



MODELAGEM, SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DE UMA PLANTA DE EXTRAÇÃO DE ÓLEOS ESSENCIAIS POR ARRASTE A VAPOR

Rafael B. Sartor¹, Argimiro R. Secchi², Rafael P. Soares¹, Eduardo Cassel³

¹ Grupo de Intensificação, Modelagem, Simulação e Controle de Processos (GIMSCOP) – UFRGS

² Programa de Engenharia Química – COPPE – UFRJ

³ Laboratório de Operações Unitárias – Faculdade de Engenharia – PUC – RS

Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)

R. Eng. Luis Englert, s/n. Campus Central. CEP: 90040-040 - Porto Alegre - RS - BRASIL,

E-MAIL: {busato, rafael}@enq.ufrgs.br, arge@peq.coppe.ufrj.br, cassel@puccrs.br

Resumo: *Esse trabalho aborda a modelagem matemática do processo de extração do óleo essencial de alecrim, por arraste a vapor e a otimização deste processo em escala industrial. Os dados experimentais foram obtidos em uma unidade industrial de extração por arraste a vapor. Para resolver o modelo desenvolvido, utilizou-se o método das linhas com o uso da técnica de diferenças finitas para discretizar a derivada espacial, resultando em um sistema de equações diferenciais ordinárias implementado no simulador EMSO. Os parâmetros do modelo foram estimados pelo método dos poliedros flexíveis, utilizando dois conjuntos de dados experimentais e um terceiro conjunto para a sua validação. O modelo ajustou-se bem aos dados experimentais industriais, resultando, para duas condições operacionais distintas, em coeficiente global de transferência de massa de $8,64 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ e $9,10 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, e a constante de equilíbrio de $2,72 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{kg}$ e $1,07 \times 10^{-2} \text{ m}^3/\text{kg}$. A otimização do processo indica que se pode reduzir o tempo de extração, permitindo que outras extrações sejam realizadas por dia.*

Palavras-chave: *óleos essenciais, arraste a vapor, modelagem matemática, simulação dinâmica.*

1 Introdução

O crescimento da produção de óleos essenciais na América Latina está fortemente baseado em dois componentes da cadeia produtiva: o desenvolvimento agrônomico de plantas aromáticas e a inserção de metodologias analíticas avançadas que determinam a composição. Entretanto, o processo produtivo industrial de óleos essenciais, todavia continua sendo um gargalo a ser preenchido por este setor industrial.

Alguns estudos estão sendo realizados com o objetivo de empregar modelos matemáticos para representar o comportamento dos processos extrativos por arraste a vapor, como Cassel e Vargas (2006) que utilizaram o modelo da segunda lei Fick para representar a extração de óleo essencial de citronela em escala laboratorial. Benyoussef *et al.*, (2002) empregaram a hidrodestilação para obter óleo essencial de frutos de coentro (*Coriandum sativum L.*). Os autores consideraram a extração como uma dessorção irreversível do óleo essencial em água, com velocidade de primeira ordem e vaporização instantânea devido ao equilíbrio de fases formado. A difusão intrapartícula do óleo em água foi considerada a etapa controladora. Sovová e Aleksovski (2006) desenvolveram um modelo para a hidrodestilação e destilação por arraste a vapor, considerando o óleo essencial como pseudo-

componente e considerando a difusão do soluto dentro da partícula como etapa controladora. Esse modelo é aplicado quando a planta aromática está submersa em água, considerando que todo o óleo essencial se encontre livre na superfície e disponível.

A carência tecnológica é um dos motivos que dificultam a descrição precisa dos processos de extração de óleos essenciais por destilação por arraste a vapor em escala industrial. Alguns aspectos são importantes neste sentido como a falta de informações experimentais sobre o comportamento da extração ao longo do leito, normalmente preenchidos com as partes aéreas das plantas aromáticas e a dificuldade na obtenção de dados exatos sobre a quantidade total de óleo na folha. Esta última é definida como a quantidade máxima de óleo essencial que pode ser extraída da massa verde e, conseqüentemente, varia com o processo extrativo e as condições operacionais deste processo. A grande diferença está na matéria-prima, que apresenta significativas variações em função de condições climáticas e regiões geográficas onde são cultivadas, tornado os processos envolvendo produtos naturais peculiares no setor químico. Ao contrário da grande maioria dos processos químicos, onde as propriedades das matérias-primas são praticamente constantes. Desta forma, desenvolveu-se um modelo generalizado a fim de descrever o processo de destilação

por arraste a vapor para diferentes plantas aromáticas.

A destilação por arraste a vapor é um processo tradicional na obtenção de óleos essenciais de plantas aromáticas. A indústria utiliza esse método por ser um processo simples e barato quando comparado com métodos mais avançados tecnologicamente, como a extração por fluido supercrítico (CASSEL & VARGAS, 2006), visto que esta vem sendo a alternativa mais relevante, porém os custos de investimento e operação ainda inviabilizam sua aplicação em escala industrial (MARTINEZ, 2005).

Neste trabalho realiza-se um estudo teórico-experimental da dinâmica da extração por arraste a vapor em escala industrial. Os experimentos de extração do óleo essencial de alecrim (*Rosmarinus officinalis L.*) foram realizados na usina da empresa Tekton Óleos Essenciais Ltda., situada no município de Viamão – RS. De posse dos dados de extração, rendimento versus tempo, um modelo matemático, baseado na literatura (REVERCHON, 1996), foi desenvolvido e implementado no simulador EMSO (SOARES & SECCHI, 2003), com o objetivo de representar a curva de extração do óleo essencial de alecrim em função do tempo de extração.

2. Processo experimental

O processo industrial utilizado nas extrações opera da seguinte forma: a matéria prima vegetal é colocada no vaso extrator, de maneira que forme um leito fixo compactado. O vapor é gerado em uma caldeira externa alimentada a lenha, com pressão de 7 kgf/cm². Uma válvula de expansão reduz sua pressão para 1,2 kgf/cm², obtendo dessa forma vapor superaquecido a temperatura média de 378 K. O vapor é injetado no vaso extrator através de um distribuidor interno, próximo à base. Conforme o vapor entra em contato com o leito, aquece a matéria prima e vaporiza a parcela mais volátil do óleo essencial. O óleo é solubilizado no vapor circundante e é arrastado ao topo do vaso extrator. A mistura vapor de óleo essencial e vapor de água, que deixa o vaso extrator, percorre o condensador de serpentina, onde passa do estado vapor para o estado líquido, devido à refrigeração indireta por água à temperatura ambiente. A mistura condensada alimenta o vaso separador, chamado de vaso florentino, no qual a fase óleo essencial é separada da fase aquosa por diferença de densidade. A água residual é o hidrolato, utilizado para irrigar as plantações ou como água de colônia. Um esquema da extração por arraste a vapor é apresentado na Figura 1.

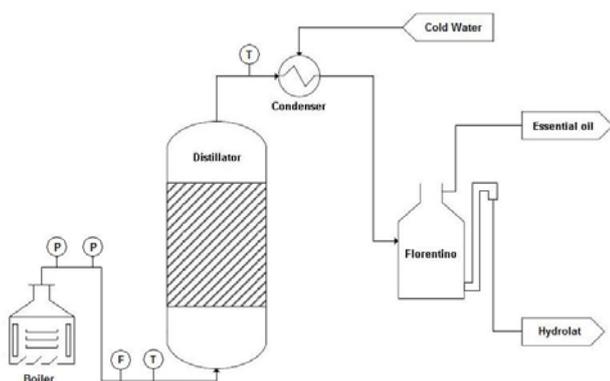


Figura 1. Fluxograma da extração por arraste a vapor.

Neste trabalho, foram realizados 05 experimentos de destilação industrial de óleo essencial de alecrim com massa de leito diferente, mas com as mesmas condições de operação do processo. Três deles ocorreram no começo do verão e são denominados neste trabalho como A630, A580 e A430. Outros dois experimentos ocorreram no inverno, aqui denominados por A457 e A352. O aquecimento do leito foi realizado da mesma forma para todos os experimentos, injetando vapor diretamente às plantas aromáticas. Na Tabela 1 é mostrada a massa de leito para cada um dos experimentos.

Tabela 1. Relação dos experimentos.

Exp.	Massa de leito (kg)	Altura do leito (m)
A630	630	2,4
A580	580	2,2
A430	430	1,6
A457	457	1,7
A352	352	1,3

3. Modelagem Matemática

A modelagem matemática da destilação por arraste a vapor é um passo inevitável no projeto de unidades industriais, visto que os mesmos são usados para simular e otimizar os processos. Logo, a correta representação matemática dos fenômenos físicos que ocorrem durante a extração dos óleos essenciais é o objetivo deste estudo, pois esta ferramenta permite prever o comportamento das extrações sem a necessidade de realizar os procedimentos experimentais.

Um modelo matemático dinâmico foi desenvolvido para descrever o processo industrial de extração por arraste a vapor. Para a implantação deste modelo as seguintes considerações simplificadoras são adotadas:

- O óleo extraído é constituído de vários compostos químicos, mas considerou-se como sendo representado por um pseudo-componente;
- O vapor d'água é uniformemente distribuído nas seções radiais do extrator e sua velocidade é considerada constante;
- A porosidade do leito não é afetada pela redução da massa ou pela compactação do leito que ocorre durante o processo de extração;
- O equilíbrio de fases é dado por uma relação linear da concentração do soluto.
- As concentrações de óleo no fluido e no sólido dependem do tempo de extração e da coordenada axial.
- A temperatura e pressão são consideradas constantes durante a extração.

A distribuição do pseudo-componente nas fases fluida e sólida é obtida através do balanço de massa na coluna. Negligenciando a dispersão radial ao longo da coluna, tem-se apenas duas variáveis independentes, o

tempo (t) e o comprimento da coluna (z). Assume-se que no início do processo a concentração de óleo nas plantas aromáticas é homogênea e igualmente dispersa em todo o leito. Baseado nas suposições listadas acima e no modelo desenvolvido por Reverchon (1996), o balanço de massa nas fases sólido e fluido é apresentado a seguir.

Vapor:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \frac{\partial C}{\partial z} - \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \rho_s \frac{\partial q}{\partial t} \quad \text{Eq. 01}$$

Sólido:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -k_{TM} (q - q^*) \quad \text{Eq. 02}$$

onde C é a concentração de óleo na fase fluido ($g_{\text{óleo}}/m^3_{\text{vapor}}$); q é concentração de óleo na planta aromática ($g_{\text{óleo}}/kg_{\text{leito}}$); u é a velocidade intersticial (m/s); ε é a porosidade do leito; k_{TM} é o coeficiente global de transferência de massa (s^{-1}); ρ_s é a massa específica da planta aromática ($g_{\text{leito}}/m^3_{\text{leito}}$). A relação de equilíbrio entre as fases, q^* , é descrita pela seguinte relação linear:

$$q^* = KC \quad \text{Eq. 03}$$

onde K é a constante de equilíbrio ($m^3_{\text{vapor}}/kg_{\text{leito}}$).

A resolução do modelo obedece as seguintes condições iniciais e de contorno:

Condições iniciais:

para $t = 0 \rightarrow C = 0$; $q = q_0$ em todo z

Condições de contorno:

para $z = 0 \rightarrow C = 0$ em todo t

Muitos autores modelaram a extração de óleos essenciais utilizando fluido supercrítico, onde os modelos da fase fluido são parecidos entre si, onde a diferença reside no termo da transferência de massa na fase sólida (REVERCHON *et al.*, 2000; REVERCHON & MARRONE, 2001; ZIZOVIC *et al.*, 2005). Em função do comportamento das curvas de extração para ambos os processos ser semelhante, pode-se utilizar o conhecimento associado à extração supercrítica para representar a destilação por arraste a vapor, desde que as propriedades do solvente supercrítico não sejam fatores relevantes na resposta do modelo matemático. Para alguns modelos, as propriedades do fluido supercrítico influenciam em parâmetros como o coeficiente de transferência de massa e o equilíbrio entre as fases.

4. Resultados e Discussões

Para resolver o sistema proposto, o método das linhas foi utilizado. Dividiu-se o comprimento do leito fixo, de altura H , em N partes iguais com altura característica h . Aplicou-se o método das diferenças finitas para discretizar a derivada no espaço obtendo um sistema de $2N$ equações diferenciais ordinárias. O modelo matemático foi implementado no simulador EMSO (SOARES & SECCHI, 2003), onde o sistema de equações é resolvido por um integrador de passos múltiplos. O coeficiente global de

transferência de massa, k_{TM} , e a constante de equilíbrio entre as fases, K , foram estimados pelo método dos mínimos quadrados ponderados utilizando um otimizador de poliedros flexíveis (NELDER & MEAD, 1965).

A curva de rendimento é obtida da razão entre massa de óleo extraída e a massa inicial do leito fixo. Os parâmetros foram estimados para os experimentos A630 e A430 ao mesmo tempo (Figura 2), comparando o valor do parâmetro estimado para a curva A580 (Figura 3). A Tabela 2 apresenta a estimativa da quantidade de óleo presente nas folhas aromáticas, feita pela análise da quantidade de óleo extraída no tempo final e fazendo uma estimativa desse parâmetro individualmente para cada curva experimental.

Tabela 2. Parâmetros estimados para cada experimento.

Exp.	q_0 ($g_{\text{óleo}}/kg_{\text{leito}}$)
A630	5,9
A580	6,2
A430	4,3
A457	4,6
A352	3,0

A estimativa da concentração de óleo inicial representa adequadamente os dados experimentais, porém essa concentração tem valor diferente, sendo obtido pela estimativa da quantidade total de óleo extraído em cada experimento.

Para o conjunto de dados experimentais A630, A580 e A430, o coeficiente global de transferência, k_{TM} , foi estimado em $8,64 \times 10^{-4} s^{-1}$ e a constante de equilíbrio, K , em $2,72 \times 10^{-4} m^3_{\text{vapor}}/kg_{\text{leito}}$. As simulações foram realizadas para tempo de extração superior ao realizado nos experimentos, demonstrando que não há mais variação no rendimento da extração.

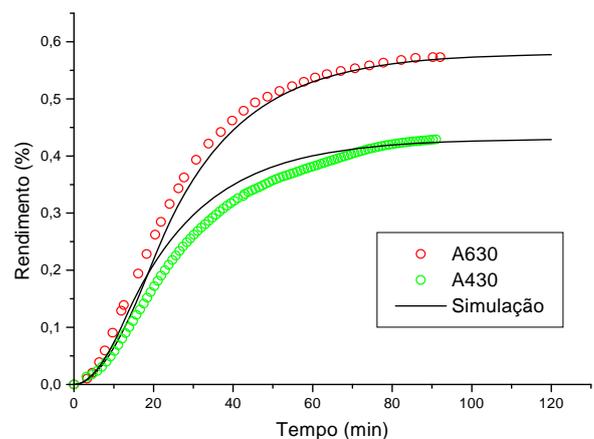


Figura 2. Simulação do rendimento nos experimentos A630 e A430.

Estimado os parâmetros para dois experimentos em conjunto, obteve-se uma comparação com o terceiro experimento, validando os parâmetros para os experimentos A630, A580 e A430, ilustrado na Figura 3.

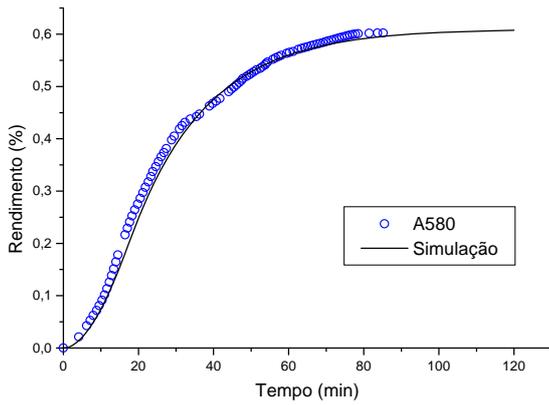


Figura 3. Simulação do rendimento no experimento A580.

De maneira semelhante, para o conjunto de dados A457 e A352, k_{TM} foi estimado em $9,10 \times 10^{-4} s^{-1}$ e K em $1,07 \times 10^{-2} m^3_{vapor}/kg_{leito}$. A Figura 4 apresenta a simulação das curvas variando a concentração de óleo inicial no leito.

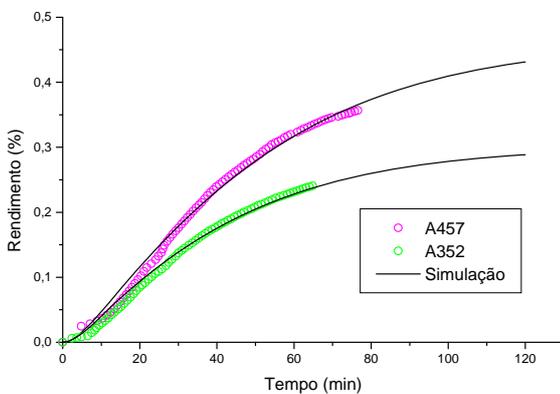


Figura 4. Simulação do rendimento nos experimentos A457 e A352.

Os experimentos A457 e A352 obtiveram menor rendimento em maior tempo de extração, como consequência, o coeficiente de transferência de massa e a constante de equilíbrio têm valores diferentes aos experimentos A630 e A580. Um fator importante a ser levado em conta, é a razão massa de vapor por massa de leito. Em todos os experimentos, a vazão de vapor foi a mesma enquanto a massa de leito é diferente. Se essa razão for muito alta, o que acontece nos experimentos A457 e A352, a porosidade do leito é grande e a quantidade de vapor circundante é alta. No caso do alecrim, quanto mais compactado for o leito melhor é a extração, pois o leito é formado de folhas e caules e quanto maior a quantidade de massa na extração, maior será a área de transferência de massa.

A otimização do processo é feita pela análise do custo operacional da extração. De certa forma, a redução do tempo de cada extração traz benefícios financeiros no gasto com vapor. Pode-se atingir um máximo de extração sem muita variação no rendimento final e em menor tempo de processo, possibilitando a realização de mais extrações ao longo do dia. O lucro da extração do óleo essencial é dado pela diferença entre o custo do processo e o valor agregado do óleo. Ou seja, o lucro terá um ponto de máximo em um determinado tempo de extração. Passado esse tempo, o lucro diminui conforme o gasto com vapor aumenta (Figura 5).

O lucro por extração é dado pelas seguintes equações:

$$L = R - C \quad \text{Eq. 04}$$

$$C = Q \cdot \rho_{vapor} \cdot P_{vapor} \cdot (t_{aq} + t) + P_{op} \cdot t \quad \text{Eq. 05}$$

$$R = P_{oleo} \cdot V_{oleo} \cdot t \quad \text{Eq. 06}$$

onde Q é a vazão de vapor (m^3/min); ρ_{vapor} é a densidade do vapor (kg/m^3); P_{vapor} é o preço do vapor ($R\$/kg$), P_{op} é preço por hora de trabalho dos operadores ($R\$/h$); P_{oleo} é o preço do óleo essencial ($R\$/l$); V_{oleo} é o volume de óleo extraído no tempo (l/min); t_{aq} é o tempo de aquecimento do leito (parâmetro fixo) e t é a variável tempo.

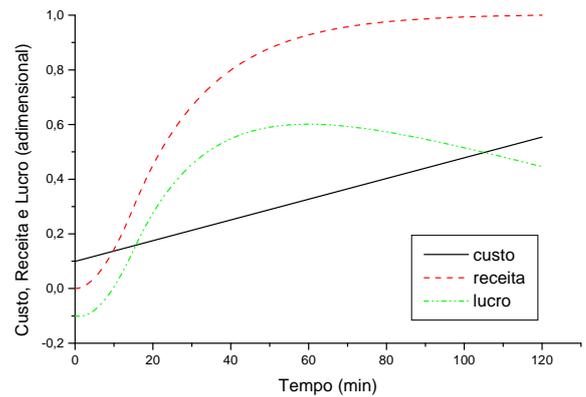


Figura 5. Relação do custo, receita e lucro por processo de extração. Valores adimensionados pelo máximo valor obtido.

Desta forma, pode-se observar que o consumo de vapor é linear enquanto que o lucro atinge seu máximo em aproximadamente 60 *min*.

Outra maneira de otimizar o processo é avaliar o tempo de parada do processo, considerando o tempo gasto no preparo da batelada e o tempo de aquecimento do leito. A função objetivo é encontrar o máximo de óleo extraído no menor tempo possível. Desta forma, pode-se definir a parada do processo de extração sem muita variação no rendimento e com menor consumo de vapor, reduzindo o tempo de batelada e permitindo maior quantidade de bateladas no dia. A Figura 6 mostra o tempo de otimização para o primeiro conjunto de dados experimentais. Já a Figura 7 apresenta a otimização para o segundo conjunto de dados experimentais.

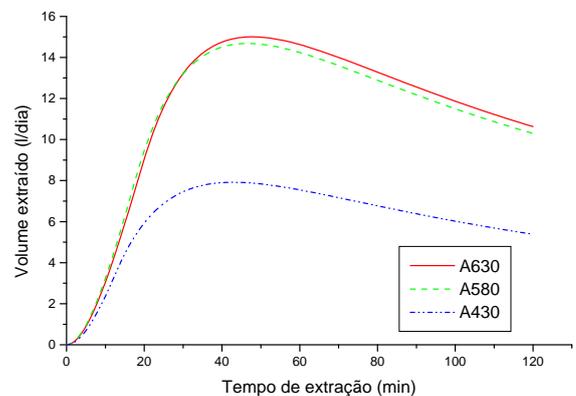


Figura 6. Volume total extraído no dia para curvas A630, A580 e A430, com tempo referente a cada extração.

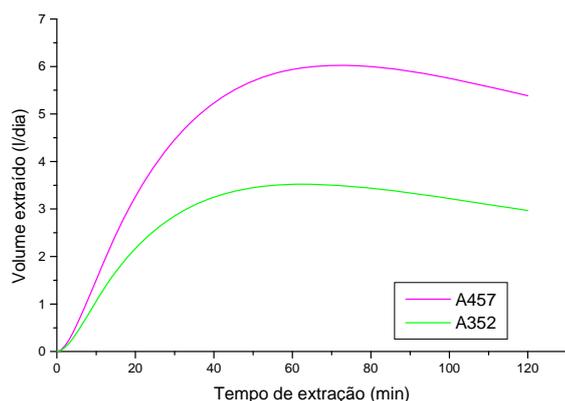


Figura 7. Volume total extraído no dia para curvas A457 e A352, com tempo referente a cada extração.

O tempo ótimo de cada extração ficou em torno de 45 *min* para o primeiro conjunto de dados e 70 *min* para o segundo. Isso se deve ao fato do equilíbrio ter levado maior tempo para ser alcançado. O volume extraído no dia é relacionado ao tempo de batelada, somado ao tempo de aquecimento e preparo da matéria prima e tempo para se produzir vapor na pressão desejada. Ou seja, para o primeiro conjunto de dados, se cada extração durar 45 *min*, considerando 1 *h* entre o preparo e aquecimento do leito, pode-se realizar 3 extrações em um dia e ter tempo para preparo da caldeira e encerramento das atividades do dia.

A diferença no tempo ótimo de extração se deve ao fato dos conjuntos de experimentos terem a constante de equilíbrio diferente, resultando em um tempo de extração mais longo.

5. Conclusões

Este estudo foi capaz de desenvolver um modelo matemático capaz de representar a curva de rendimento da extração de óleos essenciais em função do tempo, a partir de dados experimentais de um processo industrial. Este diferencial é importante, pois os estudos existentes nesta área do conhecimento são embasados em dados experimentais em escala laboratorial e a diferença de escala altera significativamente o comportamento do processo extrativo (CASSEL & VARGAS, 2006).

Observou-se que o modelo implementado neste estudo ajustou bem aos dados experimentais, sendo capaz de representar a extração de óleos essenciais por arraste a vapor. O coeficiente global de transferência de massa tem pouca diferença nos dois conjuntos estimados, enquanto que a constante de equilíbrio é a causadora na diferença da velocidade da extração. O equilíbrio entre as fases é formado pelo equilíbrio termodinâmico entre o leito e o vapor circundante.

Também é possível observar a sensibilidade da matéria-prima aos efeitos ambientais, visto que nos experimentos A457 e A352, realizados em um determinado período do ano, apresentam um rendimento significativamente inferior quando comparado com os experimentos A630, A580 e A430, realizados em outro período do ano. Este fato exige que as empresas levem em consideração as meteorológicas e geográficas ao definir as condições operacionais de um processo de destilação por arraste a vapor. Por isso, faz-se necessário um banco de

dados contendo diversos experimentos, obtendo um conjunto de parâmetros que podem representar bem a extração.

A otimização do processo indica que se pode encerrar a extração em menor tempo, obtendo bom rendimento com menor consumo de vapor. Reduzindo o tempo de extração, outras extrações podem ser realizadas no mesmo dia.

6. Referências

- CASSEL, E., VARGAS, R. M. F. Experiments and modeling of the *Cymbopogon winterianus* essential oil extraction by steam distillation. *J. Mex. Chem. Soc.*, v. 50(3), p. 126-129, 2006.
- BENYOUSSEF, E. H., HASNI, S., BELABBES, R., BESSIERE, J. M. Modeling of mass transfer during coriander essential oil extraction. *Chemical Engineering J.*, v. 85, p. 1-5, 2002.
- MARTÍNEZ, J. *Extração de óleos voláteis e outros compostos com CO₂ supercrítico: desenvolvimento de uma metodologia de aumento de escala a partir da modelagem matemática do processo e avaliação dos extratos obtidos*. Tese de Doutorado, UNICAMP, Campinas, SP, Brasil, 2005.
- NELDER, J. A., MEAD, R. A simplex-method for function minimization. *Computer J.*, v. 7(4), p. 308-313, 1965.
- REVERCHON, E., Mathematical Modeling of Supercritical Extraction of Sage Oil. *Bioengineering, Food and Natural Products*, v. 42, p. 1765-1771, 1996.
- REVERCHON, E., REIS-VASCO, E. M. C., COELHO, J. A. P., PALAVRA, A. M. F., MARRONE, C. Mathematical modelling and simulation of pennyroyal essential oil supercritical extraction. *Chemical Engineering Science*, v. 55, p. 2917-2922, 2000.
- REVERCHON, E., MARRONE, C. Modeling and simulation of the supercritical CO₂ extraction of vegetable oils. *J. Supercritical Fluids*, v. 19, p. 161-175, 2001.
- SOARES, R. P., SECCHI, A. R. EMSO: A new environment for modeling, simulation and optimization. EUROPEAN SYMPOSIUM ON COMPUTER AIDED PROCESS ENGINEERING, 13., 2003, Laaperanta, Anais.
- SOVOVÁ, H., ALEKSOVSKI, S. A. Mathematical model for hydrodistillation of essential oils. *Flavour Fragrance J.*, v. 21, p. 881-889, 2006.
- ZIZOVIC, I., STAMENIC, M., ORLOVIC, A. SKALA, D. Supercritical carbon dioxide essential oil extraction of Lamiaceae family species: Mathematical modelling on the micro-scale and process optimization. *Chemical Engineering Science*, v. 60, p. 6747-6756, 2005.