



Simulação da extração de óleo vegetal: Comparação entre Hexano e Etanol no COCO

Simulation of vegetable oil extraction: Comparison between Hexane and Ethanol in COCO

 Rafael Santos Silva¹,  Anthonnyele Lígia Santos da Silva¹,  Isak Macena Silva¹,  José André da Silva Costa¹,  Maria Eloyza Lima Santos¹,  Thaís Jeruzza Maciel Póvoas Souto¹

RESUMO

Este estudo avaliou o desempenho técnico e ambiental dos solventes hexano e etanol no processo de extração de óleo de soja, utilizando modelagem e simulação no COCO Simulator. As simulações reproduziram um sistema de extração contracorrente em sete estágios, permitindo determinar rendimento de extração, pureza da fase oleosa, eficiência do solvente e teor residual de óleo no farelo. O hexano apresentou maior eficiência técnica, com rendimento de 99,5 % e menor teor residual de óleo, enquanto o etanol alcançou 99 % de rendimento, porém com maior retenção no farelo. Apesar da superioridade técnica do hexano, o etanol demonstrou melhor desempenho ambiental, menor toxicidade, renovabilidade e maior segurança operacional. A análise integrada indicou que o solvente renovável se alinha às demandas contemporâneas por sustentabilidade, redução de emissões e conformidade com políticas ambientais. Os resultados confirmam a viabilidade técnica do etanol como alternativa verde ao hexano e reforçam o papel de simulações computacionais como ferramentas estratégicas no desenvolvimento de processos mais eficientes e sustentáveis na indústria oleaginosa.

Palavras-chave: Extração de óleos; Processos sustentáveis; Solventes verdes; Simulação de processos.

ABSTRACT

This study evaluated the technical and environmental performance of hexane and ethanol as solvents in soybean oil extraction using modeling and simulation in the COCO Simulator. The simulations reproduced a seven-stage countercurrent extraction system, enabling the determination of extraction yield, oil-phase purity, solvent efficiency, and residual oil content in the meal. Hexane showed higher technical performance, with a 99.5 % extraction yield and lower residual oil content, while ethanol reached a 99 % yield but with greater retention in the solid matrix. Despite the technical advantages of hexane, ethanol demonstrated superior environmental performance, lower toxicity, renewability, and greater operational safety. The integrated analysis indicated that the renewable solvent aligns with contemporary demands for sustainability, emission reduction, and compliance with environmental policies. The results confirm the technical feasibility of ethanol as a green alternative to hexane and reinforce the role of process simulation as a strategic tool for the development of more efficient and sustainable technologies in the vegetable oil industry.

Keywords: Oil extraction; Sustainable processes; Green solvents; Process simulation.

¹ Universidade Federal Rural de Pernambuco;

Autor correspondente Thaís Jeruzza Maciel Póvoas Souto: thais.povoas@ufrpe.br

Recebido em: 04/12/2025. Aceito em: 26/05/2026.

Este é um artigo publicado em acesso aberto (Open Access) sob a licença Creative Commons Attribution (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), que permite uso, distribuição e reprodução em qualquer meio, sem restrições desde que o trabalho original seja corretamente citado. 

1 INTRODUÇÃO

A produção de óleos vegetais desempenha papel essencial na economia global, sendo amplamente utilizada nas indústrias alimentícia, farmacêutica, cosmética e energética. O Brasil destaca-se como um dos principais produtores mundiais de oleaginosas, principalmente soja, palma e algodão, contribuindo de forma significativa para o mercado internacional de óleos e gorduras (De Jesus; Maciel Filho, 2023; Carré *et al.*, 2024). Estima-se que mais de 80 % do óleo vegetal produzido mundialmente seja obtido por extração com solvente, processo amplamente consolidado por sua alta eficiência na remoção do óleo contido na matriz sólida (Kong *et al.*, 2018; Carré *et al.*, 2024).

Entre as diversas matérias-primas disponíveis, a soja foi escolhida neste estudo por ser a oleaginosa mais processada no Brasil e no mundo, representando cerca de 60 % da produção global de óleos vegetais (De Jesus; Maciel Filho, 2023; Ramos *et al.*, 2024). Além de sua elevada disponibilidade e baixo custo, o óleo de soja apresenta composição lipídica bem caracterizada, o que favorece a modelagem termodinâmica e a validação de simulações de extração. Outro fator relevante é a ampla documentação científica e industrial sobre o desempenho da extração de óleo de soja com diferentes solventes, o que permite comparar diretamente os resultados simulados com dados experimentais confiáveis. Dessa forma, a soja constitui uma matriz de referência ideal para estudos comparativos de extração com solventes convencionais e alternativos (Maciel Filho, 2023; Ramos *et al.*, 2024).

A extração por solvente é uma das etapas mais importantes na produção de óleos vegetais em larga escala, pois maximiza o rendimento e a eficiência do processo, especialmente para sementes com baixo teor de óleo, como a soja. Esse método substituiu, em grande parte, a prensagem mecânica, por apresentar maior capacidade de extração e eficiência econômica. Tipicamente, utiliza-se o n-hexano como solvente, devido à sua excelente capacidade de solubilização lipídica e facilidade de recuperação por destilação (Cravotto *et al.*, 2022). O processo é ideal para a produção em grandes volumes e frequentemente combina a prensagem inicial com a subsequente extração por solvente, responsável por remover o óleo residual. Essa combinação melhora o aproveitamento do óleo e valoriza o subproduto (farelo), amplamente utilizado na nutrição animal (Feedipedia, 2024).

Apesar da eficiência, o uso do n-hexano apresenta desvantagens ambientais e de segurança, uma vez que se trata de um hidrocarboneto não renovável, inflamável e neurotóxico (Hamilton, 2024). Por ser um composto volátil, parte do solvente é liberada durante o processo, podendo causar poluição atmosférica e riscos à saúde ocupacional. Além disso, o processo requer elevado consumo de energia térmica e água, utilizados na dessolventização, destilação e recuperação do solvente (Kong *et al.*, 2018; Janicka *et al.*, 2022). O descarte de efluentes líquidos contendo matéria orgânica e óleos exige tratamento adequado para minimizar impactos ambientais (Cravotto *et al.*, 2022).

Diante dessas limitações, cresce o interesse por solventes alternativos e renováveis, como o etanol, que apresenta menor toxicidade, alta disponibilidade e origem renovável, além de possibilitar a extração de compostos polares (como gomas e fosfolipídios), simplificando o refino do óleo (Bartier *et al.*, 2024; Bessa *et al.*, 2023; Potrich *et al.*, 2022). Uma alternativa tecnológica é o uso de fluidos supercríticos, como o dióxido de carbono (CO₂), capazes de produzir óleos de altíssima pureza, embora com custos de implantação e operação mais elevados (Kong *et al.*, 2018). Tais abordagens estão alinhadas aos princípios da química verde, que visam reduzir o impacto ambiental e aumentar a sustentabilidade dos processos industriais (Janicka *et al.*, 2022; Cravotto *et al.*, 2022).

A simulação computacional de processos surge como ferramenta essencial para compreender sistemas complexos, reduzir custos experimentais e otimizar condições operacionais, fundamentando-se em avaliações termodinâmicas e cinéticas precisas (Osei-Owusu *et al.*, 2024). Embora softwares comerciais, como Aspen Plus e HYSYS, sejam amplamente utilizados na indústria, seu custo e complexidade limitam o uso em aplicações acadêmicas. Nesse contexto, o COCO Simulator (CAPE-OPEN to CAPE-OPEN) apresenta-se como alternativa gratuita e de código aberto, compatível com o padrão CAPE-OPEN, permitindo a modelagem termodinâmica, balanço de massa e energia e simulação de operações unitárias com alta confiabilidade (Van Baten; Szczepanski, 2011; Csendes *et al.*, 2023). Sua utilização tem se mostrado eficiente em estudos de Pesquisa e Desenvolvimento, oferecendo resultados consistentes e boa correlação com dados experimentais.

Assim, este trabalho tem como objetivo modelar e simular o processo de extração de óleo de soja por solvente utilizando o COCO Simulator, comparando o desempenho dos solventes hexano e etanol em termos de rendimento de extração, pureza do óleo e comportamento termodinâmico, buscando demonstrar a viabilidade técnica de rotas mais sustentáveis e a aplicabilidade do simulador em estudos de engenharia de processos.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

2.1 DESCRIÇÃO GERAL DO ESTUDO

O presente estudo foi desenvolvido com o objetivo de modelar e simular o processo de extração de óleo vegetal por solvente, avaliando o desempenho técnico de dois cenários distintos: (i) extração convencional com hexano e (ii) extração alternativa com etanol, considerado solvente verde. A simulação do processo foi realizada utilizando o software COCO Simulator (CAPE-OPEN to CAPE-OPEN), versão 3.7.0, desenvolvido pela AmsterCHEM (Amsterdã, Países Baixos). O programa é um simulador de processos químicos de estado estacionário, gratuito e de código aberto, compatível com o padrão CAPE-OPEN, permitindo a integração de pacotes termodinâmicos e operações unitárias de diferentes desenvolvedores.

A escolha dos parâmetros operacionais e termodinâmicos foi fundamentada em dados de literatura científica recente (Alobaid *et al.*, 2024; Cravotto *et al.*, 2022; Kong *et al.*, 2018; Ramos *et al.*, 2024; Dagostin *et al.*, 2015; Comerlatto *et al.*, 2021; Rodrigues *et al.*, 2007; Silva *et al.*, 2025; Silva *et al.*, 2025), buscando representar condições industriais típicas e propor alternativas ambientalmente sustentáveis.

2.2 DEFINIÇÃO DO PROCESSO SIMULADO

A matéria-prima considerada foi soja em flocos despeliculados, amplamente empregada na indústria oleaginosa brasileira. A corrente de alimentação foi definida com vazão de $1000 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$, composta por 18 % *m/m* de óleo, 11 % *m/m* de umidade e 71 % *m/m* de material inerte (Ramos *et al.*, 2024). O teor de óleo residual no farelo após a extração foi limitado a 0,5 % *m/m*, valor compatível com o padrão indústria.

Foram simulados dois cenários principais:

- Cenário 1 (Convencional): Extração utilizando hexano como solvente, com temperatura de 55 °C, pressão atmosférica (1 bar) e razão sólido/solvente de 1:(2,5–3,0) *m/m*, visando obter miscela final com 28 % *m/m* de óleo (Kong *et al.*, 2018).
- Cenário 2 (Alternativo): Extração com etanol 95 % *v/v*, temperatura de 70 °C, pressão de 1 bar e proporção 1:(6–7) *m/m*, resultando em miscela alcoólica contendo 10–15 % *m/m* de óleo antes do resfriamento. Após a extração, a miscela foi submetida a resfriamento a 25 °C, promovendo separação em duas fases (rica em óleo e rica em etanol), conforme descrito para sistemas de equilíbrio de líquido-líquido e etanol-óleo-água (Rodrigues *et al.*, 2007; Da Silva *et al.*, 2010).

No cenário 1, a planta que utiliza hexano como solvente, apresentada na Figura 1, foi configurada para representar uma extração contracorrente por meio de uma sequência de *mixers* e *splitters*, reproduzindo o contato sucessivo entre o sólido (bagaço) e o solvente.

O processo inicia-se com a alimentação do bagaço contendo óleo e a corrente de hexano puro. Em cada estágio, o solvente fresco ou parcialmente carregado entra em contato com o bagaço no *mixer*, favorecendo a transferência de massa do óleo para a fase líquida. Em seguida, a mistura óleo-hexano-sólido é direcionada a um *splitter*, que representa a separação sólido-líquido.

O arranjo sequencial de *mixers* e *splitters* permite que o solvente encontre sólidos com diferentes teores de óleo em cada etapa, simulando o comportamento de uma coluna de extração de múltiplos estágios. Ao final do processo, o bagaço com baixo teor residual de óleo é direcionado ao separador final de sólidos, enquanto a miscela rica em óleo segue para o evaporador/flash, onde o hexano é recuperado e reciclado, e o óleo extraído é obtido como produto.

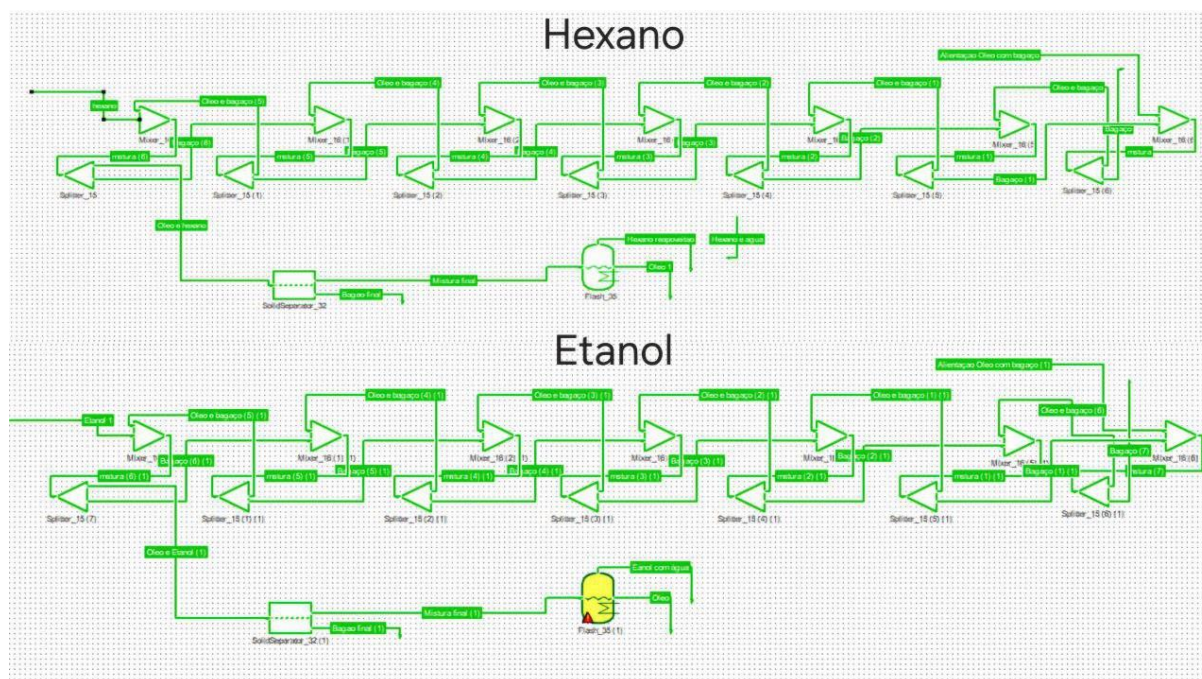


Figura 1. Fluxograma do processo de extração do óleo utilizando hexano e etanol pelo simulador de processos COCO.

Fonte: Os autores (2025).

Esse arranjo modular permite representar matematicamente a extração contracorrente sem a necessidade de uma única coluna, possibilitando simulações detalhadas de cada etapa.

A segunda planta, referente ao etanol, foi configurada com o mesmo princípio de extração contracorrente, incorporando, entretanto, particularidades associadas às propriedades físico-químicas desse solvente.

Nesse cenário, o processo inicia-se com a alimentação do bagaço contendo óleo e da corrente de etanol. O sistema também é composto por *mixers* conectados a *splitters*, formando estágios sucessivos de contato sólido-líquido. Ao final da cadeia, o bagaço desengordurado é separado, e a corrente líquida rica em óleo e etanol é direcionada ao flash, no qual o etanol é recuperado e reciclado, enquanto o óleo permanece como produto.

Diferentemente do hexano, o etanol apresenta miscibilidade parcial com água. Por isso, o fluxograma inclui uma corrente hidroalcoólica, representando a umidade absorvida do bagaço, aspecto relevante em processos industriais com solventes polares.

2.3 CONFIGURAÇÃO DA SIMULAÇÃO NO COCO *SIMULATOR*

O modelo foi implementado no ambiente COFE (CAPE-OPEN *Flowsheet Environment*), utilizando o pacote termodinâmico UNIFAC para ambos os solventes, e o NRTL como modelo alternativo para testes de sensibilidade no sistema etanol/óleo/água conforme os dados experimentais e de modelagem apresentados por

Osei-Owusu *et al.* (2024), Alobaid *et al.* (2024), Rodrigues *et al.* (2007) e Da Silva *et al.* (2010).

Os principais blocos utilizados na simulação estão na Tabela 1.

Tabela 1. Etapas do processo e respectivos blocos no COCO

Etapa	Bloco no COCO	Função
Extração	<i>Mixer-settler</i> (7 estágios)	Simulação contracorrente entre sólido e solvente
Recuperação de solvente (hexano)	<i>Flash + Stripper</i>	Remoção de 70-80 % <i>m/m</i> de solvente por evaporação e vapor d'água
Recuperação de solvente (etanol)	<i>Distillation column</i>	Reciclagem de etanol para o extrator
Resfriamento (etanol)	<i>Cooler</i> (25 °C)	Induz a separação de fases
Separação de fases	<i>Decanter</i>	Obtenção das fases rica em óleo e rica em etanol

Fonte: RODRIGUES (2007).

As correntes de alimentação foram definidas conforme a Tabela 2.

Tabela 2. Parâmetros das correntes de alimentação *software* COCO Simulator

Corrente	Composição (% <i>m/m</i> ou % <i>v/v</i>)	Vazão (<i>kg · h⁻¹</i>)	Temperatura (°C)	Pressão (bar)
SOY_FLAKES	18 % <i>m/m</i> óleo, 11(% <i>m/m</i> água, 71(% <i>m/m</i> inertes	1000	25	1
HEXANE_RECYCLE	100 % <i>v/v</i> hexano	460	55	1
ETHANOL_RECYCLE	95 % <i>v/v</i> etanol, 5 % <i>v/v</i> água	1300	70	1

Fonte: Os autores (2025).

2.4 PARÂMETROS DE ANÁLISE

A eficiência de cada solvente (hexano e etanol) foi avaliada por meio de quatro indicadores de desempenho técnico, calculados a partir dos resultados da simulação no COCO Simulator (CAPE-OPEN to CAPE-OPEN) e de dados complementares da literatura. Esses parâmetros permitem quantificar a capacidade extrativa, a seletividade e a sustentabilidade do processo de extração de óleo de soja por solvente.

2.4.1 Rendimento de Extração E (%)

O rendimento de extração indica a fração do óleo total presente na matéria-prima que foi efetivamente transferida para a fase líquida. Esse parâmetro foi calculado conforme a equação (1).

$$E (\%) = (m_{\text{óleo,extraído}}/m_{\text{óleo,inical}}) \times 100 \quad (1)$$

Onde:

$m_{\text{óleo,extraído}}$ é a massa de óleo obtida na fase solvente (kg);

$m_{\text{óleo,inical}}$ é a massa total de óleo contido na soja antes da extração (kg).

Valores elevados de E (%) indicam maior eficiência na transferência de massa entre o sólido e o solvente.

Segundo Dagostin *et al.* (2015) e Comerlatto *et al.* (2021), rendimentos superiores a 95 % são típicos do processo de extração com n-hexano, enquanto o etanol tende a apresentar resultados ligeiramente inferiores, devido à sua maior polaridade e menor afinidade pelo óleo neutro.

2.4.2 Pureza da Fase Oleosa P (%)

A pureza da fase oleosa é um indicador da seletividade do solvente para dissolver triglicerídeos, em detrimento de compostos não lipídicos, como fosfolipídios, ceras e pigmentos. A pureza foi calculada conforme a Equação (2).

$$P (\%) = (m_{\text{triglicerídeos}}/m_{\text{fase oleosa}}) \times 100 \quad (2)$$

Onde:

$m_{\text{triglicerídeos}}$ corresponde à massa de triglicerídeos na fase rica em óleo (kg);

$m_{\text{fase oleosa}}$ é a massa total da fase rica em óleo (kg).

Purezas elevadas indicam um óleo bruto de melhor qualidade e menor demanda de refino.

Estudos experimentais de Da Silva *et al.* (2010) e Osei-Owusu *et al.* (2024) demonstram que o etanol pode coextrair compostos polares, reduzindo a pureza da fase oleosa em comparação ao n-hexano. Esses autores observaram que a miscibilidade parcial do etanol com a água e com compostos anfífilos favorece a extração de frações insaponificáveis, o que impacta na seletividade do processo.

2.4.3 Eficiência do Solvente (η_s)

A eficiência do solvente expressa a capacidade do solvente em extrair óleo em relação à sua própria massa consumida no processo. É definida pela equação (3).

$$\eta_s = (m_{\text{óleo,extraído}}/m_{\text{solvente,utilizado}}) \quad (3)$$

Onde:

$m_{\text{óleo,extraído}}$ é a massa total de óleo recuperado (kg);

$m_{\text{solvente,utilizado}}$ é a massa total de solvente alimentado ao sistema (kg).

Esse índice permite comparar a performance operacional e econômica entre diferentes solventes. Valores mais altos indicam menor consumo de solvente por unidade de óleo extraído, representando maior sustentabilidade do processo.

2.4.4 Teor de Óleo Residual no Farelo R_o (%)

O teor de óleo residual representa a fração de óleo que permanece na matriz sólida após a extração e constitui um parâmetro crítico de controle do processo. É determinado pela Equação (4).

$$R_o(\%) = (m_{\text{óleo,residual}}/m_{\text{óleo,inicial}}) \times 100 \quad (4)$$

Onde:

$m_{\text{óleo,residual}}$ é a massa de óleo não extraída presente no farelo final (kg).

Valores típicos de R_o variam de 0,5 a 2,0 % m/m para processos otimizados com hexano e podem alcançar até 4 % m/m em sistemas com solventes alternativos, como o etanol (Ramos *et al.*, 2024). Esse parâmetro foi avaliado no COCO a partir dos fluxos de saída da corrente sólida após o bloco mixer-settler, considerando a composição mássica simulada.

Adicionalmente, foi realizada análise de sensibilidade variando-se:

- Temperatura: 40–70 °C para hexano; 60–80 °C para etanol;
- Razão sólido/solvente: 1:2 a 1:6 m/m;
- Teor de água no etanol: 0 a 13 % m/m.

Os resultados de cada simulação foram confrontados com dados experimentais disponíveis na literatura para validação, conforme reportado por Dagostin *et al.* (2015), Comerlatto *et al.* (2021) e Ramos *et al.* (2024). Esses autores apresentam dados cinéticos e termodinâmicos de extração de óleo de soja utilizando etanol em diferentes temperaturas, proporções e teores de umidade, servindo como base confiável para calibração dos modelos de simulação.

2.4.5 Validação Quantitativa e tratamento estatístico

A validação do modelo foi realizada por comparação entre os resultados simulados e dados experimentais da literatura, conforme descrito por Dagostin *et al.* (2015), Comerlatto *et al.* (2021) e Ramos *et al.* (2024). Foram calculados o desvio absoluto (DA) e o erro relativo (ER), conforme as Equações (5) e (6).

$$DA = x_{\text{simulado}} - x_{\text{referência}} \quad (5)$$

$$ER(\%) = (|x_{\text{simulado}} - x_{\text{referência}}|/x_{\text{referência}}) \times 100 \quad (6)$$

Como se trata de uma simulação determinística, sem replicatas experimentais independentes, não foram aplicados testes inferenciais, como ANOVA ou teste t. O desvio-padrão foi empregado apenas como medida descritiva da dispersão dos erros relativos entre os indicadores avaliados. Assim, os valores de média e desvio-padrão

expressam a consistência global do modelo frente às referências adotadas, e não variabilidade experimental.

O modelo foi considerado satisfatório quando atendeu aos seguintes critérios de desempenho:

- Rendimento de extração: $\geq 98\%$ para hexano e $\geq 95\%$ para etanol;
- Pureza da fase oleosa: $\geq 95\%$;
- Óleo residual no farelo: $\leq 0,5\%$ *m/m*;
- Perdas de solvente: $< 2\%$ para hexano e $< 5\%$ para etanol;
- Estabilidade de fases: presença de duas fases líquidas claras a $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ no sistema etanol/óleo/água.

Esses parâmetros de referência foram definidos com base em resultados experimentais e recomendações técnicas apresentadas por Ramos *et al.* (2024) e Cravotto *et al.* (2022), que discutem o desempenho operacional, sustentabilidade e segurança no uso de solventes verdes na indústria oleaginosa. Cabe ressaltar que os resultados obtidos representam um cenário idealizado de equilíbrio de fases. O simulador COCO pressupõe uma eficiência de estágio de 100% no contato entre o sólido e o líquido nos blocos *mixer-settler*. Em condições operacionais reais, a difusão entre partículas e as resistências à transferência de massa podem reduzir a eficiência de extração, tornando os valores experimentais ligeiramente inferiores aos previstos pelo modelo termodinâmico, demandando um dimensionamento com folga de projeto.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados da extração sólido-líquido do óleo de soja com hexano são apresentados na Tabela 3. A simulação foi conduzida a $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ e 1 bar, com vazão total de alimentação de $1000\text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$, composta por $290\text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$ de fração extraível (óleo e água) e $710\text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$ de bagaço/inertes. A análise teve como finalidade avaliar a remoção progressiva do óleo ao longo dos sete estágios de extração e a evolução da composição mássica das fases.

A fração mássica de óleo diminuiu de 0,140 no primeiro estágio para 0,012 no sétimo estágio, indicando transferência eficiente do óleo para a fase solvente. Paralelamente, a fração de hexano aumentou de 0,222 para 0,933, evidenciando o enriquecimento da fase líquida e a redução do óleo remanescente na matriz sólida. Esse comportamento é compatível com sistemas de extração por solvente, nos quais compostos lipofílicos são preferencialmente transferidos para a fase orgânica (Bessa *et al.*, 2023).

A fração de bagaço/inertes reduziu-se de 0,554 para 0,047 ao longo dos estágios, refletindo a separação progressiva entre as fases sólida e líquida. O comportamento observado confirma que o arranjo de mixers e splitters reproduziu de forma adequada o contato sucessivo característico de sistemas contracorrentes, favorecendo a difusão do óleo e aumentando a eficiência global do processo (Potrich *et al.*, 2022).

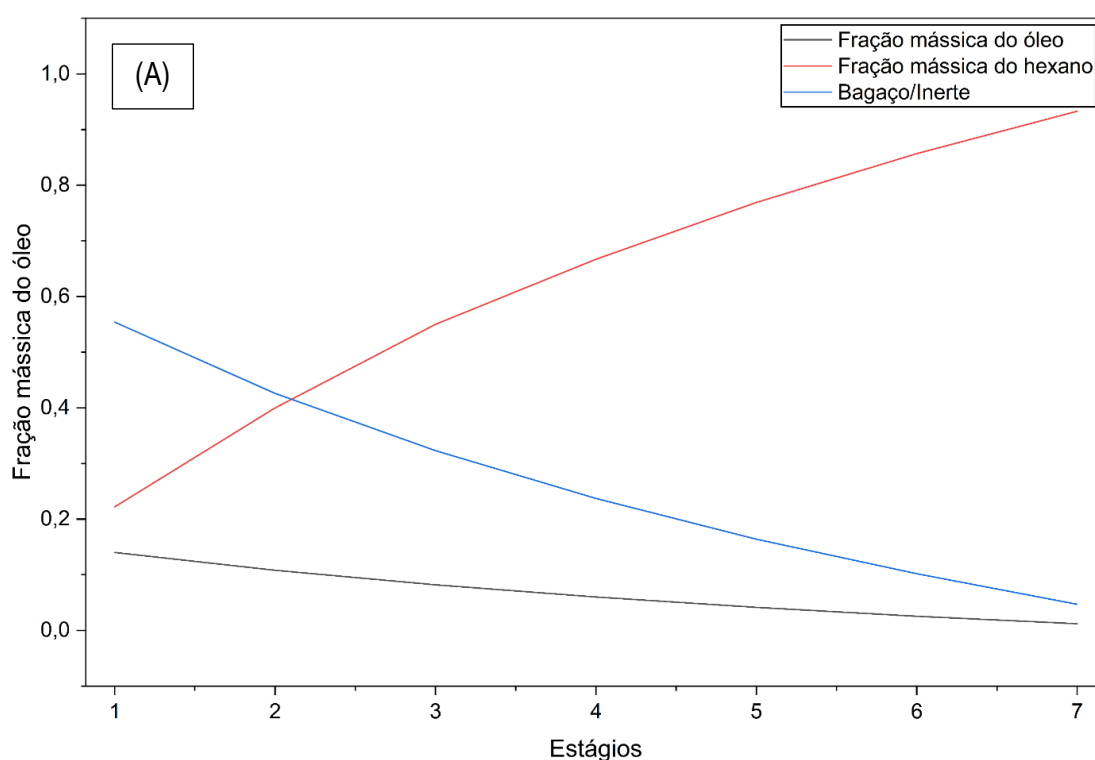
Em conjunto, os dados da Tabela 3 demonstram que o hexano manteve elevada seletividade para a fração lipídica, resultado esperado em razão de sua baixa polaridade e ampla aplicação industrial na extração de óleos vegetais. Esse desempenho reforça a adequação do modelo proposto para representar a etapa de extração e recuperação de óleo em condições moderadas de temperatura e pressão (Silva, 2022; Rodrigues *et al.*, 2016).

Tabela 3. Frações mássicas obtidas nos diferentes estágios de extração de óleo de soja com hexano (T = 25 °C; P = 1 bar).

Estágios	Fração mássica do óleo	Fração mássica do hexano	Bagaço/Inerte
1	0,140	0,222	0,554
2	0,108	0,400	0,426
3	0,082	0,550	0,323
4	0,060	0,667	0,237
5	0,041	0,769	0,164
6	0,025	0,857	0,102
7	0,012	0,933	0,047
Produto	0,945	0,990	0

Fonte: Os autores (2025).

A Figura 2 complementa a Tabela 3 ao apresentar graficamente a evolução das frações mássicas de óleo, solvente e bagaço/inertes ao longo dos sete estágios simulados de extração. A tendência observada confirma o efeito do regime contracorrente simulado, no qual o contato sucessivo entre solvente e matriz sólida promove maior remoção de óleo a cada etapa.



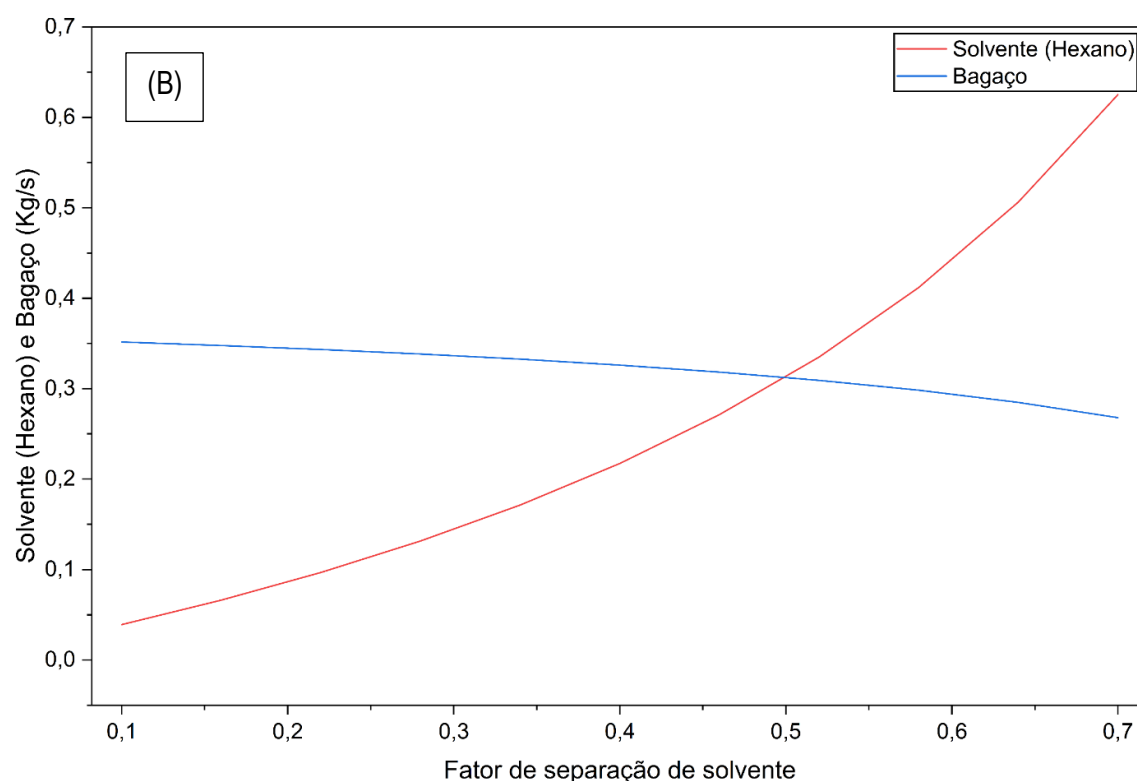


Figura 2. (A) Frações mássicas obtidas nos diferentes estágios de extração do óleo de soja ($T = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$; $P = 1\text{ bar}$). (B) Relação entre solvente e bagaço em função do fator de separação, via simulação COCO. Fonte: Os autores (2025).

Observa-se que a fração mássica de óleo diminui progressivamente ao longo do processo, passando de valores mais elevados nos estágios iniciais para valores reduzidos no último estágio, o que indica a transferência gradual do óleo da matriz sólida para a fase líquida. Esse comportamento evidencia a eficiência do regime contracorrente adotado na simulação, no qual o contato sucessivo entre o bagaço e o solvente favorece a remoção do óleo residual presente na fase sólida. Em contrapartida, a fração mássica de hexano aumenta ao longo dos estágios, demonstrando o enriquecimento progressivo da fase solvente com o óleo extraído, comportamento característico de sistemas de extração por solvente aplicados a matrizes oleaginosas (Bessa *et al.*, 2023).

A redução da fração correspondente ao bagaço/inertes também confirma a efetividade das etapas de separação sólido-líquido representadas no modelo. À medida que o processo avança, a corrente sólida apresenta menor teor de óleo remanescente, enquanto a fase líquida se torna mais concentrada em solvente e óleo extraído. Segundo Potrich *et al.* (2022), o aumento do número de estágios e do tempo de contato entre solvente e matriz sólida favorece a difusão do óleo e melhora a eficiência global da extração. Dessa forma, os resultados obtidos indicam que o arranjo composto por mixers e splitters foi capaz de representar adequadamente o comportamento esperado de uma coluna de extração contínua, permitindo simular a

transferência de massa entre as fases e avaliar a eficiência do processo de extração de óleo de soja com hexano.

A comparação global entre os solventes, apresentada na Tabela 4, indica que ambos proporcionaram altos rendimentos de extração; entretanto, o hexano apresentou melhor desempenho técnico, sobretudo pela menor retenção de óleo no farelo.

Tabela 4. Valores dos parâmetros de validação para o processo de extração via simulação COCO

Parâmetros	Solventes	
	Hexano	Etanol
E (%)	99,5	99
P (%)	98	98
η_s (%)	98,5	95,6
R_0 (%)	0,5	1,6

Fonte: Os autores (2025).

Os dados da Tabela 4 evidenciam melhor desempenho técnico do hexano no processo de extração. Esse solvente apresentou maior eficiência, com η_s de 98,5 %, indicando menor consumo de solvente por quilograma de óleo extraído. Esse resultado está associado à baixa polaridade do hexano, que reduz sua interação com a matriz lignocelulósica e, conseqüentemente, sua retenção no bagaço (Oshin *et al.*, 2024; Kong *et al.*, 2018). Além disso, o teor residual de óleo no farelo (R_0) foi de 0,5 %, valor compatível com o padrão industrial (Ramos *et al.*, 2024). O rendimento global de extração (E) atingiu 99,5 %, confirmando a elevada eficiência do hexano na extração de óleos vegetais. Segundo Almeida *et al.* (2019), essa seletividade favorece a transferência do óleo para a fase líquida, reduzindo perdas no sistema e mantendo elevada pureza da fase oleosa (P), que foi de 98 %.

Por outro lado, o etanol apresentou eficiência do solvente de 95,6 %, valor ligeiramente inferior ao do hexano, mas ainda elevado. Essa diferença está relacionada à maior polaridade do etanol e à sua capacidade de absorver água, fatores que aumentam sua interação com a matriz sólida e podem reduzir a eficiência global do processo. Mesmo assim, o rendimento de extração (E) foi de 99 %, demonstrando boa capacidade extrativa e confirmando a viabilidade técnica do etanol como solvente alternativo. Esse desempenho está de acordo com estudos experimentais de extração de óleo de soja com etanol aquoso a 70 °C, que relatam rendimentos entre 95 % e 99 % após 120 minutos de contato (Potrich *et al.*, 2022). No entanto, o teor residual de óleo no farelo (R_0) foi mais elevado, atingindo 1,66 %, resultado compatível com o comportamento de solventes polares em matrizes lignocelulósicas. A redução desse teor poderia ser obtida com a inclusão de novos estágios de mixers e splitters, embora isso implicasse aumento dos custos operacionais em comparação ao processo com hexano.

Para atestar a confiabilidade e a precisão do modelo implementado no COCO Simulator, os resultados obtidos foram submetidos a uma validação quantitativa frente aos dados experimentais e industriais reportados na literatura (Dagostin *et al.*, 2015; Comerlatto *et al.*, 2021; Ramos *et al.*, 2024). Observou-se uma elevada

concordância entre os cenários simulados e o comportamento real do processo. Para o hexano, o rendimento de extração (E) simulado de 99,5 % atendeu rigorosamente ao critério de validação (≥ 98 %), apresentando um desvio conservador e aderente aos processos industriais otimizados. Da mesma forma, o teor de óleo residual no farelo (R_0) obtido para o hexano foi de exatos 0,5 % *m/m*, valor que se sobrepõe ao limite inferior da faixa típica da literatura (0,5 a 2,0 % *m/m*), resultando em um erro relativo próximo a zero frente aos melhores cenários reais. Para o etanol, o modelo previu um R_0 de 1,66%, valor que se enquadra de forma robusta e com margem de segurança dentro do teto experimental de retenção para solventes alternativos (limite de até 4 %).

A validação quantitativa do modelo, apresentada na Tabela 5, indicou boa aderência dos resultados simulados aos critérios operacionais adotados. Para o n-hexano, o erro relativo médio dos indicadores foi de 2,09 % $\pm$ 1,67 %, enquanto para o etanol foi de 6,25 % $\pm$ 7,32 %. A maior dispersão observada para o etanol está associada principalmente ao teor residual de óleo no farelo, que, embora permaneça dentro de faixa tecnicamente aceitável, é mais sensível à polaridade do solvente e ao teor de água do sistema.

Tabela 5. Métricas quantitativas de validação do modelo de simulação.

Ind./solvente	Simulado	Ref.	DA	ER (%)
E – n-hexano	99,5	98,0	+1,5 p.p.	1,5
E – etanol	99,0	95,0	+4,0 p.p.	4,2
P – n-hexano	98,0	95,0	+3,0 p.p.	3,1
P – etanol	98,0	95,0	+3,0 p.p.	3,1
η_s – n-hexano	98,5	95,0	+3,5 p.p.	3,6
η_s – etanol	95,6	95,0	+0,6 p.p.	0,6
R_0 – n-hexano	0,5	0,5	0,0 p.p.	0,0
R_0 – etanol	1,6	2,0	-0,3 p.p.	17,0

Fonte: Os autores (2025), com referências operacionais baseadas em Dagostin *et al.* (2015), Comerlatto *et al.* (2021) e Ramos *et al.* (2024).

É importante destacar que o erro relativo não deve ser interpretado como erro experimental absoluto, mas como medida de distância entre os resultados simulados e os critérios de referência. A ausência de replicatas experimentais limita a aplicação de estatística inferencial; por isso, os indicadores estatísticos foram empregados como suporte de validação e não como prova definitiva de equivalência entre os processos.

A eficiência de recuperação do solvente a partir do farelo está diretamente relacionada às suas propriedades físico-químicas, tais como calor específico, calor latente de vaporização, ponto de ebulição, solubilidade em óleo, viscosidade, gravidade específica e polaridade. O conhecimento prévio desses parâmetros é essencial para a implementação de simulações confiáveis do processo de extração de óleo vegetal, especialmente quando o objetivo inclui analisar desempenho energético e impactos ambientais.

Além do etanol e do CO₂ supercrítico, outros solventes verdes, como solventes eutéticos profundos naturais (NADES) e misturas de álcoois de cadeia curta, podem ser avaliados em estudos futuros. A incorporação desses cenários ao COCO Simulator

permitiria comparar rendimento de extração, pureza da fase oleosa, eficiência do solvente e teor de óleo residual no farelo, ampliando a análise de alternativas sustentáveis (Bragagnolo *et al.*, 2022; Bessa *et al.*, 2023). Nota-se que um solvente ideal deve apresentar alta solubilidade do óleo em temperaturas elevadas e baixa solubilidade em temperatura ambiente, favorecendo a recuperação por resfriamento ou separação de fases, o que reduz substancialmente a demanda térmica na etapa de destilação.

Para avaliar alternativas mais adequadas ao etanol, recomenda-se ampliar a simulação no COCO Simulator, incorporando novos solventes e comparando indicadores como rendimento de extração (E), pureza da fase oleosa (P), eficiência do solvente (η_s) e teor de óleo residual no farelo (R_o). Esses parâmetros permitem uma análise técnica mais criteriosa entre diferentes rotas sustentáveis. Gandhi (2003) observou que, em extrações com solventes aquosos, a quantidade de solvente orgânico pode ser reduzida, embora a temperatura de operação tenda a ser superior devido à presença de umidade no sistema. Assim, a seleção adequada das propriedades físico-químicas dos solventes é essencial para maximizar a eficiência da extração de oleaginosas.

Além do desempenho técnico, a escolha do solvente deve considerar aspectos ambientais, energéticos e regulatórios. As simulações indicaram que o hexano apresentou melhor desempenho em rendimento e menor teor residual de óleo no farelo; entretanto, suas limitações ambientais são relevantes. Por ser um composto orgânico volátil, inflamável e tóxico, o hexano pode gerar emissões atmosféricas, riscos ocupacionais e necessidade de sistemas adicionais de contenção e tratamento (Hamilton, 2024).

Do ponto de vista energético, o hexano apresenta a vantagem de possuir menor calor latente de vaporização, o que reduz a demanda térmica na etapa de recuperação do solvente no evaporador ou *stripper*. Contudo, tal vantagem energética deve ser relativizada pela origem fóssil do hexano, pela alta inflamabilidade e pelos riscos inerentes ao manuseio de hidrocarbonetos leves em condições industriais. Estudos como os de Cravotto *et al.* (2022) e Janicka *et al.* (2022) ressaltam que processos dependentes de solventes derivados do petróleo possuem maior pegada de carbono e menor alinhamento às práticas de química verde, representando desafios para cadeias produtivas que buscam certificações ambientais internacionais, especialmente no mercado de alimentos e cosméticos.

No caso do etanol, apesar do teor residual de óleo no farelo ser superior ao observado para o hexano, a análise integrada indica melhor desempenho ambiental. O etanol é renovável, biodegradável e menos tóxico, reduzindo os riscos de contaminação e melhorando a segurança operacional. Além disso, sua aplicação é favorecida no contexto brasileiro pela ampla disponibilidade, competitividade e integração com cadeias agroindustriais. Segundo Dagostin *et al.* (2015), a maior demanda energética para recuperação do etanol pode ser compensada quando o processo utiliza fontes renováveis, como biomassa. Estudos também indicam que o etanol pode contribuir para a redução de contaminantes hidrofóbicos e atuar como

agente de pré-refino, favorecendo etapas posteriores de purificação do óleo (Comerlatto *et al.*, 2021; Da Silva *et al.*, 2010).

Outro ponto relevante refere-se à geração de efluentes. Processos com etanol tendem a produzir correntes líquidas menos perigosas e de tratamento mais simples, em razão de sua miscibilidade com água e biodegradabilidade. Em contrapartida, processos com hexano podem gerar efluentes contendo hidrocarbonetos e óleo emulsificado, exigindo tratamentos físico-químicos mais complexos e onerosos (Almeida *et al.*, 2019). Sob a perspectiva da Política Nacional de Resíduos Sólidos e de análises de ciclo de vida, o uso de solventes renováveis contribui para reduzir riscos ambientais, emissões e resíduos perigosos (Janicka *et al.*, 2022).

Portanto, embora o hexano permaneça como referência em eficiência técnica, o etanol apresenta vantagens ambientais e regulatórias relevantes, com rendimento elevado e menor toxicidade. Os resultados obtidos no COCO Simulator demonstram que ambas as rotas são tecnicamente viáveis: o hexano se destaca quando a prioridade é maximizar a extração, enquanto o etanol representa uma alternativa estratégica para processos mais sustentáveis na indústria de óleos vegetais.

4 CONCLUSÃO

Os resultados obtidos por meio da modelagem e simulação no COCO Simulator demonstraram que tanto o hexano quanto o etanol são capazes de promover elevados rendimentos na extração de óleo de soja, confirmando a viabilidade técnica das duas rotas. O hexano apresentou desempenho ligeiramente superior nos parâmetros de eficiência do solvente, pureza da fase oleosa e teor residual de óleo no farelo, refletindo o comportamento já consolidado industrialmente. Entretanto, a análise ambiental integrada evidenciou que o hexano permanece associado a maiores riscos operacionais, maior potencial de emissões atmosféricas e geração de resíduos perigosos, além de depender de insumos de origem fóssil.

O etanol, por sua vez, destacou-se pela menor toxicidade, origem renovável, biodegradabilidade e melhor alinhamento às diretrizes de sustentabilidade, especialmente no contexto da Política Nacional de Resíduos Sólidos e das exigências atuais por cadeias produtivas mais limpas. Embora seu desempenho técnico apresente pequenas limitações, estas podem ser mitigadas por ajustes de processo ou pelo uso de fontes renováveis de energia, amplamente disponíveis na agroindústria brasileira. Assim, o estudo evidencia que a escolha do solvente deve considerar não apenas a eficiência extrativa, mas também aspectos ambientais, econômicos e regulatórios. Conclui-se que o etanol representa uma alternativa tecnicamente competitiva e ambientalmente mais favorável ao hexano, constituindo uma rota estratégica para a transição rumo a processos mais sustentáveis na indústria de óleos vegetais.

5 REFERÊNCIAS

- ALMEIDA, E. C. P. de; et al. Análise técnico-econômica da substituição do hexano por etanol na extração de óleo de soja. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA EM INICIAÇÃO CIENTÍFICA, 1., 2019, São Paulo. **Anais [...]** São Paulo: Editora Blucher, 2019. p. 29649.
- ALOBID, M. et al. Development of a membrane process in CAPE-OPEN to CAPE-OPEN (COCO) simulator for carbon dioxide separation. **Results in Engineering**, v. 22, p. 102239, 2024.
- BARTIER, M. et al. Semi-industrial countercurrent extraction of soybean with 2-methyloxolane for high-quality protein and oil. **ACS Sustainable Chemistry & Engineering**, v. 12, p. 8478–8489, 2024.
- BESSA, L. et al. Experimental Comparison between Ethanol and Hexane as Solvents for Oil Extraction. **Molecules**, v. 28, n. 15, 2023.
- BRAGAGNOLO, C. et al. Pressurized natural deep eutectic solvents: An alternative approach to agro-soy by-products. **Frontiers in Chemistry**, v. 10, 2022.
- BRASIL. Conselho Nacional do Meio Ambiente. **Resolução nº 357, de 17 de março de 2005**. Dispõe sobre a classificação dos corpos de água e diretrizes ambientais para o seu enquadramento. Brasília, DF: CONAMA, 2005. Disponível em: https://conama.mma.gov.br/?option=com_sisconama&task=arquivo.download&id=450. Acesso em: 22 fev. 2026.
- BRASIL. Conselho Nacional do Meio Ambiente. **Resolução nº 430, de 13 de maio de 2011**. Dispõe sobre as condições e padrões de lançamento de efluentes, complementa e altera a Resolução nº 357, de 17 de março de 2005. Brasília, DF: CONAMA, 2011. Disponível em: <http://extenso.mma.gov.br/port/conama/res/res11/res43011.pdf>. Acesso em: 22 fev. 2026.
- BRASIL. **Lei nº 12.305, de 2 de agosto de 2010**. Institui a Política Nacional de Resíduos Sólidos; altera a Lei no 9.605, de 12 de fevereiro de 1998; e dá outras providências. Brasília, DF: Presidência da República, [2010]. Disponível em: https://www.planalto.gov.br/ccivil_03/_ato2007-2010/2010/lei/l12305.htm. Acesso em: 22 fev. 2026.
- CARRÉ, P.; et al. Solvent solutions: comparing extraction methods for edible oils and proteins—Part 7: solvent safety. **OCL – Oilseeds and fats, Crops and Lipids**, v. 31, 2024.

COMERLATTO, A.; VOLL, F. A.; DAGA, A. L.; FONTANA, É. Mass transfer in soybean oil extraction using ethanol/isopropyl alcohol mixtures. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 165, 120630, 2021.

CRAVOTTO, C.; et al. Towards substitution of hexane as extraction solvent of natural products and food ingredients with non-toxic and renewable bio-based solvents. **Foods**, v. 11, n. 21, 3412, 2022.

CSENDES, V. et al. Application of Multi-Software Engineering: A Review and a Kinetic Parameter Identification Case Study. **Processes**, v. 11, n. 5, p. 1503, 2023.

DA SILVA, C. A. S.; GABRIELI, C.; MEIRELLES, A. J. A. Mutual solubility for systems composed of vegetable oil + ethanol + water + hexane. **Journal of Chemical & Engineering Data**, v. 55, p. 2750–2756, 2010.

DAGOSTIN, J. L. A.; et al. Extraction of soybean oil using ethanol and mixtures with alkyl esters (biodiesel) as co-solvent: kinetics and thermodynamics. **Industrial Crops & Products**, v. 74, p. 69–76, 2015.

DE JESUS, S. S.; MACIEL FILHO, R. Leading Edge Technologies and Perspectives in Industrial Oilseed Extraction. **Molecules**, v. 28, n. 16, 2023.

FEEDIPEDIA. **Soybean meal**. 2012–2024. (Valores típicos de óleo residual < 2% em farelos por extração com solvente). Disponível em: <https://www.feedipedia.org/node/674>. Acesso em: 22 fev. 2026.

HAMILTON, R. J. n-Hexane Toxicity. In: **StatPearls**. Treasure Island (FL): StatPearls Publishing, 2024. Disponível em: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK537110/>. Acesso em: 22 fev. 2026.

JANICKA, P.; et al. Trends in the new generation of green solvents in extraction processes. **Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry**, v. 37, 100670, 2022.

KONG, W.; et al. Towards an energy-friendly and cleaner solvent-extraction process for vegetable oils: a review. **Journal of Cleaner Production**, v. 196, p. 947–963, 2018.

OSEI-OWUSU, A. et al. Kinetics and thermodynamic studies on oil extraction using hexane. **Heliyon**, v. 10, n. 13, 2024.

OSHIN, T. et al. Comparative simulation studies on the countercurrent multi-stage solid–liquid extraction of soybean oil by ethanol and hexane. **Landmark University**, 2024.

POTRICH, E. et al. Evaluation of Techniques for Intensifying the Process of the Alcoholic Extraction. **Foods**, v. 11, n. 4, 2022.

RAMOS, P. R.; et al. Extraction of soybean oil with pressurized ethanol: prospects for a new processing approach with scale-up analysis. **Processes**, v. 12, n. 10, 2224, 2024.

RODRIGUES, C. E. C.; OLIVEIRA, R.; MEIRELLES, A. J. A. Phase equilibrium for systems composed of refined soybean oil, linoleic acid, ethanol and water at 323.2 K. **Fluid Phase Equilibria**, v. 261, p. 122–128, 2007.

RODRIGUES, J. R. **Otimização da extração de lipídeos, via mistura ternária hexano-etanol-água, de matriz composta de resíduos do processamento de tilápias**. 2016. 147 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2016.

SILVA, J. V. V. da. **Extração e caracterização físico-química e microbiológica do óleo de semente de maracujá azedo (*Passiflora edulis* Sims)**. 2022. 79 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2022.

SILVA, R. *et al.* Análise computacional da influência de parâmetros na reforma a seco do metano com catalizador de Ni. *In*: CONGRESSO BRASILEIRO DE CATÁLISE, 23., 2025. **Anais** [...]. [S. l.]: SBCAT, 2025. Disponível em: <https://submissao.cbcat.sbcac.org/index.php/23CBCAT/article/view/224>. Acesso em: 23 mai. 2026.

SILVA, R. S. *et al.* Produção de hidrocarbonetos via síntese de Fischer-Tropsch: uma abordagem baseada em simulação computacional. *In*: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 2025. **Anais** [...]. [S. l.]: Proceedings Science, 2025. Disponível em: <https://proceedings.science/cobeq/cobeq-2025/trabalhos/producao-de-hidrocarbonetos-via-sintese-de-fischer-tropsch-uma-abordagem-baseada?lang=pt-br>. Acesso em: 23 mai. 2026.

VAN BATEN, J. M.; SZCZEPANSKI, R. A thermodynamic equilibrium reactor model as a CAPE-OPEN unit operation. **Computers & Chemical Engineering**, v. 35, p. 1251–1256, 2011.