

Intensificação do Processo de Separação da mistura Metanol e Tolueno via Recompressão de Vapor

Leomário Guedes do Nascimento^{a*}, Arthur Felipe Pereira de Jesus^b, Fernanda Ribeiro Figueiredo^c,
Wagner Brandão Ramos^d, Diego Martinez Prata^e

^{a*,b,d}UFCG, Departamento de Engenharia Química, Campina Grande-PB, Brasil

^cUFRJ, Departamento de Engenharia Química, Rio de Janeiro-RJ, Brasil

^eUFF, Departamento de Engenharia Química e de Petróleo, Niterói-RJ, Brasil

*leomario.contato@gmail.com

RESUMO

Este trabalho avalia a aplicação da recompressão de vapor (SC-RV) como estratégia de intensificação em uma coluna de destilação extrativa convencional (SC) para separação do sistema tolueno–metanol. A análise foi conduzida no Aspen Plus® V14, considerando indicadores de custo anual total (TAC) e emissões de CO₂ (CDE). Os resultados mostram que a SC-RV elimina o consumo de vapor e reduz significativamente a demanda de água de resfriamento, promovendo uma diminuição de 44,3% no custo operacional, embora implique aumento de 285% no investimento inicial devido ao compressor. Em horizontes de longo prazo, a configuração apresenta viabilidade econômica, com redução de 17,5% no TAC e retorno de capital em 5,71 anos. Ambientalmente, observa-se redução de 57,6% nas emissões de CO₂, associada à substituição de fontes fósseis por eletricidade. A estratégia contribui para processos mais sustentáveis, alinhando-se aos ODS 12 e 13 da Agenda 2030.

Palavras-chave: Tolueno-metanol, Destilação extrativa, Eletrificação, Aspen Plus, Avaliação técnico-econômica.

1. Introdução

O tolueno e o metanol são compostos de grande relevância na indústria química, amplamente utilizados como solventes e matérias-primas em processos petroquímicos (Shan et al., 2024). A obtenção dessas substâncias em alta pureza é essencial, porém a separação do sistema tolueno–metanol é desafiadora devido à formação de um azeótropo, no qual as fases líquida e vapor apresentam composições idênticas, inviabilizando a destilação convencional (Wang et al., 2020). Assim, estratégias alternativas como destilação por variação de pressão e a destilação extrativa têm sido amplamente investigadas para contornar essa limitação (Li & Xu, 2017; Liu et al., 2024; Luyben, 2015; Wang et al., 2022).

A destilação extrativa destaca-se por empregar um solvente que modifica o equilíbrio líquido-vapor, aumentando a volatilidade relativa e viabilizando a separação (Modla et al., 2013). Entretanto, trata-se de uma operação energeticamente intensiva, responsável por até 60% do consumo energético industrial (Luyben, 2015) e das emissões de CO₂ (Coelho et al., 2026). Assim, em consonância com os ODS 12 e 13, torna-se fundamental desenvolver alternativas mais eficientes e sustentáveis ao longo de toda a vida útil do processo. Nesse sentido, a integração entre desempenho econômico e ambiental configura-se como um critério central na avaliação de novas configurações de separação.

A recompressão de vapor (RV) surge como estratégia promissora de eletrificação, baseada na elevação da pressão de topo e consequentemente da temperatura, para aquecer a corrente de fundo da coluna, reduzindo ou até eliminando a necessidade de vapor gerado a partir de combustíveis fósseis (Coelho et al., 2026; Ribeiro et al., 2026). Estudos reportam reduções expressivas no consumo energético, custos operacionais e emissões de CO₂, podendo atingir até 82% em energia (Junqueira et al., 2020), 94% em custos (Feng et al., 2020) e 67% em emissões (Zhang et al., 2022). Além disso, a RV pode ser integrada com outras tecnologias, potencializando ainda mais seus benefícios (Coelho et al., 2026).

Apesar desses avanços, ainda há lacunas quanto à avaliação integrada técnico-econômica e ambiental da RV aplicada à destilação extrativa do sistema tolueno–metanol, especialmente em configurações de coluna única com retirada lateral. Dessa forma, este trabalho visa propor uma configuração plenamente eletrificada via RV e realizar uma análise comparativa com o caso base apresentado por Wang et al. (2020), considerando

simultaneamente o custo anual total e as emissões de CO₂. Adicionalmente, busca-se contribuir para o avanço da eletrificação de processos na indústria química, fornecendo subsídios para decisões de *retrofit* mais sustentáveis.

2. Metodologia

Este estudo tem como objetivo avaliar o caso base reportado por Wang et al. (2020), referente a uma coluna única de destilação extrativa para separação do sistema tolueno–metanol, bem como propor e analisar sua versão eletrificada via recompressão de vapor (RV). As simulações são realizadas no Aspen Plus® V14 em regime estacionário, ferramenta amplamente consolidada para modelagem rigorosa de processos. O modelo termodinâmico NRTL é adotado devido ao comportamento fortemente não ideal do sistema, permitindo a adequada descrição do equilíbrio líquido–vapor (Ma et al., 2015). A metodologia adotada compreende as seguintes etapas: (I) reprodução e validação do caso base (SC), garantindo desvios inferiores a 1% em relação à literatura; (II) simulação da configuração eletrificada (SC-RV); (III) análise econômica baseada no custo total anual (TAC), considerando períodos de *payback* de 3, 5 e 10 anos, juntamente à avaliação das emissões de CO₂; (IV) comparação entre as configurações; e (V) discussão dos resultados e conclusões.

3. Métricas de avaliação

Os indicadores de desempenho são essenciais para a tomada de decisão, desde a substituição de equipamentos até o desenvolvimento de novos *layouts* de processo, ambos ligados aos custos operacionais e aos impactos ambientais (Gao et al., 2022). As estimativas de CAPEX seguem o trabalho de Wang et al. (2020), garantindo consistência entre os cenários, com exceção do compressor, cujo custo foi calculado pela equação de Douglas (1988). Os parâmetros para CAPEX e OPEX são apresentados nas Tabelas 1 e 2, respectivamente.

Tabela 1. Equações e parâmetros utilizados na estimativa dos custos de capital (CAPEX) e cálculo do custo total anual (TAC).

Equipamento	Parâmetro	Expressão / Valor	Unidade
Condensador	UC	0,852	kW/(K·m ²)
	AC	$AC = QC / (UC \cdot \Delta T)$	m ²
	Custo	$C = (M\&S/280) \cdot 1609,13 \cdot AC^{0,65}$	\$
Refrervedor	UR	0,568	kW/(K·m ²)
	AR	$AR = QR / (UR \cdot \Delta T)$	m ²
	Custo	$C = (M\&S/280) \cdot 1775,26 \cdot AR^{0,65}$	\$
Coluna	Hcol	$Hcol = 1,2 \cdot 0,6096 \cdot (NT-2)$	m
	Hpratos	$Hpratos = 0,6096 \cdot (NT-2)$	m
	TC (pratos)	$TC = (M\&S/280) \cdot 97,243 \cdot Di^{1,55} \cdot Hpratos$	\$
	CSC (casco)	$CSC = (M\&S/280) \cdot 3919,32 \cdot Di^{1,066} \cdot Hcol^{0,802}$	\$
	Custo total	$C = TC + CSC$	\$
Compressor	Custo	$C = (M\&S/280) \cdot 658,27 \cdot Q_{comp}^{0,82} \cdot (2,11 + Fc)$	\$
	Qcomp	Potência do compressor	kW
	Fc	1 (compressor centrífugo)	–
Índices	M&S	1582,3	–
	Payback	3, 5 e 10	anos
t (operação)	-	8760h	
	TAC	$TAC = CAPEX/Payback + OPEX$	\$/ano

Tabela 2. Custos das utilidades utilizados na estimativa do custo operacional (OPEX)

Utilidade	Custo	Referência
LPS (433 K, 6 atm)	7,78 USD/GJ	(Turton et al., 2018)
Água de resfriamento	0,354 USD/GJ	(Turton et al., 2018)
Eletricidade	16,67 USD/GJ	(Seider et al., 2016)

Importante destacar que Wang et al. (2020) realizaram apenas a avaliação econômica, desconsiderando os custos associados a água de resfriamento e eletricidade. Neste trabalho, tais contribuições são incorporadas à análise, permitindo uma melhor estimativa do custo operacional e dos impactos ambientais. Adicionalmente, as Equações (1) e (2) apresentam a formulação de Gadalla et al. (2005) adotada para o cálculo das emissões de CO₂ (CDE):

$$CDE = (Q_{\text{fuel}}/\text{NHV}) \cdot (C\%/100) \cdot \alpha \cdot 3600 + Q_{\text{comp}} \cdot \beta \quad (1)$$

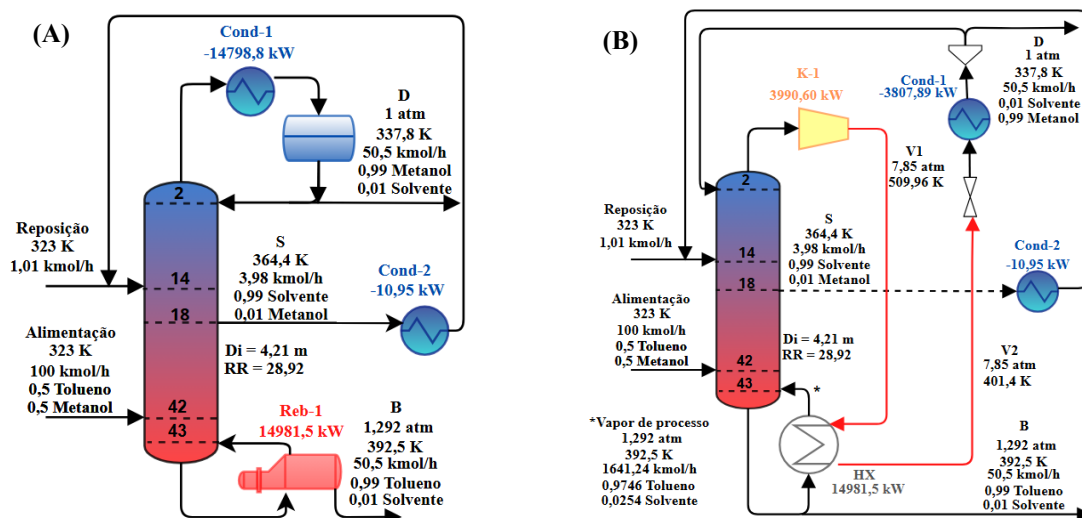
$$Q_{\text{fuel}} = (Q_{\text{proc}}/\lambda_{\text{proc}}) \cdot (h_{\text{proc}} - h_{\text{bfw}}) \cdot [(T_{\text{FTB}} - T_0)/(T_{\text{FTB}} - T_{\text{stack}})] \quad (2)$$

O termo Q_{fuel} (kW) representa a energia térmica gerada pela queima de combustível, sendo calculado com base na demanda térmica do processo. O combustível considerado é o gás natural, com conteúdo energético (*Net Heating Value* - NHV) de 51.600 kJ/kg, C% o teor de carbono de 75,4% e fator estequiométrico α igual a 3,67, conforme Junqueira et al. (2020), Gadalla et al. (2005) e You et al. (2016). O consumo elétrico do processo é representado por Q_{comp} (kW), associado ao compressor, sendo as emissões indiretas calculadas por meio do fator de emissão da rede elétrica β , adotado como 0,3734 kgCO₂/kWh para localização da planta nos Estados Unidos (Ribeiro et al., 2026). A demanda térmica do processo é representada por Q_{proc} (kW), correspondente à carga térmica do refeedor, enquanto h_{proc} (2757,27 kJ/kg) e λ_{proc} (2082,34 kJ/kg) referem-se, respectivamente, à entalpia e ao calor latente do vapor utilizado para 6 atm e 433 K, com base em Luyben (2013) e dados de tabelas de vapor da TLV Engenharia. A entalpia da água de alimentação da caldeira h_{bfw} é considerada como 419 kJ/kg, assumindo entrada a 373 K (You et al., 2016; Gadalla et al., 2005). As condições térmicas da combustão incluem a temperatura de chama T_{FTB} de 2073 K, temperatura dos gases de exaustão T_{stack} de 433 K e temperatura ambiente de referência T_0 de 298 K, conforme reportado por You et al. (2016) e Gadalla et al. (2005). Dessa forma, CDE é calculado a partir da associação da eletricidade e da queima de combustível de forma conjunta.

4. Descrição do Processo

O processo de destilação foi analisado a partir de uma coluna única de destilação extrativa com retirada lateral, adotada em ambos os casos. A coluna apresenta diâmetro interno (D_i) de 4,21 m e 44 estágios totais, sendo aplicada à separação do sistema tolueno–metanol com adição do solvente trietilamina. A operação ocorre sob pressão atmosférica, com perda de carga de 0,0068 atm por estágio. A Figura 1 ilustra os fluxogramas correspondentes às configurações avaliadas neste estudo: SC, que representa a configuração convencional de destilação extrativa em coluna única, e SC-RV, que corresponde à configuração intensificada por meio da integração da estratégia de recompressão de vapor.

Figura 1 – Representações dos casos de destilação extrativa SC (A) e SC-RV (B).



Na configuração SC, a alimentação (100 kmol/h, frações equimolares de tolueno e metanol) entra a 323 K no estágio 42, enquanto o solvente (recuperado + reposição) é alimentado no estágio 14, promovendo a modificação do equilíbrio líquido-vapor. O condensador principal (Cond-1) opera com carga térmica de -14798,9 kW, gerando destilado de 50,5 kmol/h (99 mol% metanol e 1 mol% solvente), parcialmente reciclado com razão de refluxo de 28,92. Uma corrente lateral é retirada no estágio 18 (3,98 kmol/h, 99 mol% solvente), resfriada a 323 K no Cond-2 (10,95 kW) e reutilizada após mistura com a corrente de reposição (1,01 kmol/h). No fundo, o refeedor (Reb-1) fornece 14981,5 kW utilizando vapor de baixa pressão (433 K e 6 atm), produzindo 50,5 kmol/h com 99 mol% tolueno. O processo integra destilação extrativa com recuperação lateral de solvente, apresentando elevada dependência energética, com impacto direto no TAC e nas emissões de CO₂.

Para reduzir essa demanda, propõe-se a configuração SC-RV, na qual o vapor de topo é comprimido no compressor K-1 de dois estágios (razão < 4) (Couper et al., 2012), elevando sua pressão e temperatura, respeitando o limite de 522 K (Jensen et al., 2015). Com eficiência de 72% (Shen et al., 2022), o compressor consome 3990,60 kW, aumentando a entalpia da corrente V1 para reutilização térmica. O refeedor é substituído por um trocador de calor (HX), onde o vapor comprimido fornece integralmente a carga de 14981,5 kW, promovendo a vaporização parcial do fundo. A fase vapor retorna à coluna, enquanto o líquido remanescente é retirado como produto (50,5 kmol/h, 99 mol% tolueno). Após a troca térmica, a corrente V2 é despressurizada e enviada ao Cond-1, que passa a operar com menor carga (-3807,89 kW), gerando destilado de 50,5 kmol/h (99 mol% metanol), mantendo a razão de refluxo de 28,92. Ressalta-se que todas as variáveis operacionais e de projeto da coluna são mantidas inalteradas em relação ao caso base (SC), o que possibilita a rápida implementação em colunas já em operação.

5. Resultados

Nesta seção, serão reportados os resultados para análise econômica e de emissões de CO₂. A Tabela 3 apresenta os resultados obtidos para as configurações SC e SC-RV.

Tabela 3. Aspectos econômicos e de emissão de CO₂.

	Parâmetro	SC	SC-RV
Custo de Instalação (10⁶ USD/ano)	Coluna	1,729	1,729
	Refeedor	0,677	0,000
	Condensador	1,004	0,368
	Trocador de calor	0,000	0,645
	Compressor	0,000	10,377
	CAPEX total (10⁶USD)	3,410	13,119
Custo de Utilidades (10⁶ USD/ano)	Vapor (LPS)	3,676	0,000
	Água de resfriamento	0,165	0,043
	Eleticidade	0,000	2,097
	OPEX total (10⁶ USD/ano)	3,841	2,140
Custo Anual Total	TAC (10⁶ USD/ano) – 3 anos	4,977	6,513
	Economia (%)	–	-30,9
	TAC (10⁶ USD/ano) – 5 anos	4,5	4,8
	Economia (%)	–	-5,3
	TAC (10⁶ USD/ano) – 10 anos	4,2	3,5
Emissão CO₂	Economia (%)	–	17,5
	CDE t(CO₂/h)	3,515	1,490
	Redução (%)	-	57,6

A análise comparativa entre SC e SC-RV evidencia diferenças relevantes sob os pontos de vista de investimento e operação. A implementação da estratégia RV resulta em um aumento expressivo do CAPEX (285%), principalmente devido à incorporação do compressor, que representa a maior parcela do custo adicional

(79,1%), além da inclusão de um trocador de calor HX. Em contrapartida, observa-se a eliminação do refeedor e a redução no custo do condensador. Do ponto de vista operacional, a configuração SC-RV apresenta reduções expressivas em diferentes parcelas do custo. Há eliminação total do consumo de vapor de baixa pressão, além de uma diminuição de aproximadamente 74,2% no custo associado à água de resfriamento. Em termos globais, o custo OPEX é reduzido em cerca de 44,3%. Por outro lado, ocorre a introdução do consumo de eletricidade, inexistente na SC, devido à operação do compressor. A avaliação do TAC indica que, em horizontes de curto prazo, a SC ainda é mais atrativa, com a alternativa SC-RV apresentando penalizações de 30,9% e 5,3% para períodos de 3 e 5 anos, respectivamente. No entanto, em um horizonte de longo prazo (10 anos), SC-RV passa a ser economicamente vantajosa, apresentando uma redução de 17,5% no TAC. Com base nesses resultados, determina-se que o tempo de equilíbrio econômico entre as duas configurações é de aproximadamente 5,71 anos. A partir desse ponto, os ganhos operacionais decorrentes da redução do consumo energético superam o maior investimento inicial.

Em relação ao perfil de emissão de CO₂, a SC apresenta emissões de 3,515 tCO₂/h, enquanto SC-RV reduz esse valor para 1,490 tCO₂/h, o que corresponde a uma diminuição expressiva de aproximadamente 57,6%. Essa redução é principalmente causada pela eliminação do consumo de vapor gerado a partir da queima de combustíveis fósseis no refeedor.

6. Conclusão

Este trabalho avalia a configuração intensificada com recompressão de vapor (SC-RV) como alternativa de *retrofit* a um sistema convencional de coluna única de destilação com saída lateral (SC) na separação tolueno–metanol, por meio de uma análise integrada dos aspectos econômicos e ambientais, considerando o TAC e as emissões de CO₂. A adoção da SC-RV elimina o uso de vapor e reduz significativamente a demanda de água de resfriamento, resultando em uma diminuição de 44,3% no OPEX, embora implique um aumento de 285% no CAPEX devido à incorporação do compressor. Em horizontes de curto prazo, a alternativa mostra-se menos atrativa; entretanto, em 10 anos, apresenta uma redução de 17,5% no TAC, com tempo de retorno estimado em 5,71 anos.

Sua viabilidade é ampliada em cenários nos quais o vapor possui alto custo e a eletricidade é mais acessível. Do ponto de vista ambiental, a configuração reduz as emissões de CO₂ em 57,6%, em função da substituição do vapor por eletricidade, sendo esse benefício potencialmente ampliado com o uso de fontes renováveis. Dessa forma, os resultados evidenciam o potencial da recompressão de vapor como estratégia de intensificação de processos, contribuindo diretamente para os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) 12 e 13, ao promover maior eficiência produtiva e mitigação das mudanças climáticas.

Agradecimentos: Os autores agradecem à Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado da Paraíba (FAPESQ-PB) pelo suporte financeiro e à Universidade Federal de Campina Grande pelo apoio técnico.

Referências

- B. Shan, S. Wang, X. Chen, P. Cui, Q. Xu e F. Zhang: Design of robust control system for the separation of toluene/methanol/water mixture by extractive distillation, *Process Safety and Environmental Protection* (201), 107447, 2025.
- C. Wang, Y. Zhuang, L. Linlin, L. Zhang, J. Du, Z. Zhang: Design and control of a novel side-stream extractive distillation column for separating methanol-toluene binary azeotrope with intermediate boiling entrainer, *Separation and Purification Technology* (239), 116581, 2020.
- C. Wang, Y. Zhuang, Y. Dong, L. Zhang, L. Liu e J. Du: Design and control analysis of the side-stream extractive distillation column with low concentration intermediate-boiling entrainer, *Chemical Engineering Science* (247), 116915, 2022.
- G. Modla: Energy saving methods for the separation of a minimum boiling point azeotrope using an intermediate entrainer, *Energy* (50), 103-109, 2013.
- I. N. Caxiano, P. G. Junqueira, P. V. Mangili e D. M. Prata: Eco-efficiency analysis and intensification of the acetic acid purification process, *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification* (147), 107784, 2020.
- J. K. Jensen, W. B. Markussen, L. Reinholdt e B. Elmegaard: On the Development of High Temperature Ammonia–Water Hybrid Absorption–Compression Heat Pumps, *International Journal of Refrigeration* (58), 79–89, 2015.
- J. M. Douglas: *Conceptual Design of Chemical Processes*, McGraw-Hill: 1988.

- J. Ma, W. Li, C. Ni, Y. Li, S. Huang, C. Shen e C. Xu: Investigation of distillation systems using heavy or intermediate entrainers for separating toluene–methanol: process economics and control, *Journal of Chemical Technology & Biotechnology* (91), 1957–1971, 2015.
- J. R. Couper, W. R. Penney, J. R. Fair e S. M. Walas: *Chemical Process Equipment: Selection and Design*, Butterworth-Heinemann (3ª ed.), 1–864, 2012.
- J. Shen, Z. Li, N. Tan e Y. Xiao: Design and analysis of a suction pretreatment system for the air compressor, *Energy Conversion and Management* (263), 115675, 2022.
- Junqueira, P.G.; Caxiano, I.N.; Mangili, P.V. e Prata, D.M.: Environ-Economic Analysis of Conceptual Intensification Alternatives Applied to the Ethylbenzene Production, *Computers & Chemical Engineering* (136), 106783, 2020.
- M. A. Gadalla, Z. Olujic, P. J. Jansens, M. Jobson e R. Smith: Reducing CO₂ Emissions and Energy Consumption of Heat-Integrated Distillation Systems, *Environmental Science & Technology* (39), 6860–6870, 2005.
- M. S. Coelho, S. S. de Oliveira, R. M. de A. C. Ribeiro, F. R. Figueiredo e D. M. Prata: Retrofit Design of a De-Isobutanizer Column via Vapor Recompression: Techno-Economic and CO₂ Emission Analysis, *Processes* (14), 867, 2026.
- Organização das Nações Unidas (ONU): *Transforming our world: the 2030 Agenda for Sustainable Development*, United Nations, 2015.
- R. M. de A. C. Ribeiro, F. R. Figueiredo e D. M. Prata: Single-Column Partial Vapor Recompression Retrofit Design for Separation of 1,2-Propanediol and Ethylene Glycol Mixture, *Processes* (14), 421, 2026.
- R. Turton, R. C. Bailie, W. B. Whiting e J. A. Shaeiwitz: *Analysis Synthesis and Design of Chemical Processes* (5a. Ed.), Prentice Hall: 2018.
- TLV Engenharia. Calculadora: Tabela de vapor saturado por pressão
- W. D. Seider, D. R. Lewin, J. D. Seader, S. Widagdo, R. Gani e K. M. Ng: *Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Evaluation* (4a. Ed.), John Wiley & Sons: 2016.
- W. L. Luyben: Design and control of dual condensers in distillation columns, *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification* (74), 106–114, 2013.
- W. L. Luyben: Improved design of an extractive distillation system with an intermediate-boiling solvent, *Separation and Purification Technology* (156), 336–347, 2015.
- X. Liu, N. J. Maurice, M. J. Claire, B. Gentil, J. Li, Z. Jiao e A. S. Giwa: A simulation study on the process design and optimization pressure swing separation of azeotropic mixture methanol and toluene, *plos one* (12), e0310541, 2024.
- X. X. Gao, Q. R. Cheng, Y. Yang, K. Lu e M. Y. Chen: Novel heat pump and heat integration assisted pressure swing distillation for separating methyl cyclohexane and n-butyl alcohol to save energy and reduce CO₂ emissions, *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects* (44), 9633–9648, 2022.
- X. You, I. Rodriguez-Donis e V. Gerbaud: Reducing process cost and CO₂ emissions for extractive distillation by double-effect heat integration and mechanical heat pump, *Applied Energy* (166), 128–140, 2016.
- Y. Li e C. Xu: Pressure-Swing Distillation for Separating Pressure-Insensitive Minimum Boiling Azeotrope Methanol/Toluene via Introducing a Light Entrainer: Design and Control, *Industrial & Engineering Chemistry Research* (56), 4017–4037, 2017.
- Z. Feng, W. She, G. P. Rangaiah e L. Dong: Design and control of vapor recompression assisted extractive distillation for separating n-hexane and ethyl acetate, *Separation and Purification Technology* (240), 116655, 2020.
- Z. Zhang, Y. Wang, M. Zhang, C. Guang, L. M. Li e J. Gao: Energy-saving investigation of pressure-swing distillation strengthening configurations for benzene/isobutanol binary azeotrope, *Separation and Purification Technology* (286), 121381, 2022.