_x-min_x)/2
        x[i]=x[i]*b+a
    return x

```

```

def rede(i,j):
    clf = MLPRegressor(solver='lbfgs',activation='tanh',alpha=1e-5,
hidden_layer_sizes=(i),random_state=j)
    return clf

```

```
Melhor=1e99
```

```
N= 10 #i numero de neuronios
```

```
M= 10 #j randm state seed
```

```
O= 10 #k numero de vezes
```

```

DAT=pd.read_csv("Geral_para_rede_neural_final.csv")
print(DAT)

```

```
for k in range(0,O):
```

```
    # leitura dos dados
```

```
    DAT=pd.read_csv("Geral_para_rede_neural_final.csv")
```

```
    # separa as colunas de interesse
```

```
    Index=[0,1,2,3]
```

```

Dat_Select=[]
Dat_Select=DAT.iloc[:,Index].copy()

# separa os dados em normatizados e originais
DAT_OLD=[]
DAT_OLD=Dat_Select.copy()
DAT=Normatiza(Dat_Select)

# separa os dados em treino e teste
train=[]
test=[]
train=DAT.sample(frac=0.8,random_state=k).copy()
test=DAT.drop(train.index).copy()

# obtem as variaveis independentes (treino e teste)
x_train=train.iloc[:,[0,1,2]]
x_test=test.iloc[:,[0,1,2]]
X_OLD=DAT_OLD.iloc[:,[0,1,2]]

# obtem as variaveis dependentes (treino e teste)
Index=[3]
y_train=train.iloc[:,Index]
y_test=test.iloc[:,Index]
Y_OLD=DAT_OLD.iloc[:,Index]
test=Original(y_test,Y_OLD)
resist_obs_test=[]
resist_obs_train=[]
resist_obs_test=test['yobj'].copy()
for i in range(1,N):
    for j in range(0,M):
        col_names=list(y_train)
        clf=rede(i,j)
        clf.fit(x_train, y_train.values.ravel())
        y_calc_train=[]

```

```

y_calc_test=[]
y_calc_train=clf.predict(x_train)
y_calc_test=clf.predict(x_test)
y_calc_train=pd.DataFrame(y_calc_train)
y_calc_test=pd.DataFrame(y_calc_test)
y_calc_train.columns = col_names
y_calc_test.columns = col_names
y_calc_train=Original(y_calc_train,Y_OLD)
y_calc_test=Original(y_calc_test,Y_OLD)
resist_calc_train=[]
resist_calc_test=[]
resist_calc_train=y_calc_train['yobj'].copy()
resist_calc_test=y_calc_test['yobj'].copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_test,resist_calc_test)
R2_teste=r2_score(resist_obs_test,resist_calc_test)
print("Neuronios=",i,"Seed=",j,"MSE teste=",mse,"R^2 teste=",R2_teste)
if(mse<Melhor):
    Melhor=mse.copy()
    ix=i
    jx=j
    R2r=R2_teste
    seed_sample = k
    resist_obs_train_top=Original(y_train,Y_OLD)
    resist_calc_train_top = resist_calc_train.copy()
    resist_obs_test_top = resist_obs_test.copy()
    resist_calc_test_top = resist_calc_test.copy()

mse=mean_squared_error(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)
R2=r2_score(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)

print("\n Melhor resposta:")
print("Neuronios=",ix,"Seed=",jx,"Seed_sample",seed_sample,"MSE teste=",Melhor,"R^2
teste=",R2r,"MSE treino=",mse,"R^2 treino=",R2)

```

```
resist_obs_train_top=pd.DataFrame(resist_obs_train_top)
resist_calc_train_top=pd.DataFrame(resist_calc_train_top)
resist_obs_test_top=pd.DataFrame(resist_obs_test_top)
resist_calc_test_top=pd.DataFrame(resist_calc_test_top)

print(resist_obs_train_top.head())
print(resist_calc_train_top.head())
print('=====')
print(resist_obs_test_top.head())
print(resist_calc_test_top.head())

plt.plot(resist_obs_test_top,resist_calc_test_top, color='red',linewidth = 0,
marker='o',markerfacecolor='black', markersize=5,label='teste')
plt.ylabel('Valor Predito')
plt.xlabel('Valor Observado')
plt.legend()
plt.xticks(np.arange(0.0, 0.03, 0.005))
plt.yticks(np.arange(0.0, 0.03, 0.005))
plt.show()
```

ANEXO B –Código do OptimizationDE

```
# -*- coding: utf-8 -*-
```

```
"""Optimization.ipynb
```

Automatically generated by Colaboratory.

Original file is located at

https://colab.research.google.com/drive/1Yc7wY_aKbQvq4XpHWM2wmeFDT6fMnCT7

```
"""
```

```
import numpy as np
```

```
import pandas as pd
```

```
from scipy.optimize import differential_evolution
```

```
from sklearn.model_selection import train_test_split
```

```
from sklearn.ensemble import RandomForestRegressor as RF
```

```
from sklearn.metrics import mean_squared_error
```

```
from sklearn.neural_network import MLPRegressor
```

```
import scipy
```

```
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
```

```
import matplotlib.pyplot as plt
```

```
# Commented out IPython magic to ensure Python compatibility.
```

```
!git clone https://github.com/johnnypirolise/TCC
```

```
# %cd TCC
```

```
!ls
```

```
DAT=pd.read_csv("Geral_para_rede_neural_final.csv")
```

```
print(DAT)
```

```
def Normaliza(x):
```

```
    strings=list(x)
```

```
    for i in strings:
```

```

    max_x=x[i].max()
    min_x=x[i].min()
    a=(max_x+min_x)/2
    b=(max_x-min_x)/2
    x[i]=(x[i]-a)/b
return x

# separa as colunas de interesse
Index=[0,1,2,3]
Dat_Select=[]
Dat_Select=DAT.iloc[:,Index].copy()

# separa os dados em normalizados e originais
DAT_OLD=[]
DAT_OLD=Dat_Select.copy()
DAT=Normaliza(Dat_Select)

boundaries = [(DAT['x1'].min(), DAT['x1'].max()),(DAT['x2'].min(),
DAT['x2'].max()),(DAT['x3'].min(), DAT['x3'].max())]

print(boundaries)

Limite=(DAT['yobj'].min(), DAT['yobj'].max())
print(Limite)

X = DAT[['x1', 'x2', 'x3']]
Y = DAT['yobj']
log_model = LogisticRegression(solver='lbfgs', max_iter=1000000)
X_train, X_test, Y_train, Y_test = train_test_split(X,Y, test_size=0.8,
random_state=(9))

clf = MLPRegressor(solver='lbfgs',activation='tanh',alpha=1e-5,
hidden_layer_sizes=(3),random_state=2)
clf.fit(X_train.values, Y_train.values.ravel())

```

```
y_pred = clf.predict(X_test)
print(y_pred)
```

```
def obj_fun(X):
    X = [X]
    results = clf.predict(X)
    return -results
```

```
opt_results = differential_evolution(obj_fun, boundaries)
```

```
print(opt_results)
```

```
opt_results = differential_evolution(obj_fun, boundaries, disp=True)
```

```
print('x1', opt_results.x[0])
print('x2', opt_results.x[1])
print('x3', opt_results.x[2])
print('y', opt_results.fun)
```

```
def Original(x,X_OLD):

    for i in range(3):
        max_x=X_OLD[i].max()
        min_x=X_OLD[i].min()
        a=(max_x+min_x)/2
        b=(max_x-min_x)/2
        x[i]=x[i]*b+a
    return x
```

```
Temp1 = opt_results.x[0]*10+25
Temp2 = opt_results.x[1]*7.5+22.5
Vazao = opt_results.x[2]*90+110
print(Temp1)
print(Temp2)
```

```
print(Vazao)

plt.plot(resist_obs_test_top, resist_calc_test_top, color='green', linestyle='dashed',
linewidth = 0, marker='o', markerfacecolor='red', markersize=5, label='teste')
plt.legend(loc='upper left')
plt.ylabel('Valor Predito')
plt.xlabel('Valor Observado')
plt.legend()
plt.xticks(np.arange(0.0, 0.05, 0.01))
plt.yticks(np.arange(0.0, 0.05, 0.01))
plt.show()
```