



SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DE UMA UNIDADE INDUSTRIAL DE EXTRAÇÃO DE ÓLEOS ESSENCIAIS POR ARRASTE A VAPOR

R. B. SARTOR¹, A. R. SECCHI², R. P. SOARES¹, E. CASSEL³

¹Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Departamento de Engenharia Química
e-mail: {busato, rafael}@enq.ufrgs.br

²Universidade Federal do Rio de Janeiro, Programa de Engenharia Química
e-mail: arge@peq.coppe.ufrj.br

³Pontifícia Universidade Católica – Rio Grande do Sul, Faculdade de Engenharia
e-mail: cassel@pu.rs.br

RESUMO – A destilação por arraste de vapor é um processo tradicionalmente utilizado na obtenção de óleos essenciais de plantas aromáticas e a indústria emprega esse método por ser mais econômico, comparado com métodos mais avançados tecnologicamente. Neste trabalho desenvolveu-se um modelo matemático para descrever o processo industrial de destilação por arraste de vapor, baseado no balanço de massa unidimensional para o óleo essencial e considerando a hipótese de força motriz linear para a transferência de massa entre as fases sólida e vapor. O coeficiente de transferência de massa e a constante de equilíbrio foram estimados pela técnica dos mínimos quadrados ponderados, utilizando o método dos poliedros flexíveis. Utilizaram-se cinco curvas experimentais de alecrim (*Rosmarinus officinalis* L.), obtidas em unidade industrial, na estimação dos parâmetros e validação do modelo matemático. O modelo matemático se ajustou bem aos dados experimentais, apresentando boa capacidade de predição do comportamento da extração.

PALAVRAS-CHAVE: óleos essenciais, destilação por arraste a vapor, modelagem matemática.

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 sua composição. Entretanto, o processo produtivo industrial de óleos essenciais ainda é um dos gargalos para o crescimento deste setor industrial.

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 e Vargas, 2006), que é a alternativa mais relevante, porém com custos de investimento e operação ainda proibitivos para a sua aplicação em escala industrial (Martinez, 2005).



Alguns estudos teórico-experimentais estão sendo realizados com o objetivo de empregar modelos matemáticos para representar o comportamento dos processos extrativos por arraste a vapor. Cassel e Vargas (2006) utilizaram o modelo de difusão transiente, empregando a 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 cinética de primeira ordem com respeito ao rompimento das células onde se encontra o óleo retido 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 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 encontra 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 precisos 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, as condições operacionais deste processo e, principalmente, com a matéria-

prima que apresenta significativas variações em função de condições climáticas e regiões geográficas onde são cultivadas. Ao contrário da grande maioria dos processos químicos, onde as propriedades das matérias-primas são praticamente constantes, esta grande variabilidade torna os processos envolvendo produtos naturais peculiares no setor químico.

Desta forma, através de um estudo teórico-experimental da dinâmica da extração por arraste a vapor em escala industrial, desenvolveu-se neste trabalho um modelo generalizado a fim de descrever o processo de destilação por arraste a vapor para diferentes plantas aromáticas. 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 e Secchi, 2003), com o objetivo de representar a curva de extração de óleos essenciais em função do tempo de extração.

2. APARATO EXPERIMENTAL

O processo industrial utilizado nas extrações opera da seguinte forma: a matéria-prima vegetal é colocada em um vaso extrator, de maneira a formar 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



arrastado ao topo do vaso extrator. A mistura contendo vapor de óleo essencial e vapor de água, que deixa o vaso extrator, é condensada por contato indireto com água à temperatura ambiente em um condensador de serpentina. 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.

Neste trabalho, foram realizados cinco 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 vA630, vA580 e vA430. Outros dois experimentos ocorreram no inverno, aqui denominados por iA457 e iA352. 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.

Tabelas 1 – Relação dos experimentos.

Exp.	Massa de leito (kg)	Altura de leito (m)
vA630	630	2,3
vA580	580	2,2
vA430	430	1,6
iA457	457	1,7
iA352	352	1,3

3. MODELAGEM MATEMÁTICA

A modelagem matemática da destilação por arraste a vapor é essencial 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 exaustivos procedimentos experimentais.

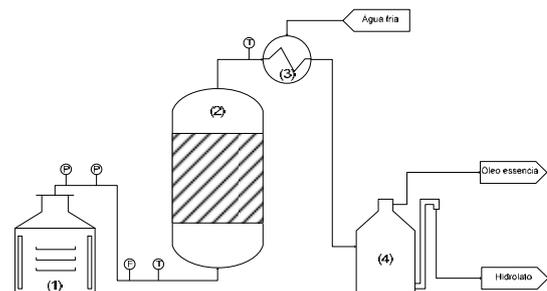


Figura 1 – Fluxograma simplificado da extração por arraste a vapor. (1) caldeira; (2) vaso extrator; (3) condensador; (4) vaso florentino.

O modelo matemático dinâmico, desenvolvido para descrever o processo industrial de extração por arraste a vapor foi baseado nas seguintes considerações simplificativas:

- O óleo extraído é constituído de vários compostos químicos, mas se considerou 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;



- A transferência de massa entre as fases sólida e vapor é governada por uma força motriz linear;
- 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 dispersão axial é negligenciada.

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). Considera-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:

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

Sólido:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -k_{TM} (q - q^*) \quad (2)$$

onde C é a concentração de óleo na fase fluido ($\text{g}_{\text{óleo}}/\text{m}^3_{\text{vapor}}$); q é o conteúdo de óleo na planta aromática ($\text{g}_{\text{óleo}}/\text{kg}_{\text{leito}}$); 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 ($\text{g}_{\text{leito}}/\text{m}^3_{\text{leito}}$). A relação de equilíbrio entre as fases, q^* , é descrita pela seguinte relação linear:

$$q^* = KC \quad (3)$$

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

A solução 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 para a fase fluida são parecidos entre si e a diferença reside no termo da transferência de massa na fase sólida (Reverchon *et al.*, 2000; Reverchon e 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. AJUSTE DO MODELO

Para resolver o sistema proposto no simulador EMSO (Soares e Secchi, 2003), o método das linhas foi utilizado. Dividiu-se o comprimento do leito fixo, de altura H , em N partes iguais e aplicou-se o método das diferenças finitas centrais para aproximar a derivada no espaço obtendo um sistema de $2N$ equações diferenciais ordinárias. O sistema de equações diferenciais foi



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 pela técnica dos mínimos quadrados ponderados, utilizando o método dos poliedros flexíveis (Nelder e Mead, 1965).

A curva de rendimento é obtida pela razão entre massa de óleo extraída e a massa inicial de óleo no leito fixo, q_0 . Os parâmetros foram estimados usando os dados dos experimentos vA630 e vA430 (Figura 2), e validados com os dados do experimento vA580 (Figura 3).

A Tabela 2 apresenta a estimativa do conteúdo inicial de óleo presente nas folhas aromáticas, feita pela análise da quantidade de óleo extraída no tempo final e estimando esse parâmetro individualmente para cada curva experimental. Esta quantidade varia com as condições climáticas, sendo um parâmetro difícil de prever com precisão. Porém, pelos resultados obtidos, pode-se dizer que a estimativa do conteúdo inicial de óleo representa adequadamente os dados experimentais, apesar de apresentar valores diferentes em cada experimento.

Tabelas 2 – Conteúdo inicial de óleo no leito estimado em cada experimento.

Exp.	q_0 (g _{óleo} /kg _{leito})
vA630	5,9
vA580	6,2
vA430	5,1
iA457	4,6
iA352	3,0

Para o conjunto de dados experimentais vA630, vA580 e vA430, o coeficiente global de transferência, k_{TM} , foi estimado em $(8,64 \pm 0,23) \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ e a constante de equilíbrio, K , em $(2,72 \pm 0,29) \times 10^{-4}$

$\text{m}^3_{\text{vapor}}/\text{kg}_{\text{leito}}$. As simulações foram realizadas para tempo de extração superior ao realizado nos experimentos, demonstrando que não há mais variação significativa no rendimento da extração.

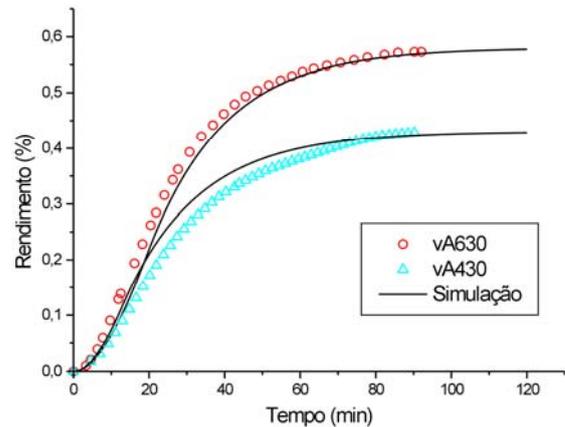


Figura 2 – Simulação do rendimento nos experimentos vA630 e vA430.

Estimado os parâmetros para dois experimentos em conjunto, obteve-se uma comparação com o terceiro experimento, validando os parâmetros para os experimentos vA630, vA580 e vA430, ilustrado na Figura 3.

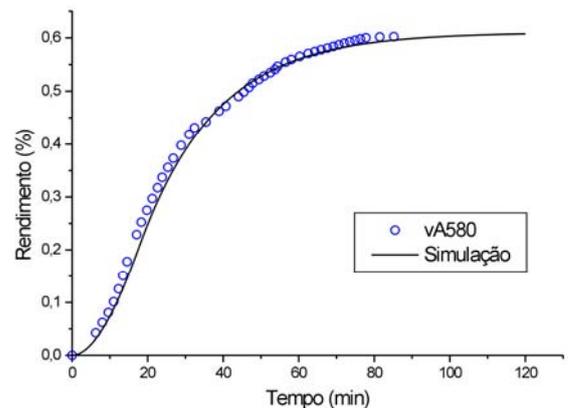


Figura 3 – Simulação do rendimento no experimento vA580.

De maneira semelhante, para o conjunto de dados iA457 e iA352, k_{TM} foi estimado em $(9,10 \pm 0,11) \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ e K em $(1,07 \pm 0,02) \times 10^{-2} \text{ m}^3_{\text{vapor}}/\text{kg}_{\text{leito}}$. A Figura 4 apresenta a simulação das curvas variando o conteúdo inicial de óleo no leito.

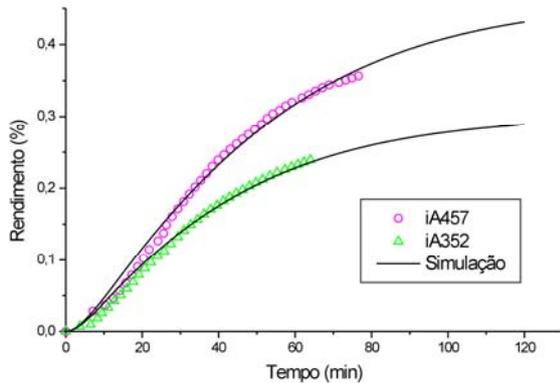


Figura 4 – Simulação do rendimento nos experimentos iA457 e iA352.

Os experimentos iA457 e iA352 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 vA630 e vA580. 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 foi diferente. Se essa razão for muito alta, o que aconteceu nos experimentos iA457 e iA352, a porosidade do leito é grande e a quantidade de vapor circundante é alta. No caso do alecrim, quanto mais compactado for o leito maior será o rendimento da extração, pois o leito é formado de folhas e caules cilíndricos. Quanto maior a quantidade de massa na extração, melhor é a ocupação interna do vaso extrator, reduzindo os espaços vazios.

5. OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO

Propôs-se uma metodologia para otimizar o processo pela análise operacional da extração, reduzindo o tempo de cada extração, com aumento de produção e redução do consumo diário de vapor. A intenção dessa otimização é maximizar a produção de óleo essencial por dia de extrações, reduzindo o tempo de cada extração e aumentando o número de bateladas no dia, resultando em maior volume total de óleo extraído. Este objetivo é

traduzido na função apresentada na Equação (4):

$$V_T = \frac{m(z_N, t)}{\rho_{\text{óleo}}} \left(\frac{t_{\text{dia}} - t_{\text{caldeira}}}{t_p + t_{aq} + t} \right) \quad (4)$$

onde V_T é o volume total extraído ao final de um dia de operação, considerando que todas as extrações durem o mesmo tempo; $m(z_N, t)$ é a massa de óleo acumulada em uma extração; $\rho_{\text{óleo}}$ é a massa específica do óleo essencial; t_{dia} é o tempo de operação em um dia de trabalho; t_{caldeira} é o tempo para que a caldeira atinja a pressão desejada; t_p é o tempo de preparo do leito; t_{aq} é o tempo de aquecimento do leito; t é a variável independente do tempo de extração. A parcela entre parêntesis na Equação (4) representa o número de extrações em um dia de operação. A massa de óleo acumulada ao longo do leito é obtida pela integração da Equação (5), juntamente com as Equações (1) a (3).

$$\frac{\partial m}{\partial t} = C Q \quad (5)$$

onde Q é a vazão volumétrica de vapor ($\text{m}^3_{\text{vapor}}/\text{s}$) e a condição inicial é $m(z, 0) = 0$.

Essa formulação leva em consideração que seja utilizado somente um tipo de matéria-prima e que a vazão de vapor seja a mesma em todas as extrações. A Figura 5 mostra o tempo de otimização para o primeiro conjunto de dados experimentais. Já a Figura 6 apresenta a otimização para o segundo conjunto de dados experimentais. Os resultados foram obtidos considerando que todas as extrações sejam realizadas em um dia de trabalho de 8 h, com 1 h para a caldeira atingir a pressão desejada e tempos de preparo e aquecimento de 30 min cada.

Vale ressaltar que o volume final obtido é dependente do conteúdo inicial de óleo presente nas folhas, q_0 , sendo que o



importante nessa otimização é reduzir o tempo de cada extração, obtendo o máximo de rendimento ao fim do dia. Para saber quantas extrações podem ser realizadas em um dia de trabalho, tem-se:

$$n = \frac{t_{dia} - t_{caldeira}}{t_p + t_{aq} + t_{opt}} \quad (6)$$

onde t_{opt} é o tempo ótimo de extração.

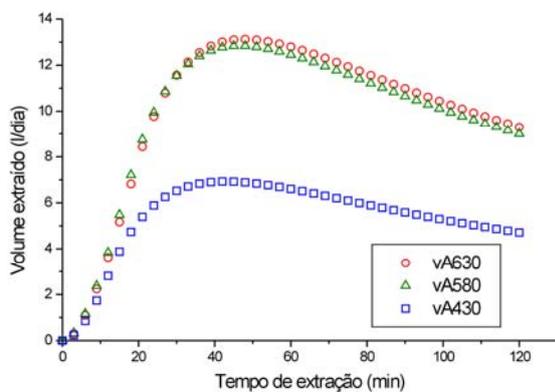


Figura 5 – Volume total extraído em função do tempo de extração para as curvas vA630, vA580 e vA430.

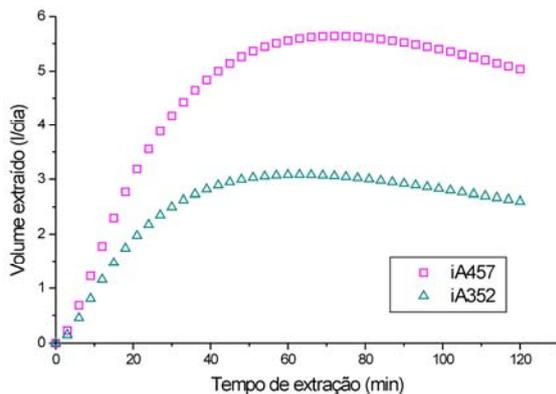


Figura 6 – Volume total extraído em função do tempo de extração para as curvas iA457 e iA352.

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 esgotamento do leito ter levado maior tempo para ser alcançado no segundo conjunto. Esta diferença no tempo

ótimo de extração se deve ao fato dos conjuntos de experimentos terem constantes de equilíbrio diferentes, resultando em um tempo de extração mais longo para os experimentos realizados no inverno.

5. CONCLUSÕES

Neste trabalho foi desenvolvido 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 e 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 maior fonte de diferenças da velocidade da extração.

Também é possível observar a sensibilidade da matéria-prima aos efeitos ambientais, visto que os experimentos iA457 e iA352, realizados no inverno, apresentam um rendimento significativamente inferior quando comparados com os experimentos vA630, vA580 e vA430, realizados no verão. Este fato indica que as condições climáticas devem ser levadas em conta ao definir as condições operacionais de um processo de destilação por arraste a vapor para extração de óleos essenciais. Por isso, faz-se necessário um banco de dados contendo diversos experimentos, obtendo um conjunto de parâmetros que podem representar bem as condições de 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 aumentando o volume total extraído.

6. REFERÊNCIA

- 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.