Universidade de Brasília Instituto de Química Curso de Engenharia Química

PROJETO DE ENGENHARIA QUÍMICA

Produção de Óxido de Etileno

Ana Clara Cotta Neiva 18/0051806 Bruno Assis da Rocha 15/0167890 Clara Costa Silva 17/0079112 Caio Marques Fernandes 17/0007472 Giulia Cruz Lamas 17/0054501 Letícia Rodrigues Santos 17/0016072 Vinicius Caetanno de Almeida Paturi 17/0023478 Wederson Rodrigo Porto de Sousa 19/0098511

Brasília, 30 de setembro de 2022.

RESUMO

O presente projeto tem como objetivo o estudo de uma planta industrial que seja financeiramente sustentável e que tenha como produto óxido de etileno a partir dos reagentes etileno e oxigênio, na presença da prata como catalisador. Com o auxílio da ferramenta de software Aspen HYSYS®, foi elaborada a simulação do processo e posterior dimensionamento de todos os equipamentos componentes da planta. Partindo-se de princípios de segurança do trabalho, de normas de legislação ambiental e de métodos de estimação de custos, analisou-se diferentes cenários para a coluna de destilação presente na planta – a saber, configurações com 6, 8, 10 e 12 pratos. Para a parte reacional do processo foi analisado o diâmetro das tubulações, temperatura de operação e dimensão do reator PFR. Quanto a parte de efluente gerado foram utilizadas resoluções do CONAMA para o tratamento físico-químico e biológico, já para os efluentes gasosos foram utilizadas políticas do carbono zero. A análise financeira teve como objetivo estabelecer um ótimo econômico, a partir do qual foi realizada a avaliação econômica do projeto a fim de se determinar a sua rentabilidade e atratividade ao longo de seu tempo de vida.

Palavras-Chave: óxido de etileno, etileno, etilenoglicol, catalisador, coluna de destilação, reator PFR.

ÍNDICE

1. INTRODUÇÃO E OBJETIVOS	5
1.1. Introdução	5
1.2. Objetivos	7
2. REFERENCIAL TEÓRICO	7
2.1. Óxido de Etileno	7
2.1.1. Aplicações	9
2.1.2. Processo Produtivo Industrial 1	10
2.1.3. Mercado 1	11
2.2. Reações 1	12
2.2.1. Mecanismo de Adsorção no Catalisador 1	13
2.2.2. Interações com outras Espécies Químicas 1	13
2.2.3. Impacto da Temperatura nas Taxas de Reação 1	14
2.2.4. Análise de Seletividade 1	15
3. DESCRIÇÃO DO CENÁRIO 1	17
3.1. Equipamentos 1	17
3.2. Cálculo de custos 1	19
3.3. Impacto Ambiental 2	23
3.4. Diagrama PFD 2	24

4	. PROJETO DA PLANTA	. 26
	4.1. Correntes de processo	. 26
	4.2. Bombas	. 27
	4.3. Compressores	. 28
	4.4. Trocadores de calor	. 29
	4.4.1. Trocador E-701 (Heater)	. 33
	4.4.2. Trocador E-702 (Cooler)	. 35
	4.4.3. Caldeira E-703	. 37
	4.4.4. Condensador E-704	. 39
	4.4.5. Trocador de Calor E-705 (Cooler)	. 41
	4.5. Reator	. 42
	4.6. Torres de separação	. 47
	4.6.1. Torre de absorção	. 47
	4.6.2. Torre de destilação	. 50
	4.7. Vaso pulmão	. 56
	4.8. Listagem de indicadores da torre de destilação	. 58
	4.9. Listagem de controladores	. 59
	4.10. Listagem de alarmes	. 60
	4.11. Listagem de intertravamentos	. 61
	4.12. Listagem de válvulas de segurança	. 62
	4.13. Diagrama mecânico de processo	. 63
	4.14. Avaliação econômica do processo	. 65

4.14.1. Capital imobilizado	66
4.14.2. Investimento	68
4.14.3. Vendas	69
4.14.4. Custos de fabricação diretos	69
4.14.5. Custos de fabricação indiretos	70
4.14.6. Custos de fabricação indiretos fixos	72
4.14.7. Gastos gerais	73
4.14.8. Fluxo de caixa	73
4.15. Avaliação de impacto ambiental	77
4.15.1. Leis e Normas Ambientais Brasileiras	77
4.15.2. Efluentes do Processo Produtivo	78
4.15.2.1. Dióxido de Carbono (CO ₂)	78
4.15.2.2. Metano (CH ₄)	79
4.15.2.3. Água	80
5. CONCLUSÕES	82

6. BIBLIOGRAFIA 8	33
-------------------	----

1. INTRODUÇÃO E OBJETIVOS

1.1. Introdução

O óxido de etileno é a terceira maior matéria-prima orgânica em derivados de etileno, e apresenta uma demanda global estimada, em 2011, em 29 bilhões de dólares (ABOU SHAMA; XU, 2018; ZHANG; HANG; LIU, 2020). Trata-se de um composto orgânico com um alto poder reativo, utilizado em diversos ramos da indústria, e com um crescimento anual composto entre 2013 e 2018 em 5,7% ao ano (ZHANG; HANG; LIU, 2020). O processo produtivo do óxido de etileno é feito a partir da oxidação catalítica do etileno na presença de prata.

O uso da molécula de óxido de etileno para fins industriais data desde o período da Primeira Guerra Mundial, o qual representa o início da indústria petroquímica. Nesse período, o principal uso desse composto estava ligado à produção do gás mostarda. Posteriormente, no pós-guerra em 1945, a produção em escala industrial de uma série de derivados do etileno já estava consagrada (LEÓN MARTÍNEZ; ARTEAGA COLMENARES, 2008).

O uso industrial do óxido de etileno varia de produtos anticoagulantes, como o etilenoglicol, até intermediário na produção de compostos químicos orgânicos para controle de insetos em produtos agrícolas, o que o torna um produto de grande potencial econômico. O uso majoritário desse óxido está na produção de etilenoglicol (72%), como ilustrado na Figura 1 (FAVEERE *et al.*, 2021).



Figura 1. Aplicação e mercado do Etileno e Óxido de Etileno. Fonte: FAVEERE *et al.*, 2021.

Os principais usos do óxido de etileno estão listados a seguir (FAVEERE *et al.*, 2021).

- Etileno glicóis: intermediários de síntese para fios, fibras e garrafas de poliéster (PET), anticongelantes, resinas para barcos e piscinas, plastificantes, líquidos para freios, fluidos de refrigeração e arrefecimento.
- Éteres glicólicos: uso como solvente para tintas, vernizes, componentes fluidos de freios e detergentes.
- Acetatos de éteres glicólicos: aplicação em couros, madeiras ou metais.
- Etenolaminas: grande utilização como absorvente de gases em plantas químicas, alcalinizante, detergentes, cosméticos e intermediários em produção de alcanolamidas.
- Alquilfenóis etoxilados: usado como tensoativos não-iônicos, detergentes, óleos lubrificantes, tintas, polímeros, extração de petróleos e indústria têxtil.
- Álcool graxo etoxilado: tensoativo não-iônico, adjuvante agrícola, auxiliares na indústria, couros e intermediários.
- Polióis: intermediários de síntese para espumas de poliuretano.

Apesar do cenário econômico ser visto com otimismo por parte dos grandes empreendedores, alguns pontos negativos devem ser levados em questão. O índice de acidentes e contaminação por óxido de etileno é um problema que pode perpetuar durante anos nesse tipo de planta industrial. Na presença de ar, ou até mesmo gases inertes, o óxido de etileno pode se decompor e provocar explosões, a depender da temperatura, da pressão e das fontes de energia de ignição (XELEGATI *et al.*, 2006). Por consequência, para que haja a operação segura de uma planta industrial, deve-se implementar uma série de alarmes, válvulas de segurança e controladores, bem como fomentar a capacitação de profissionais em relação à operação adequada e segura de uma planta química.

É sabido que o impacto ambiental de usina produtora de óxido de etileno é potencialmente alto, uma vez que o tratamento de resíduos muitas vezes não ocorre, ou ocorre com dificuldades dentro das empresas. No entanto, algumas etapas essenciais podem ser seguidas para que se adequem as exigências previstas na legislação ambiental (TERA, 2021).

1.2. Objetivos

O objetivo do presente projeto é a produção de óxido de etileno a partir de etileno e oxigênio como matérias-primas do processo. Para isso, simulações da planta foram realizadas a partir do software Aspen HYSYS [®]. Os dados obtidos a partir da simulação foram utilizados nos dimensionamentos dos equipamentos. A projeção para o projeto foi a seguinte:

- produção anual de óxido de etileno: 87.840 t/ano;
- consumo anual de etileno: 76.440 t/ano; e
- consumo anual de oxigênio: 96.240 t/ano.

Os parâmetros levados em questão para o dimensionamento foram (TURTON *et al.*, 2018):

- balanços de massa e energia da unidade;
- projeto de vasos, torres e reatores que integram a unidade;
- projeto de sistemas de impulsionamento de fluídos;
- projeto de sistemas de troca de calor;
- projeto de sistemas de instrumentação, de controle, bem como dos elementos de segurança da planta no Diagrama de Fluxo de Processo (PFD);
- realização do Diagrama de Processos e Instrumentação (P&ID) da coluna de destilação;
- análise da viabilidade econômica do processo; e
- estudo dos impactos ambientais da planta.

2. REFERENCIAL TEÓRICO

2.1. Óxido de Etileno

O produto que se espera obter através do processo que será proposto é o óxido de etileno (ou oxirano – C_2H_4O). Essa substância é um éter cíclico gasoso tóxico, incolor, inflamável e com um cheiro doce característico de um éter (PUBCHEM, 2022c). Ele é formado por duas moléculas de carbono interligadas entre si e ligadas a uma molécula de oxigênio, conforme a Figura 2.



Figura 2. Estrutura tridimensional do óxido de etileno.

Dentre as diversas propriedades físico-químicas do óxido de etileno, listam-se algumas na Tabela 1.

Propriedades físico-quími	cas	Referência
Cor/forma	Gás incolor nas CNTP e líquido incolor em temperaturas abaixo de 51 °F.	(PUBCHEM, 2022c)
Ponto de ebulição	51 °F ou, aproximadamente, 10,6 °C	(PUBCHEM, 2022c)
Ponto de fusão	–171 °F ou, aproximadamente, – 111 °C	(PUBCHEM, 2022c)
Solubilidade	Miscível em água e solúvel em substâncias como benzeno, acetona e etanol.	(PUBCHEM, 2022c)
Densidade relativa	1.950 em 0 °C	(MERK, 2022)
Reatividade	Mesmo possuindo o mesmo grupo de partida que os éteres de cadeia aberta, o óxido de etileno é muito mais reativo em reações de substituição nucleofílica, "abrindo-se" em meio ácido.	(MENEZES; SIQUEIRA, 2015)

Tabela 1. Propriedades físico-químicas do óxido de etileno.

O produto de interesse é um gás extremamente inflamável que pode reagir explosivamente até mesmo na ausência de ar. É tóxico se ingerido ou inalado e seu contato provoca queimadura severa à pele e dano aos olhos (MERK, 2022).

Além disso, ele pode provocar irritação das vias respiratórias, sonolência ou vertigem, defeitos genéticos, câncer, prejudicar a fertilidade e ainda provocar danos ao sistema nervoso por exposição repetida ou prolongada (MERK, 2022).

2.1.1. Aplicações

O éter cíclico em questão não possui muitas aplicações diretas. O principal uso dele nesse tipo de caso é na esterilização de equipamentos hospitalares termo sensíveis. Apesar de sua alta eficácia, o método de esterilização utilizado a partir desta substância apresenta resíduos tóxicos os quais devem ser removidos no fim do processo (SUNDIN; MACHADO NETO, 2012).

Contudo, tal óxido é vastamente utilizado de forma indireta na produção de vários produtos, como xampus, desinfetantes e sabão em pó. É um composto necessário também na confecção de tecidos altamente duráveis (COUNCIL, 2022).

O desenvolvimento de fluidos automotivos como anticongelantes e fluidos de freios também é feito com o uso de oxirano, bem como soluções de degelo para aviões. Ademais, está presente na construção civil, sendo utilizado na formação de produtos químicos base para a obtenção de asfalto, cimento, solventes e tratamentos de madeira (COUNCIL, 2022). A Figura 3 apresenta um resumo das substâncias químicas produzidas a partir do éter estudado.



Óxido de Etileno - uma matéria-prima essencial para muitos produtos importantes

Figura 3. Derivados do óxido de etileno. Adaptado de: COUNCIL, 2022.

2.1.2. Processo Produtivo Industrial

A produção industrial de óxido de etileno pode ser separada em duas etapas principais: a reação e a separação.

Inicialmente é preciso garantir uma corrente de alimentação que esteja de acordo com um padrão importante para a segurança: o intervalo de inflamabilidade, que indica a faixa de valores de concentração de um material combustível em que a presença de uma fonte de ignição pode promover uma combustão que, no contexto dessa operação produtiva, é uma reação explosiva indesejada. O intervalo de inflamabilidade do etileno é de 2,7-36,0% (v/v) (CONECT, 2018; PUBCHEM, 2022b; TURTON *et al.*, 2018).

A etapa de reação ocorre em um reator do tipo tubular preenchido com o catalisador escolhido (usualmente prata em um suporte inerte) na forma de um leito fixo, bastante comum em reações heterogêneas gasosas. Um pré-aquecedor é utilizado para manter a seletividade e as concentrações sob controle, evitando reações paralelas que introduzem espécies químicas extras no meio reacional que dificultam a etapa de separação posterior (TURTON *et al.*, 2018).

A etapa de separação se inicia com a condução da corrente resfriada do reator à uma torre de absorção. O solvente usado é geralmente a água, devido ao seu baixo custo, grande disponibilidade e sua baixa volatilidade em relação ao produto pretendido. A torre é usualmente empacotada, como a grande maioria das torres de absorção (TURTON *et al.*, 2018).

O gás recuperado na torre de absorção é enviado para uma etapa de tratamento com o objetivo de recuperar dióxido de carbono e é pressurizado para retornar ao processo como corrente de reciclo. O líquido, por outro lado, rico em óxido de etileno, é enviado à uma torre de destilação de pratos para a separação do solvente e do produto. O óxido de etileno produzido é obtido na forma de um destilado líquido. Outros produtos incluem o efluente de água, comumente reutilizado na coluna de absorção, e um destilado de mistura gasosa que é purgado da operação (TURTON *et al.*, 2018).

2.1.3. Mercado

O mercado do óxido de etileno pode ser analisado sob três diferentes perspectivas (MORDOR INTELLIGENCE, 2022):

- considerando-se os derivados dele, como etilenoglicóis, etoxilatos, etanolaminas, éteres de glicol, polietilenoglicol;
- com base na indústria de usuário final, que envolve os setores automotivo, agroquímico, alimentício, têxtil, dentre outros; e
- por meio da Geografia dos países que mais movimentam o mercado do oxirano.

Em 2021 o tamanho do mercado de óxido de etileno foi estimado em aproximadamente 25 milhões de toneladas, apesar do impacto causado pela pandemia de COVID-19, especialmente em 2020. Em fevereiro de 2020, a China registrou uma queda de 80% nas vendas do setor de beleza em relação ao mesmo período do ano anterior. Para se manter, a indústria teve que se reorganizar com a produção de desinfetantes para as mãos e agentes de limpeza (MORDOR INTELLIGENCE, 2022).

A curto prazo o uso de PET (tereftalato de polietileno) nas indústrias alimentícias e de bebidas têm impulsionado o crescimento do mercado, bem como o crescimento da demanda por itens domésticos e de cuidados pessoais nos países emergentes, principalmente da região Ásia-Pacífico (MORDOR INTELLIGENCE, 2022).

Nesse mesmo contexto está a indústria têxtil, grande consumidora do óxido de etileno por conta do uso de seus derivados no tratamento de fibras sintéticas e naturais. Os maiores fabricantes desse tipo de produto são: Índia, que registrou um lucro de exportação em 2021 superior em mais de 8 bilhões de dólares em comparação ao ano anterior, China, que se consolida como o maior exportador de roupas do mundo e Estados Unidos que também possui relevante lucro de exportação neste nicho (MORDOR INTELLIGENCE, 2022). Apesar disso, a decaída na produção da indústria automobilística no mundo todo tem atrapalhado o progresso do mercado supracitado (MORDOR INTELLIGENCE, 2022).

Algumas das principais unidades de produção de óxido de etileno estão dispostas na Tabela 2. (BOXSCORE, 2022; CLARIANT, 2018; DOYLE, 2019; MARKETS, 2017; MORDOR INTELLIGENCE, 2022).

Empresa	Localização	Capacidade produtiva (t/ano)
BASF	Antuérpia, Bélgica, Ludwigshafen, Alemanha	845.000 ¹
Petroliam Nasional Bhd (Petronas)	Johor, Malásia	_
Shell	Jurong Island, Cingapura	140.000
Clariant	Gendorf, Alemanha	_
Nippon Shokubai	Kawasaki, Japão (planta Chidori)	165.000
Nippon Shokubai	Kawasaki, Japão (planta Ukishima)	160.000

Tabela 2. Plantas de produção de óxido de etileno.

¹ Expansão prevista para 2022 e adição de capacidade produtiva de 400.000 t/ano na planta da Antuérpia.

2.2. Reações

A reação de oxidação incompleta do etileno é tal que

$$C_2H_4 + 0,5O_2 \rightarrow C_2H_4O$$
 (A)

Entretanto, outras duas reações indesejadas também podem ocorrer: a primeira é a oxidação completa concorrente do etileno na presença de grandes concentrações de oxigênio

$$C_2H_4 + 3O_2 \rightarrow 2CO_2 + 2H_2O$$
 (B)

e a segunda é a oxidação consecutiva do óxido de etileno produzido (TURTON *et al.*, 2018)

$$C_2H_4O + 2,5O_2 \rightarrow 2CO_2 + 2H_2O$$
 (C)

As leis de taxa de reação são expressas como:

$$r_A = \frac{0.653 \exp\left(-\frac{2384}{RT}\right) p_{C2H4}}{1 + 0.00098 \exp\left(\frac{11127}{RT}\right) p_{C2H4}}$$

$$r_{B} = \frac{454 \exp\left(-\frac{10332}{RT}\right) p_{C2H4}}{1 + 0.00098 \exp\left(\frac{11127}{RT}\right) p_{C2H4}}$$
$$r_{C} = \frac{1.4256 \exp\left(\frac{795}{RT}\right) p_{C2H40}^{2}}{1 + 0.000033 \exp\left(\frac{21062}{RT}\right) p_{C2H40}^{2}}$$

de modo que r é a taxa de reação em kmol/(s m³ de reator), R é a constante universal dos gases perfeitos, no valor de 1,987 kcal/(K kmol), T é a temperatura absoluta em K e p_i é a pressão parcial da espécie química em bar. Os valores de energia de ativação são dados em kcal/kmol (TURTON *et al.*, 2018).

2.2.1. Mecanismo de Adsorção no Catalisador

O mecanismo reacional da oxidação incompleta do etileno auxiliado por um catalisador de prata é descrito por KILTY; SACHTLER (1974). Inicialmente o oxigênio interage com os átomos de catalisador

$$O_2 + Ag \rightarrow Ag^+O_2^-$$

Em seguida, o etileno reage preferencialmente com esse produto

$$Ag^+O_2^- + C_2H_4 \rightarrow C_2H_4O + AgO$$

e o óxido de prata reage com outra molécula de etileno ou de óxido de etileno

$$AgO + C_2H_4 \rightarrow C_2H_4O + Ag$$
$$5AgO + C_2H_4O \rightarrow 2CO_2 + 2H_2O + 5Ag$$

de maneira que a reação global é tal que

$$7C_2H_4 + 6O_2(ads Ag) \rightarrow 6C_2H_4O + 2CO_2 + 2H_2O + 6Ag$$

2.2.2. Interações com outras Espécies Químicas

O óxido de etileno pode reagir de formas alternativas com outras espécies químicas comuns em processos industriais.

O oxirano pode ser submetido a reações de desproporcionamento, isto é, reações em que um mesmo reagente (nesse caso, o óxido de etileno) forma produtos oxidados e reduzidos com liberação de calor (AMERICAN CHEMISTRY COUNCIL, 2007; BAYLOR UNIVERSITY, 2022; SPOHRER; SCHALLER, 2021).

A polimerização também é um evento químico possível e a literatura já revelou a possibilidade dessas reações em temperaturas de 160 °C em meios reacionais com alta pureza de óxido de etileno, embora com auxílio de catalisadores, a polimerização possa ocorrer de forma significativa a temperaturas tão baixas quanto 100 °C (AMERICAN CHEMISTRY COUNCIL, 2007; BAYLOR UNIVERSITY, 2022).

Metais como potássio, estanho, zinco, alumínio, cobre, mercúrio, magnésio, óxidos de ferro e suas ligas estão entre as principais espécies químicas responsáveis por reações de desproporcionamento e/ou polimerização. Por esse motivo, os equipamentos que abrigam quantidades relevantes de oxirano devem ser constituídos de aço inoxidável ou níquel (AMERICAN CHEMISTRY COUNCIL, 2007; BAYLOR UNIVERSITY, 2022).

As reações com água são exotérmicas e produzem compostos de alta massa molecular e de grande produção industrial, conhecidos como glicóis (AMERICAN CHEMISTRY COUNCIL, 2007).

Amônia e aminas podem consumir o oxirano em reações de etoxilação, de modo que unidades de purgação de dióxido de carbono envolvidas no processo produtivo não podem usar essas espécies químicas como solvente, preferindo-se soluções de bicarbonato de potássio. O óxido de etileno também pode promover reações adversas com plásticos, borrachas e revestimentos (AMERICAN CHEMISTRY COUNCIL, 2007; BAYLOR UNIVERSITY, 2022; TURTON *et al.*, 2018).

2.2.3. Impacto da Temperatura nas Taxas de Reação

A influência da temperatura é um dos parâmetros mais impactantes das taxas de reação. As leis de taxa permitem uma avaliação do impacto dela na cinética de cada reação. A Figura 4 ilustra os resultados.



Figura 4. Comportamento das taxas das reações mais relevantes com a temperatura. Fonte: autoria própria.

O gráfico permite a constatação de que a reação desejada (A) é mais rápida que as outras (B e C) à baixas temperaturas.

2.2.4. Análise de Seletividade

A seletividade é uma propriedade importante no projeto de reatores químicos no sentido em que mede o impacto de condições do meio reacional e dos reagentes no favorecimento de formação de certos produtos em detrimento de outros. Conceitualmente, a seletividade é definida como a razão da soma das taxas de reação que formam os produtos desejados pela soma das taxas de reação que formam os produtos indesejados (FOGLER, 2018).

Para o processo produtivo de óxido de etileno analisado no escopo desse trabalho, a seletividade é medida com a expressão:

$$S = \frac{r_A}{r_B + r_C}$$

e uma avaliação das expressões das leis de taxa revelam três fatores que afetam essa propriedade: a pressão parcial de etileno, a pressão parcial de óxido de etileno e a temperatura (FOGLER, 2018).

A Figura 5 mostra o impacto das pressões na seletividade e revela que baixas pressões parciais de óxido de etileno e altas pressões parciais de etileno favorecem a taxa da reação do produto desejado.



Figura 5. Comportamento da seletividade com as pressões parciais de etileno e óxido de etileno à temperatura de 298,15 K. Fonte: autoria própria.

Por outro lado, a Figura 6 corrobora as conclusões tomadas na seção anterior com o favorecimento da seletividade à baixas temperaturas.



Figura 6. Comportamento da seletividade com a temperatura a pressões parciais de etileno e óxido de etileno de 200 bar. Fonte: autoria própria.

3. DESCRIÇÃO DO CENÁRIO

3.1. Equipamentos

A lista de equipamento na planta vai desde uma bomba até uma torre de destilação. A reação química empregada no processo é altamente exotérmica, ou seja, um grande volume de energia é liberado. Portanto, foram necessários 5 trocadores de calor de diferentes modelos distribuídos em diferentes pontos da indústria, entre eles estão um modelo do tipo *heater*, dois modelos do tipo *cooler*, uma caldeira e um condensador. O compressor utilizado no processo foi dimensionado a partir das especificações necessárias e optou-se por um do modelo recíproco.

A reação de produção de óxido de etileno é conduzida industrialmente em reatores multitubulares de leito fixo, refrigerados externamente por um fluido térmico que circula em contracorrente ao fluido de processo, como em um trocador de calor casco e tubo. O reator do tipo tubular (PFR) foi escolhido devido ao fácil controle para um processo contínuo, à maior conversão de volume para as reações catalíticas e à fácil automação (reator).

Em seguida, encontra-se uma torre de absorção, cuja alimentação é realizada pela corrente efluente do reator, que foi utilizada no primeiro trocador de integração energética para aquecer a corrente de alimentação. Essa corrente é formada pelo produto (óxido de etileno), subprodutos (CO₂ e H₂O) e reagentes (etileno e O₂) que não reagiram. Na torre de absorção, água é utilizada para absorver o óxido de etileno formado. O produto líquido de água e óxido de etileno é enviado para uma torre de destilação para a purificação do produto. O produto gasoso segue para uma unidade de purgação de CO₂, com uso de bicarbonato de potássio e retorna ao processo com reciclo.

O meio reacional é heterogêneo e a reação ocorre com catalisador de prata disperso em um suporte inerte que consiste em partículas com diâmetro de 7,5 mm, densidade de 1250 kg/m³ e porosidade 0,4. As leis de taxa das reações foram explicitadas na seção "Referencial Teórico, Reações" e são aqui repetidas (TURTON *et al.*, 2018):

$$r_{A} = \frac{0.653 \exp\left(-\frac{2384}{RT}\right) p_{C2H4}}{1 + 0.00098 \exp\left(\frac{11127}{RT}\right) p_{C2H4}}$$
$$r_{B} = \frac{454 \exp\left(-\frac{10332}{RT}\right) p_{C2H4}}{1 + 0.00098 \exp\left(\frac{11127}{RT}\right) p_{C2H4}}$$
$$r_{C} = \frac{1.4256 \exp\left(\frac{795}{RT}\right) p_{C2H40}}{1 + 0.000033 \exp\left(\frac{21062}{RT}\right) p_{C2H40}^{2}}$$

Três insumos são usados para a condução do processo de produção: etileno puro, oxigênio puro e água tratada para ser usada como solvente da coluna de absorção. As condições desses insumos são discriminadas na Tabela 3.

Insumo	Temperatura (°C)	Pressão (bar)	Vazão mássica (kg/h)	Vazão molar (kmol/h)
Etileno	50	22	9.555	340,6
Oxigênio	50	22	12.030	375,8

Tabela 3. Condições dos insumos.

Além disso, alguns parâmetros de projeto incluem a temperatura da mistura de alimentação pré-aquecida do reator de 226,4 °C, um rendimento de pelo menos 20% para o produto do reator e uma recuperação de ao menos 95% de produto na etapa de separação. Os equipamentos devem ser constituídos de aço inoxidável para reduzir os impactos dos efeitos corrosivos do óxido de etileno.

3.2. Cálculo de custos

Para o cálculo de custos, é importante realizar um levantamento de todos os possíveis gastos gerados pela planta, criando-se assim uma base de dados para a análise econômica. Sabe-se que a matéria-prima geralmente é um dos principais componentes do custo total de produção. Uma vez que a baixa seletividade de matéria-prima pode gerar um forte impacto negativo na economia do processo, vale a procura de possíveis fornecedores, de modo a aumentar sua seletividade e assim garantir sua aquisição por custos mais baratos (TOWLER; SINNOTT, 2013). Os custos de etileno e oxigênio utilizados neste projeto foram, respectivamente, iguais a US\$ 175,70/tonelada (ECHEMI, 2022a) e US\$ 60,00/tonelada (DORRIS *et al.*, 2016).

Outra ferramenta aliada útil é o gerenciamento inteligente de resíduos e subprodutos, uma vez que os subprodutos devem ser separados do produto final, gerando processos de separação e custos adicionais. Esta análise permite verificar se os subprodutos possuem valor e podem ser purificados e vendidos, ainda que acrescentem custos de equipamentos e subprocessos adicionais, podem valer a pena. Quando os resíduos e subprodutos não forem vendidos, eles devem passar por processos de tratamento para descarte ambientalmente adequado, o que também acrescenta processos e custos extras à planta. Uma alternativa é a recuperação e a reinserção na cadeia produtiva, caso possível, reduzindo custos com matérias primas, e a destinação ambientalmente adequada (TOWLER; SINNOTT, 2013).

O segundo maior componente do custo total de produção é o custo de energia, sendo necessário um design energético eficiente. A demanda energética de uma planta geralmente é determinada pelo trabalho requerido por equipamentos como bombas, compressores, refrigeradores, pequenos instrumentos e iluminação. Os custos de energia podem ser reduzidos ao melhorar a eficiência energética do processo. Na maioria das vezes é possível aproveitar a energia gerada no próprio processo, de modo a reduzir os custos de contratação de energia pela companhia elétrica local. A maneira mais simples de fazer isto é utilizar uma turbina de cogeração a vapor para recuperação do calor gerado no processo. A produção de óxido de etileno, por ser muito exotérmica, é uma fonte abundante de energia para recuperação. O custo de energia elétrica estimado para este projeto foi de US\$ 0,06/kWh (TOWLER; SINNOTT, 2013).

Outros fatores a serem considerados em um gerenciamento econômico de uma planta são os custos com utilidades. Dentre os principais, é possível destacar o custo com fluidos de processo para aquecimento (vapor e óleos para transferência de calor à quente), fluidos de processo para resfriamento (água de refrigeração, fluidos refrigerantes), água de processo (água deionizada e água para uso geral), e, por fim, gases como ar comprimido e gases inertes, geralmente nitrogênio. Os custos de água de refrigeração, vapor de pressão média e vapor de alta pressão estimados para este projeto foram, respectivamente, de US\$ 0,1/1000 galões, US\$ 10,07/t e US\$ 12,65/t. (TOWLER; SINNOTT, 2013).

Para que a planta se mantenha operacional é necessária uma equipe de trabalhadores qualificados atuando constantemente. Tal equipe gera um custo do tipo fixo, com salários e treinamentos de segurança. O custo de salário anual estimado para este projeto é de US\$ 70.000/ano (U.S. BUREAU OF LABOR STATISTICS, 2022). A maioria das plantas mantém uma equipe atuando constantemente na planta, mesmo em plantas de processos em batelada. Geralmente a operação das plantas é dividida por postos de operação. Devido ao fato de não haver necessidade de armazenamento compostos, uma vez que os compostos envolvidos na produção do óxido de etileno estão no estado gasoso, e do processo ocorrer de maneira contínua e automatizada, considera-se que a planta opera com uma média de 4,8 operadores por posto (TOWLER; SINNOTT, 2013). A divisão da equipe é feita de modo que sempre haja um operador na sala de controle, um operador no setor de tanques de armazenamento de óleo ou gás, e outro operador na área de envio/recebimento de material/produtos. Plantas que possuam mais equipamentos mecânicos, ou que manuseiam compostos altamente tóxicos, geralmente necessitam de mais postos de operação. Para a planta deste projeto, foram determinados 3 postos de operação (TOWLER; SINNOTT, 2013).

O custo de uma planta pode ser calculado a partir do custo de equipamentos individuais utilizados no processo com auxílio da Tabela 7.2 do livro *Chemical Engineering Design* (SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013). Os parâmetros são relacionados de forma resumida na Figura 7.

Equipment	Units for Size, S	Stower	Supper	a	ь	n	N
Agitators & mixers							
Propeller	driver power, kW	5.0	75	17,000	1,130	1.05	
Spiral ribbon mixer	driver power, kW	5.0	35	30,800	125	2.0	
Static mixer	liters/s	1.0	50	570	1,170	0.4	
Boilers							
Packaged, 15 to 40 bar	kg/h steam	5,000	200,000	124,000	10.0	1.0	
Field erected, 10 to 70 bar	kg/h steam	20,000	800,000	130,000	53	0.9	
Centrifuge s							
High speed disk	diameter, m	0.26	0.49	57,000	480,000	0.7	
Atmospheric suspended basket	power, kW	2.0	20	65,000	750	1.5	
Compressors							
Blower	m ³ /n	200	5,000	4,450	57	0.8	
Centrifugal	driver power, kW	75	30,000	580,000	20,000	0.6	
Reciprocating	driver power, kW	93	16,800	260,000	2,700	0.75	
Conveyors							
Belt, 0.5 m wide	length, m	10	500	41,000	730	1.0	
Belt, 1.0 m wide	length, m	10	500	46,000	1,320	1.0	
Bucket elevator, 0.5m bucket	height, m	10	30	17,000	2,600	1.0	
Crushers							
Reversible hammer mill	t/h	30	400	68,400	730	1.0	
Pulverizers	kg/h	200	4,000	16,000	670	0.5	
Jaw crusher	t/h	100	600	-8,000	62,000	0.5	
Gyratory crusher	t/h	200	3,000	5,000	5,100	0.7	
Ball mill	t/h	0.7	60	-23,000	242,000	0.4	
Crystallizers							
Scraped surface crystallizer	length, m	7	280	10,000	13,200	0.8	
Distillation columns							
See pressure vessels, packing							

Equipment	Units for Size, S	Slower	Supper	a	b	n	Note
Dryers							
Direct contact Rotary	m ²	11	180	15,000	10,500	0.9	1
Atmospheric tray batch	area, m ²	3.0	20	10,000	7,900	0.5	
Spray dryer	evap rate kg/h	400	4,000	410,000	2,200	0.7	
Evaporators							
Vertical tube	area, m ²	11	640	330	36,000	0.55	
Agitated falling film	area, m ²	0.5	12	88,000	65,500	0.75	2
Exchangers							
U-tube shell and tube	area, m ²	10	1,000	28,000	54	1.2	
Floating head shell and tube	area, m ²	10	1,000	32,000	70	1.2	
Double pipe	area, m ²	1.0	80	1,900	2,500	1.0	
Thermosiphon reboiler	area, m ²	10	500	30,400	122	1.1	
U-tube Kettle reboiler	area, m ²	10	500	29,000	400	0.9	
Plate and frame	area, m ²	1.0	500	1,600	210	0.95	2
Filters							
Plate and frame	capacity, m3	0.4	1.4	128,000	89,000	0.5	
Vacuum drum	area, m ²	10	180	-73,000	93,000	0.3	
Furnaces							
Cylindrical	duty, MW	0.2	60	80,000	109,000	0.8	
Box	duty, MW	30	120	43,000	111,000	0.8	
Packings							
304 ss Raschig rings	m ³			0	8,000	1.0	
Ceramic intalox saddles	m ³			0	2,000	1.0	
304 ss Pall rings	m ³			0	8,500	1.0	
PVC structured packing	m ³			0	5,500	1.0	
304 ss structured packing	m ³			0	7,600	1.0	3
Pressure vessels							
Vertical, cs	shell mass, kg	160	250,000	11,600	34	0.85	4
Horizontal, cs	shell mass, kg	160	50,000	10,200	31	0.85	4

Equipment	Units for Size, S	Stower	Suppor	a	b	n	Note
Vertical, 304 ss	shell mass, kg	120	250,000	17,400	79	0.85	4
Horizontal, 304 ss	shell mass, kg	120	50,000	12,800	73	0.85	4
Pumps and drivers							
Single stage centrifugal	flow, liters/s	0.2	126	8,000	240	0.9	
Explosion proof motor	power, kW	1.0	2,500	-1,100	2,100	0.6	
Condensing steam turbine	power, kW	100	20,000	-14,000	1,900	0.75	
Reactors							
Jacketed, agitated	volume, m ³	0.5	100	61,500	32,500	0.8	2
Jacketed, agitated, glass lined	volume, m ³	0.5	25	12,800	88,200	0.4	
Tanks							
floating roof	capacity, m3	100	10,000	113,000	3,250	0.65	
cone roof	capacity, m3	10	4,000	5,800	1,600	0.7	
Trays							
Sieve trays	diameter, m	0.5	5.0	130	440	1.8	5
Valve trays	diameter, m	0.5	5.0	210	400	1.9	
Bubble cap trays	diameter, m	0.5	5.0	340	640	1.9	
Utilities							
Cooling tower & pumps	flow, liters/s	100	10,000	170,000	1,500	0.9	6
Packaged mechanical refrigerator							
evaporator	duty, kW	50	1,500	24,000	3,500	0.9	
Water ion exchange plant	flow m ³ /h	1	50	14,000	6,200	0.75	

Figura 7. Dados de Custo: (a) agitadores – vasos; (b) secadores – vasos de pressão; (c) vasos de pressão – utilidades. Fonte: SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013.

Logo, faz-se

$$C_e = a + b \cdot S^n \tag{1}$$

(1)

onde C_e é o custo estimado (U.S. Gulf Coast Basis); a e b são constantes de custo presentes na Figura 7; S é o parâmetro de tamanho (m²); e n é o expoente para o tipo de equipamento.

Será considerado também o custo de instalação do equipamento, retirado da Tabela 7.4 do livro *Chemical Engineering Design* (SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013), relacionados na Figura 8.

Table 7.4 Installation Factors Proposed by Hand (1958)					
Equipment Type Installation Factor					
Compressors	2.5				
Distillation columns	4				
Fired heaters	2				
Heat exchangers	3.5				
Instruments	4				
Miscellaneous equipment	2.5				
Pressure vessels	4				
Pumps	4				

Figura 8. Dados de fator de instalação. Fonte: SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013.

Por fim, calcula-se o custo,

$$C = L \cdot C_e \tag{2}$$

onde C é o custo (U.S. Gulf Coast Basis) e L é o fator de instalação dado na Figura 8.

3.3. Impacto Ambiental

No que se refere ao impacto ambiental gerado pela planta o ponto de maior preocupação, deve ser a emissão dos efluentes gasosos. As principais substâncias geradas pelo processo são dióxido de carbono (CO₂) e metano (CH₄). Ambas são gases de efeito estufa, portanto devem ser propostas tecnologias para atenuar a emissão de carbono. Outra alternativa viável que tem se difundido é a política do carbono neutro (ou zero) que existe para compensar as emissões feitas.

3.4. Diagrama PFD

A simulação no *software* Aspen HYSYS ® e o diagrama de fluxo de processo são apresentados a seguir.



Figura 9. Simulação no software Aspen HYSYS ®.



4. PROJETO DA PLANTA

A seguir, as correntes do processo serão apresentadas junto com o projeto e cálculo dos custos.

4.1. Correntes de processo

Inicialmente, as correntes 1 e 2, correspondentes à alimentação de etileno e oxigênio, respectivamente, se misturam ao reciclo do processo proveniente da corrente 15 na forma da corrente 3. Essa corrente é pré-aquecida até as condições da corrente 4 e levada ao reator, que retorna a corrente 5, conduzida ao resfriamento representado pela corrente 6 e posteriormente ao processo de separação.

O processo de separação da corrente 6 envolve a passagem por uma coluna de absorção que produz uma corrente gasosa 8 e uma corrente líquida 7. A coluna é alimentada por um solvente na corrente 13. O vapor é expedido ao tratamento de desacidificação e o líquido é enviado à coluna de destilação, que produz uma corrente de vapor 12 e duas correntes líquidas: 21 e 22.

A corrente de vapor 12 da coluna de destilação é resfriada até o ponto de saturação da corrente 16, enviada para a condensação em um vaso-pulmão que produz o destilado da corrente 17. Parte dele (corrente 18) é devolvido a coluna na forma de refluxo com auxílio de uma bomba nas condições da corrente 19. Uma válvula de controle também é inserida e o refluxo é efetivamente a corrente 20.

A corrente líquida 20 é vaporizada e devolvida à coluna. A corrente 22 é resfriada e sai do processo como água de processo residual.

O vapor recuperado pela coluna de absorção é despachado para um processo de purga de dióxido de carbono na forma da corrente 11. O gás residual é rico em reatantes da corrente 14 é pressurizado por um compressor como corrente 15 e enviado como reciclo do processo ao início da cadeia produtiva.

4.2. Bombas

O sistema apresenta uma bomba, denominada P-701, responsável por impulsionar a corrente de refluxo 18 de volta ao topo da torre de destilação com a corrente 20.

A corrente de fluido de interesse, com vazão volumétrica (\dot{V}) e densidade (ρ), é admitida na bomba à uma pressão P_{ad} :

$$P_{ad} = P_1 + \rho g(\phi D_v + H_{bt}) \tag{3}$$

tal que P_1 é a pressão no vaso-pulmão; D_v é o diâmetro do vaso-pulmão; ϕ é a fração de volume preenchido do vaso-pulmão, comumente fixada como 0,5; e H_{bt} , a altura da base da torre de destilação, considerada igual a 3,0 m. A propriedade g é a aceleração da gravidade, com valor 9,81 m/s². (TOWLER; SINNOTT, 2013)

As bombas de refluxo costumam ser instaladas em níveis abaixo da própria torre para que a pressão hidrostática extra aumente o NPSH disponível do sistema e reduza as chances de cavitação da bomba. (TOWLER; SINNOTT, 2013)

A corrente é descarregada da bomba com uma pressão de impulsão:

$$P_{imp} = \rho g (H_t + H_{bt}) + P_{\nu c} + P_2$$
(4)

em que P_2 é a pressão no topo da coluna de destilação; H_t é a altura da torre de destilação; e P_{vc} é a queda de pressão gerada pela válvula de controle do dispositivo. (TOWLER; SINNOTT, 2013)

A diferença de pressão desenvolvida pela bomba pode então ser aferida como

$$\Delta P_p = P_{imp} - P_{ad} \tag{5}$$

A pressão de *shut-off* desenvolvida pela bomba à uma vazão zero é calculada, por sua vez, pela correlação

$$P_{so} = 1,2\Delta P_p \tag{6}$$

A potência consumida pela bomba é definida a partir da expressão

$$W_p = \frac{\dot{V}\Delta P_p}{\eta_h \eta_e} \tag{7}$$

27

 \sim

de maneira que η_h é a eficiência hidráulica, isto é, a quantidade de energia que é efetivamente transferida do rotor ao fluido com o intuito de aumentar sua pressão; e η_e é a eficiência elétrica, a quantidade de energia que é de fato transferida do motor ao rotor com o propósito de girá-lo. Os valores usados nesta análise são de 0,45 e 0,90, respectivamente. (TOWLER; SINNOTT, 2013)

Os resultados obtidos estão expressos na tabela abaixo.

Parâmetro característicos	Valor
Pressão na admissão (bar)	5,2
Pressão na impulsão (bar)	6,3
Diferença de pressão (bar)	1,1
Pressão de <i>shut-off</i> (bar)	1,3
Vazão volumétrica (m ³ /h)	26,92
Potência consumida pela bomba (kW)	2,0

 Tabela 4. Parâmetros característicos da bomba P-701.

4.3. Compressores

A escolha de um compressor adequado para o bombeamento de gases em tubulações depende da vazão, do diferencial de pressão e da pressão de operação. De modo geral, os ventiladores são utilizados quando a queda de pressão é pequena, inferior a 0,03 bar (SINNOTT, Ray; TOWLER, 2019). Já o compressor de fluxo axial deve ser utilizado para altas vazões e pressões diferenciais moderadas. O compressor centrífugo deve ser utilizado quando se tem altas vazões e altas pressões diferenciais. Por fim, compressores alternativos ou de pistão podem ser usados em uma ampla faixa de pressões e capacidades, mas geralmente são utilizados como substitutos dos compressores centrífugos quando são necessárias altas pressões e vazões relativamente baixas. (SINNOTT, Ray; TOWLER, 2019).

Para a escolha do tipo de compressor utilizaram-se os parâmetros apresentados na Tabela 5, como a pressão de operação, a diferença de pressão entre a entrada e a saída do compressor e a vazão volumétrica, os quais foram obtidos em TURTON *et al.* (2018).

Parâmetros	Valores
Pressão de operação (bar)	23
ΔP (bar)	3
Potência (kW)	3.821
Vazão mássica (kg/h)	337.300
Vazão volumétrica (m ³ /h)	893,6

Tabela 5. Dados do compressor, simulação.

A memória de cálculo de estimação de custo do compressor e os valores de cada um dos parâmetros estão listados na seção 3.2. Para o projeto, foi escolhido um compressor do tipo recíproco. A Tabela 6 apresenta os resultados dos custos calculados do compressor juntamente com o acréscimo do fator de instalação escolhido.

Tabela 6. Custo do compressor.

Custos	Valores (US\$)
Custo do equipamento	1.572.189,45
Fator de instalação	2,5
Custo total	3.930.473,63

4.4. Trocadores de calor

A transferência de calor de fluidos de processo e para fluidos de processo é uma parte essencial da maioria dos processos químicos. Os equipamentos chamados trocadores de calor têm como objetivo proporcionar essa troca térmica entre duas correntes fluidas de forma indireta, ou seja, sem contato direto entre elas. O engenheiro deve ser o responsável por projetar ou prever o desempenho de um trocador existente operando sob determinadas condições a fim de atender a uma demanda térmica.

Os trocadores são caracteristicamente classificados de acordo com a configuração do escoamento e do tipo de construção. A construção mais simples de um trocador de calor é a de tubos concêntricos, no qual as correntes quente e fria podem escoar no mesmo sentido (arranjo concorrente) ou em sentidos opostos (arranjo contracorrente) pelo tubo interno e pelo espaço anular, trocando calor através da parece metálica do tubo interno.



Figura 10. Trocador de calor tubular. Fonte: INDUSTRY, 2022.

O projeto possui cinco trocadores de calor a serem projetados, sendo o primeiro (E-701) um *heater* alimentado de uma corrente majoritariamente composta de etileno, oxigênio, dióxido de carbono; o segundo (E-702) um *cooler* que recebe o fluido do reator e o resfria para encaminhar ao absorvedor; o terceiro (E-703), a caldeira, que ajusta as condições de corrente de fundo da torre de destilação; o quarto (E-704), o condensador associado a torre; e, por fim, o quinto (E-705) que resfria a corrente que sai da caldeira.

A equação geral para transferência de calor por uma superfície é dada por:

$$Q = U_m \cdot A \cdot \Delta T_m \tag{8}$$

onde Q é a quantidade de calor trocado (kcal/h); U_m , o coeficiente global de transmissão de calor (kcal/h m² °C); A, a área de troca térmica (m²); ΔT_m , a diferença de temperatura entre as correntes do trocador por Média Logarítmica das Diferenças de Temperatura (MLDT).

Para calcular a MLDT, faz-se,

$$\Delta T_{ml} = \frac{(\Delta T_2) - (\Delta T_1)}{\ln \frac{(\Delta T_2)}{(\Delta T_1)}}$$
(9)

Sendo,

$$\Delta T_1 = (t_1 - T_2)$$
$$\Delta T_2 = (t_2 - T_1)$$

onde t_1 é a temperatura se entrada do fluido de processo (°*C*); t_2 , a temperatura se saída do fluido de processo (°*C*); T_1 , a temperatura se entrada do fluido de auxiliar (°*C*); T_2 , a temperatura se saída do fluido auxiliar (°*C*).

Para obter a equação fundamental dos trocadores de calor, introduz-se na equação geral um fator de correção ou de eficiência (F_T), ($0 < F_T \le 1$). Logo,

$$Q = U_m \cdot A \cdot F_T \cdot \Delta T_{ml} \tag{10}$$

O fator de correção pode ser calculado pela equação a seguir.

$$F_T = \frac{\sqrt{(R^2 + 1)} \cdot \ln\left[\frac{(1 - S)}{(1 - R \cdot S)}\right]}{(R - 1) \cdot \ln\left[\frac{2 - S \cdot (R + 1 - \sqrt{(R^2 + 1)})}{2 - S \cdot (R + 1 + \sqrt{(R^2 + 1)})}\right]}$$
(11)

Sendo,

$$R = \frac{T_1 - T_2}{t_2 - t_1}$$
$$s = \frac{t_2 - t_1}{T_1 - t_1}$$

Já a quantidade de calor trocado (Q) foi obtida a partir da simulação do processo no Aspen HYSYS ®. E, os valores de coeficiente global de transmissão de calor (U_m) foram obtidos da Tabela 12.1 do livro *Chemical Engineering Design* (SINNOTT, Ray; TOWLER, 2019), relacionados de forma resumida na Figura 11.

Table 12.1 Typical overall coefficients		
Shell and tube exchangers		
Hot fluid	Cold fluid	$U (W/m^{2} \circ C)$
Heat exchangers		
Water	Water	800-1500
Organic solvents	Organic solvents	100-300
Light oils	Light oils	100-400
Heavy oils	Heavy oils	50-300
Gases	Gases	10-50
Coolers		
Organic solvents	Water	250-750
Light oils	Water	350-900
Heavy oils	Water	60-300
Gases	Water	20-300
Organic solvents	Brine	150-500
Water	Brine	600-1200
Gases	Brine	15-250
Heaters		
Steam	Water	1500-4000
Steam	Organic solvents	500-1000
Steam	Light oils	300-900
Steam	Heavy oils	60-450
Steam	Gases	30-300
Dowtherm	Heavy oils	50-300
Dowtherm	Gases	20-200
Flue gases	Steam	30-100
Flue	Hydrocarbon vapours	30-100
Condensers		
Aqueous vapours	Water	1000-1500
Organic vapours	Water	700-1000
Organics (some non-condensables)	Water	500-700
Vacuum condensers	Water	200-500
Vaporizers		
Steam	Aqueous solutions	1000-1500
Steam	Light organics	900-1200
Steam	Heavy organics	600-900

Figura 11. Dados de coeficiente global de transmissão de calor. Fonte: SINNOTT, Ray; TOWLER, 2019.

Os tubos considerados no dimensionamento dos trocadores são de diâmetro igual a 3/4'' = 0,01905m; e 20ft = 6,096m. Para calcular a área dos tubos,

$$A_{tubo} = 0,3648 \, m^2$$

Assim, para determinar o número de tubos,

$$N_{tubos} = \frac{A_{total}}{A_{tubo}} \tag{12}$$

4.4.1. Trocador E-701 (Heater)



Figura 12. Trocador de Calor E-701. Fonte: SINNOTT, Ray; TOWLER, 2019.

O primeiro trocador de calor é alimentado de uma mistura de etileno, oxigênio, metano, água e CO₂. No trocador, essa corrente é aquecida e enviada ao reator. O trocador utilizado foi do tipo casco tubo com cabeçote flutuante de material aço inox.

Os dados das correntes de entrada e saída dos fluidos de processo e auxiliares do trocador são representados na Tabela 7 e os dados de composição da corrente de entrada na Tabela 8.

Corrente	Corrente 3	Corrente 4	Entrada fluído	Saída fluido
			auxiliar	auxiliar
Temperatura (°C)	57,13	226,4	250	250
Pressão (bar)	22	22	_	_
Fração molar – vapor	1	1	1	1
Fluxo molar (kgmol/h)	16.330	16.330	_	_
Fluxo mássico (kg/h)	358.800	358.800	_	_

Tabela 7. Dados do Trocador de Calor E-701.

Composição da corrente	Valor (fração molar)
Etileno	0,2738
Oxigênio	0,0746
Metano	0,5957
H ₂ O	0,0042
CO ₂	0,0517

Tabela 8. Dados de composição da corrente de entrada do Trocador E-701.

Para estimar o custo do Trocador de Calor, utiliza-se do valor de coeficiente de transmissão de calor da Tabela 7 sendo a média dos valores correspondente ao *Heater* utilizando solventes orgânicos. Logo, $U_m = 750 \text{ W/m}^2 = 645 \text{ kcal/h m}^2 \text{ °C}.$

O fluido de arrefecimento é um vapor de alta pressão (*High Pressure Steam* – HPS) e este apresenta a mesma temperatura de entrada e saída, assim, o fator de correção (F_T) utilizado é igual a 1.

Com estes dados utiliza-se da equação (9) para calcular o ΔT_{ml} e, de posse desse valor, substitui-se na equação (10) encontrando a área do trocador e com a equação (12) encontra-se o número de tubos, os resultados encontram-se na Tabela 9.

Parâmetro característicos	Valor
Duty/Calor trocado (kcal/h)	3,00313×10 ⁷
ΔT_{ml} (°C)	80,57
F _t	1
Área de troca (m ²)	577,85
Número de tubos	1.584

Tabela 9. Resultados do cálculo do Trocador de Calor E-701.

Assim, é possível estimar o custo do trocador a partir dos dados da seção 3.2 do presente documento. Os dados de cada um dos parâmetros estão ilustrados na Tabela 10, bem como o resultado dos cálculos realizados.

Parâmetro característicos	Valor
Área de troca (m ²)	577,85
a	32.000
b	70
n	1,2
C_e (US\$)	176.302,37
Fator de instalação	3,5
Custo (US\$)	617.058,31

Tabela 10. Resultados do cálculo de custos do Trocador de Calor E-701.

4.4.2. Trocador E-702 (Cooler)



Figura 13. Trocador de Calor E-702. Fonte: SINNOTT, Ray; TOWLER, 2019.

O segundo trocador de calor recebe a corrente do reator composta de uma mistura de etileno, oxigênio, metano, água, CO_2 e óxido de etileno, a fim de resfriá-la utilizando água de refrigeração, entrando a 30 °C e saindo a 45 °C, e enviando ao absorvedor. O trocador utilizado foi do tipo casco tubo com cabeçote flutuante de material aço inox.

Os dados das correntes de entrada e saída dos fluidos de processo e auxiliares do trocador são representados na Tabela 11 e os dados de composição da corrente de entrada na Tabela 12.
Corrente	Corrente 5 vapor	Corrente 6	Entrada fluído auxiliar	Saída fluido auxiliar
Temperatura (°C)	224,6	68,50	30	45
Pressão (bar)	21,5	21,5	_	—
Fração molar – vapor	1	1	0	0
Fluxo molar (kgmol/h)	16.200	16.200	_	_
Fluxo mássico (kg/h)	358.800	358.800	_	_

Tabela 11. Dados do Trocador de Calor E-702.

Tabela 12. Dados de composição da corrente de entrada do Trocador E-702.

Composição da corrente	Valor (fração molar)
Etileno	0,2550
Oxigênio	0,0520
Metano	0,6005
H ₂ O	0,0144
CO ₂	0,0623
C ₂ Oxide	0,0158

Para estimar o custo do Trocador de Calor, utiliza-se do valor de coeficiente de transmissão de calor da Figura 11 sendo a média dos valores correspondente ao *Cooler* utilizando solventes orgânicos. Logo, $U_m = 500 \text{ W/m}^2 = 430 \text{ kcal/h m}^2 \text{ °C}.$

O fluido auxiliar é a água de refrigeração, logo, para calcular o fator de correção, F_T , utiliza-se dos dados da Tabela 11 e da equação (11).

O ΔT_{ml} é calculado com auxílio da equação (9) e, em seguida, utilizam-se os mesmos cálculos realizados para o Trocador E-701. O resultado é apresentado na Tabela 13.

 Tabela 13. Resultados do cálculo do Trocador de Calor E-702.

Parâmetro característicos	Valor
Duty/Calor trocado (kcal/h)	$2,782 \times 10^{7}$
ΔT_{ml} (°C)	91,61
F _t	0,95
Área de troca (m^2)	706,16
Número de tubos	1.936

Assim, é possível estimar o custo do trocador da mesma forma realizada no Trocador E-701.

Parâmetro característicos	Valor
Área de troca (m^2)	706,16
C_e (US\$)	215.561,63
Custo (US\$)	754.465,71

 Tabela 14. Resultados do cálculo de custos do Trocador de Calor E-702.

4.4.3. Caldeira E-703



Figura 14. Trocador de Calor E-703. Fonte: SINNOTT, Ray; TOWLER, 2019.

A caldeira é um equipamento projetado também como um trocador de calor, na qual a corrente de líquido que sai da base da coluna passa pelo trocador que, utilizando fluido de arrefecimento a 212 °C (MPS – *medium pressure steam*), ocorre mudança de fase líquida para gasosa. O equipamento utilizado será modelo de trocador de calor casco tubo de material aço inox.

O coeficiente de transmissão de calor da Figura 11 sendo a média dos valores correspondente ao *Vaporizer* utilizando solventes orgânicos, logo, $U_m = 1050 \text{ W/m}^2 = 903 \text{ kcal/h m}^2 \,^\circ\text{C}$. O fluido de arrefecimento é um vapor de alta pressão (MPS) e este apresenta a mesma temperatura de entrada e saída, assim, o fator de correção, F_T , utilizado é igual a 1.

Como a temperatura da corrente de entrada e saída da caldeira são iguais, o ΔT é calculado sendo $\Delta T = 212 - T_{To \ reboiler}$. Assim, com estes dados é possível calcular a área com a equação (10) e o número de tubos com a equação (12).

De posse do valor da área, é possível calcular o custo estimado e o custo com base na seção 3.2 do presente documento. Os resultados com base na coluna com 6, 8, 10 e 12 pratos são apresentados na Tabela 15 e os dados de composição da corrente de Tabela 16.

Número de pratos	6	8	10	12
Duty/Calor trocado (kcal/h)	$1,46 \times 10^{7}$	$1,21 \times 10^{7}$	$1,19 \times 10^{7}$	$1,16 \times 10^{7}$
ΔT (°C)	56,61	56,59	56,59	59,25
Área de troca (m ²)	285,41	236,40	233,26	216,62
C_e (US\$)	75.748,86	66.085,63	65.481,10	62.295,93
Custo (US\$)	265.121,02	231.299,71	229.183,85	218.035,75

Tabela 15. Resultados da Caldeira.

Tabela 16. Dados de composição da corrente de entrada da Caldeira.

Composição da corrente "To Reboiler"	Valor (fração molar)
Etileno	0,0000
Oxigênio	0,0000
Metano	0,0000
H ₂ O	1,0000
CO_2	0,0000
C ₂ Oxide	0,0000

Ademais, é necessário calcular o custo do fluido de arrefecimento, o vapor de alta pressão utilizado. O custo deste é estimado pelo cálculo do balanço de energia, sendo,

$$\dot{m} = \frac{Q}{\lambda} \tag{13}$$

onde \dot{m} é a vazão mássica (kg/h); Q, a quantidade de calor trocado (kcal/h); λ , o calor latente de vaporização (kcal/kg).

Estimando o calor latente pela equação de Regnault, com t sendo a temperatura do MPS,

$$\lambda = 605, 5 - 0,695t \tag{14}$$

Considerando um custo do MPS de US\$ 10,07 por tonelada e um fator de operação de 8.000 horas por ano. Logo, tem-se representado na Tabela 17 o custo estimado.

Tabela 17. Resultados do custo operativo do MPS.

Número de pratos	6	8	10	12
Custo total ano (US\$)	2.560.844,32	2.120.287,83	2.092.204,55	2.034.282,78

4.4.4. Condensador E-704



Figura 15. Trocador de Calor E-704.

No condensador, a corrente de vapor procedente do topo da coluna será condensada antes de destinar-se ao vaso pulmão, onde parte da corrente será refluxada para a coluna, enquanto a outra será o produto de topo. Nesse trocador de calor, água de refrigeração é utilizada como fluido frio, entrando a 30 °C e saindo a 45 °C e, o fluido de interesse (fluido quente) é a corrente rica em óxido de etileno. O equipamento utilizado será modelo de trocador de calor casco tubo de material aço inox.

O coeficiente de transmissão de calor da Figura 11 é dado pela média dos valores correspondente ao *Condenser* utilizando orgânicos leves. Logo, $U_m = 850 \text{ W/m}^2 = 731 \text{ kcal/h m}^2 \,^{\circ}\text{C}.$

A variação de temperatura na entrada e na saída do Condensador apresentou uma pequena variação, assim o valor da temperatura utilizado será a média entre eles, sendo entrada igual a saída, assim, o fator de correção, F_T , utilizado é igual a 1.

Calculada a área, estima-se os custos da mesma forma que a Caldeira. Os resultados para a coluna com 6, 8, 10 e 12 pratos são apresentados na tabela e os dados de composição da corrente de entrada na Tabela 18.

Número de pratos	6	8	10	12
Duty/Calor trocado (kcal/h)	$4,19 \times 10^{6}$	$1,68 \times 10^{6}$	$1,52 \times 10^{6}$	$1,52 \times 10^{6}$
ΔT_{ml} (°C)	19,82	19,82	19,82	19,83
Área de troca (m ²)	289,45	115,78	105,17	104,68
C_e (US\$)	94.948,89	52.963,59	50.679,33	50.575,35
Custo (US\$)	332.321,13	185.372,57	177.377,65	177.013,73

Tabela 18. Resultados do Condensador.

Tabela 19. Dados de composição da corrente de entrada do Condensador.

Composição da corrente "To Condenser"	Valor (fração molar)
Etileno	0,0000
Oxigênio	0,0000
Metano	0,0000
H ₂ O	0,0043
CO_2	0,0000
C ₂ Oxide	0,9957

Ademais, como na caldeira, é necessário calcular o custo da água de refrigeração utilizada. Da mesma forma, o custo é estimado pelo cálculo do balanço de energia, sendo,

$$\dot{m} = \frac{Q}{c_n \cdot \Delta T} \tag{15}$$

onde c_p é o calor específico da água (kcal/kg); ΔT , a variação de temperatura (°C).

Considerando um custo da água de US\$ 0,1 por 1000 galões e um fator de operação de 8.000 horas por ano. Logo, tem-se representado na Tabela 20 o custo estimado.

Tabela 20. Resultados do custo operativo da água de refrigeração.

Número de pratos	6	8	10	12
Custo total ano (US\$)	59.094,64	23.638,11	21.471,34	21.383,00

4.4.5. Trocador de Calor E-705 (Cooler)



Figura 16. Trocador de Calor E-705.

O quinto trocador de calor recebe a corrente da caldeira composta de vapor de água, a fim de resfriá-la utilizando água de refrigeração, entrando a 30 °C e saindo a 45 °C, gerando *wasted water* a 50 °C. O trocador utilizado será do tipo casco tubo com cabeçote flutuante de material aço inox.

Os dados das correntes de entrada e saída dos fluidos de processo e auxiliares do trocador são representados na Tabela 21.

Corrente	Corrente 9	Corrente wasted water	Entrada fluído auxiliar	Saída fluido auxiliar
Temperatura (°C)	155,2	50	30	45
Pressão (bar)	5,5	_	_	_
Fração molar - vapor	1	0	0	0
Fluxo molar (<i>kgmol/h</i>)	7157	_	_	_
Fluxo mássico (kg/h)	128.900	_	_	_

Tabela 21. Dados do Trocador de Calor E-705.

Para estimar o custo do Trocador de Calor, utiliza-se do valor de coeficiente de transmissão de calor da Figura 11 sendo a média dos valores correspondente ao *Heat* exganger utilizando água, logo, $U_m = 1150 \text{ W/m}^2 = 989 \text{ kcal/h m}^2 \text{ °C}.$

Para o cálculo do F_T e do ΔT_{ml} faz-se análogo ao Trocador E-702. O resultado é apresentado na Tabela 22.

Parâmetro característicos	Valor
Duty/Calor trocado (<i>kcal/h</i>)	$1,34 \times 10^{7}$
ΔT_{ml} (°C)	52,92
F _t	0,88
Área de troca (m^2)	256,81
Número de tubos	704

Tabela 22. Resultados do cálculo do Trocador de Calor E-705.

Assim, é possível estimar o custo do trocador da mesma forma realizada no Trocador E-702.

Parâmetro característicos	Valor
Área de troca (m ²)	256,81
а	32.000
b	70
n	1,2
C_e (US\$)	86.537,59
Fator de instalação	3,5
Custo (US\$)	302.857,07

Tabela 23. Resultados do cálculo de custos do Trocador de Calor E-705.

4.5. Reator

O uso de reatores do tipo PFR (tubular) tem ganhado cada vez mais espaço no cenário industrial. Um dos motivos para isso está na mistura estática que auxilia no aumento do tempo de retenção, além de produzirem reações com uma elevada conversão. Pelo fato de não possuírem dispositivos de mistura móveis, os custos para manutenção são reduzidos drasticamente. Dentre as desvantagens que devem ser levadas em questão estão a formação de gradientes de temperatura, a queda de pressão e o elevado custo de produção.



Figura 17. Exemplo de reator PFR. Fonte: NOGUERA, 2020.

Para o projeto do reator, partiu-se das condições físicas de operação do reator. A queda de pressão ΔP não deverá ser maior doque 0,5 bar. O volume total simulado para o reator é de 96,37 m³. O comprimento dos tubos inicialmente selecionado foi de 8 m. Desta forma, informando o grau de empacotamento dos tubos, o simulador é capaz de calcular a queda de pressão através da equação de Ergun.

Tabela 24. Empacotamento dos tubos – 1^a simulação.

Dados	Valores
Volume total dos tubos (m ³)	96,37
Fração vazia (grau de empacotamento)	0,4
Volume vazio (m ³)	38,55
Comprimento dos tubos (m)	8
Perda de carga (bar)	1,06

É possível observar que a perda de carga resultante para tubos com 8 m de comprimento foi maior doque o 0,5 bar limitados pela bibliografia. Neste caso, deve-se alterar o comprimento dos tubos de modo a respeitar este limite. Com isto, escolhe-se um comprimento para os tubos de 20 ft, (6,096 m), e simula-se novamente o reator.

Como as conversões dependem somente do volume do reator, mantém-se o volume do reator constante em 96,37 m³. Desta forma, é possível avaliar diferentes dimensões do reator sem que haja alterações no processo. A Tabela 25 contém os dados obtidos com a nova simulação.

Dados	Valores
Volume total dos tubos (m ³)	96,37
Fração vazia (grau de empacotamento)	0,4
Volume vazio (m ³)	38,55
Comprimento dos tubos (m)	6,096
Perda de carga (bar)	0,465

Tabela 25. Empacotamento dos tubos – 2^a simulação.

Agora, com o limite de perda de carga respeitado, é possível dar prosseguimento ao projeto do reator.

Em seguida, com o número de tubos fornecido pelo simulador, calcula-se a área superficial dos tubos utilizando a expressão (16). A Tabela 26 contém os dados gerados pelo simulador. O diâmetro dos tubos inicialmente escolhido foi de 1,25 polegadas, (3,175 cm).

$$A = n\pi DL \tag{16}$$

onde *n* é o número de tubos; *D*, o diâmetro dos tubos; e *L*, o comprimento dos tubos.

Dados	Valores
Número de tubos	19.968
Diâmetro dos tubos (cm)	3,175
Comprimento dos tubos (m)	6,096
Área superficial dos tubos (m ²)	12.141,5

Tabela 26. Dados dos tubos.

Em seguida, é necessário calcular o coeficiente global de transferência de calor U mínimo requerido. Por se tratar de uma reação exotérmica o calor gerado pela reação deve

ser removido através da troca de calor. Para determinar U_{min} , utiliza-se a expressão (17), de forma que a Tabela 27 fornece os dados gerados pelo simulador:

$$U_{\rm mín} = \frac{Q}{A\Delta T} \tag{17}$$

onde Q é o calor liberado pela reação; A, a área superficial dos tubos; ΔT , a diferença de temperatura entre os fluidos.

Dados	Valores
Calor liberado pela reação (kcal/h)	32.946.611
Área superficial dos tubos (m ²)	12.141,5
Temperatura do fluido interno (°C)	226,4
Temperatura do fluido externo (°C)	212
U _{mín} (kcal/h m² °C)	188,4

Tabela 27. Dados de troca de calor.

Em seguida calculamos a velocidade superficial e o número de Reynolds através da expressão (18) e (19) respectivamente, com os dados gerados pelo simulador descritos na Tabela 28:

$$V = \frac{F}{A_c} = \frac{F}{n\frac{\pi D^2}{4}}$$
(18)

$$Re = \frac{\rho V D_p}{\mu} \tag{19}$$

onde *F* é a vazão volumétrica; A_c , a área da seção transversal; *n*, o número de tubos; *D*, o diâmetro do tubo; D_p , o diâmetro da partícula; *V*, a velocidade média do fluido; ρ , a massa específica do fluído; e μ , a viscosidade dinâmica do fluido.

Dados	Valores
Vazão volumétrica (m ³ /s)	8,5
Diâmetro dos tubos (cm)	3,175
Número de tubos	19.968
Velocidade superficial (m/s)	0,538
Diâmetro da partícula (cm)	0,75
Densidade do fluido de entrada (kg/m ³)	11,73
Viscosidade do fluido de entrada (cp)	0,018
Reynolds	2.567

Tabela 28. Dados do fluido do reator.

Calcula-se então o coeficiente global de transferência de calor disponível (U_{disp}) , por meio da expressão (20) (LUYBENT, 2001). É possível observar que o calor disponível é maior do que o calor requerido, logo, o projeto satisfaz a dissipação necessária da energia. Por fim, é possível calcular o custo do reator a partir das informações da seção 3.2.

$$U_{\rm disp} = 0,01545 + \frac{0,6885' \ 10^{-6}}{D_p} Re$$
⁽²⁰⁾

A tabela abaixo contém os resultados dos cálculos descritos acima.

Parâmetros	Valores
$U_{\rm disp}$ (W/m ² °C)	216
U _{mín} (kcal/h m ² °C)	188,4
C (US\$)	6.348.561

Tabela 29. Dados do fluido do reator.

Para a otimização do custo do reator, foi repetido todos os passos até então, para diâmetros típicos diferentes de tubos, sendo assim construída a Tabela 30 com todas as simulações feitas, e o resultado de projeto de reator mais barato, custando 6,024 milhões de dólares.

Diâmetro (cm)	Diâmetro (in)	$U_{disp} > U_{min}$	Custo (US\$)
3,175	1,25	SIM	6.348.561
2,54	1	SIM	7.177.373
1,905	0,75	SIM	8.407.742
3,81	1,5	NÃO	5.742.705
3,4925	1,375	SIM	6.024.459

Tabela 30. Otimização de custo em função do diâmetro dos tubos.

A Tabela 31 contém todos os dados do projeto do reator.

|--|

Parâmetro característicos	Valor
Comprimento do reator (m)	6,096
Diâmetro dos tubos (in)	1,375
Número de tubos	16.503
Diâmetro da partícula de catalisador (mm)	7,5
Pressão de projeto (bar)	24,5
Temperatura de projeto (°C)	226,4

4.6. Torres de separação

4.6.1. Torre de absorção

A torre de absorção é feita de aço inoxidável do tipo 304 e foi projetada baseada nos dados de queda de pressão e pressão de operação do simulador. A Tabela 32 contém os parâmetros característicos da torre.

Parâmetro	Valor
Δ <i>T</i> (°C)	43,5
ΔP (bar)	0,5
Pressão de operação (N/mm ²)	2,228
Recheio Selas Berl de aço 304 (polegadas)	2
Diâmetro (m)	3
Altura da torre (m)	14
Fator de empacotamento	26
Gradiente de queda de pressão (kPa/m)	1,1
Espessura da parede do vaso (mm)	41,61

Tabela 32. Parâmetros da torre de absorção.

Para o cálculo de estimativa de espessura do casco, utilizou-se a expressão abaixo:

$$w_t = \frac{1000P_{proj}D}{2P_{max}\varepsilon_{solda} - 1, 2P_{proj}} + w_c \tag{21}$$

onde P_{proj} é a pressão de projeto, D é o diâmetro da torre, P_{max} é a pressão máxima suportada, ε_{solda} é a eficiência de solda e w_c é a sobre espessura por corrosão. Tais parâmetros podem ser identificados na Tabela 33, juntamente com o resultado do cálculo de w_t .

Tabela 33. Parâmetros para estimativa da espessura do casco.

Parâmetro	Valor
Pressão de projeto (N/mm ²)	2,22
Pressão máx. suportada (N/mm ²)	103,42
Diâmetro (m)	3
Eficiência de solda	0,85
Sobre espessura (mm)	3
Espessura do casco (mm)	41,61

Para o cálculo da massa do casco do vaso utilizou-se a expressão (22). Onde D_T é o diâmetro do vaso mais a espessura do casco, L é a altura da torre, w_t é a espessura do casco, C_w coeficiente de complexidade. Os parâmetros podem ser encontrados na Tabela 34, juntamente com o resultado do cálculo da massa da carcaça da torre de absorção.

$$m = 24,47328C_w D_T (L + 0,8D_T) w_t \tag{22}$$

Parâmetro	Valor	_
C_w	1,15	
<i>L</i> (m)	14	
D_T (m)	3,041	
<i>w</i> _t (mm)	41,61	
<i>m</i> (kg)	58.538	

Tabela 34. Parâmetros para cálculo da massa da torre de absorção.

Para o cálculo do custo da torre de absorção foram seguidas as informações do tópico 3.2. Os parâmetros da expressão podem ser encontrados na Tabela 35, juntamente com o custo calculado. Tais parâmetros foram retirados do livro (SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013).

Tabela 35. Parâmetros para o cálculo do custo da torre de absorção.

Equipamento	a	b	n
Vasos de pressão de aço inoxidável 304	17.400	79	0,85
Custo da torre de absorção	US\$ 908.	546,91	

O custo do recheio pode ser calculado multiplicando o volume de recheio por 2000. Calcula-se o volume da torre através da expressão (23). A Tabela 36 traz os resultados dos cálculos do volume e custo do recheio.

$$V = \frac{L\pi D^2}{4} \tag{23}$$

Tabela 36. Cálculo do custo do recheio.

Parâmetro	Valor
<i>V</i> (m ³)	98,96
Custo do recheio	US\$ 197.920,33

Considerando um fator 4 para a instalação da torre, calcula-se o custo total da torre de absorção por meio da expressão (24). A Tabela 37 traz o resultado de todos os custos.

$$C_T = 4C_e + C_r \tag{24}$$

 $(\mathbf{0} \mathbf{1})$

Custos	Valores (US\$ 2010)
Custo da carcaça da torre	908.546,91
Fator de instalação	4
Custo recheio	197.920,33
Custo da torre instalada	3.634.187,64
Custo total	3.832.108

Tabela 37. Custos da torre de absorção.

4.6.2. Torre de destilação

A determinação do número de pratos a serem utilizados na coluna de destilação é feita a partir de um ótimo econômico observado dentre um conjunto de cenários distintos considerados. O processo de avaliação de custos da coluna para cada cenário considerado procura quantificar os custos associados ao equipamento utilizado, bem como à sua instalação, com base nas dimensões estimadas para ele. Tal processo, o qual consiste numa série de cálculos envolvendo o dimensionamento da coluna em função de propriedades físico-químicas das correntes presentes no sistema, tem como objetivo estimar o diâmetro da coluna – considerando-se a espessura das suas paredes – e a sua altura. Com isso, computa-se a massa associada ao material a ser utilizado em cada cenário, grandeza a qual permite a estimação, por meio do método presente e descrito no livro *Chemical Engeenering Design* (TOWLER; SINNOTT, 2013), dos custos a serem avaliados.

Inicialmente, estima-se a velocidade limite de operação da coluna, a qual trata-se da maior velocidade alcançada pela fase vapor presente no interior da coluna. Tal velocidade, denotada por v_{lim} , pode ser estimada, no caso em que o espaçamento entre os pratos da coluna é uniforme e igual a um valor entre 0,5 metros e 1,5 metro, por meio da seguinte equação (TOWLER; SINNOTT, 2013):

$$v_{lim} = (-0,171l^2 + 0,27l - 0,047) \sqrt{\frac{\rho_l - \rho_v}{\rho_v}}$$

em que *l* o espaçamento (uniforme) entre os pratos da coluna; ρ_v é a densidade da fase vapor no prato da coluna no qual ocorre a maior vazão volumétrica de vapor observada e ρ_l é a densidade da fase líquida no prato correspondente.

Tais valores de vazão e densidade foram obtidos por meio das estimações realizadas pela simulação em Aspen HYSYS \circledast . Considerando-se ainda o valor Q_v da maior vazão de vapor observada, juntamente com a velocidade limite de operação estimada previamente, calcula-se a área limite da seção transversal da coluna correspondente a esse cenário por meio da seguinte equação:

$$A_{lim} = \frac{Q_v}{v_{lim}}$$

Para uma coluna de geometria cilíndrica, sabe-se que a área *A* da sua seção transversal é circular, e, portanto, seu valor é dado pela expressão

$$A = \frac{\pi D^2}{4}$$

em que *D* trata-se do diâmetro correspondente à área da seção transversal da coluna. Resolvendo-se a equação acima para o diâmetro *D* no caso limite em que $A = A_{lim}$, obtém-se o diâmetro limite D_{lim} para a coluna de destilação considerada.

Por fim, com o objetivo de se garantir que a operação da coluna não ocorrerá em cenário limite, aplica-se um sobredimensionamento de 20% sobre o diâmetro limite, de maneira que o diâmetro D_p utilizado para o projeto e a avaliação de custos da coluna satisfaz

$$D_p = 1,2D_{lim}$$

O diâmetro D_p obtido trata-se do diâmetro interno da coluna, correspondente à área da sua seção transversal pela qual as fases envolvidas no processo de destilação são transportadas. Para a determinação da quantidade de material (em massa) a ser utilizado na confecção do equipamento, no entanto, faz-se necessária a estimação da espessura das suas paredes, a qual produz um diâmetro D_m correspondente à soma do diâmetro interno

da coluna com a espessura estimada. A expressão utilizada para a estimação da espessura, denotada *e*, pode ser obtida por meio da realização do balanço de forças devido à pressão nas paredes da coluna, resultando – no caso de um vaso cilíndrico – na seguinte equação (SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013):

$$e = \frac{PD_p}{2SE - 1, 2P} + e_s$$

em que *P* trata-se da pressão de operação do processo; *S* é a tensão máxima suportada pelo material; *E* é a eficiência da solda e e_s corresponde a uma sobre-espessura adicionada à espessura estimada com o objetivo de se considerar efeitos corrosivos. Aqui, consideraremos $e_s = 3$ mm. Os valores de tensão *S* em função do material a ser utilizado na confecção da torre podem ser obtidos na Tabela 13.2 em (SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013). Para o caso do aço inoxidável 304, tem-se que *S* = 15ksi. Já a eficiência da solda *E* é normalmente tomada como sendo igual a 85%. Uma vez estimada a espessura *e*, calcula-se o diâmetro D_m por meio da relação abaixo.

$$D_m = D_p + e$$

Em seguida, deve-se estimar a altura da coluna de destilação. Naturalmente, tal altura depende do número de pratos a serem utilizados na coluna; devido a isso, obter-seá uma altura para cada cenário considerado no contexto de otimização. A altura H_p da região da coluna na qual os pratos serão dispostos pode ser calculada somando-se os espaçamentos entre os pratos utilizados na coluna. Em todos os cenários considerados, toma-se que os pratos da coluna são uniformemente espaçados, de maneira que a altura H_p pode ser determinada pela expressão a seguir.

$$H_p = n_p l$$

em que n_p é o número de pratos (reais) da coluna no cenário considerado e l é o espaçamento (uniforme) entre os pratos. Adicionalmente, por questões operacionais, acrescenta-se espaçamentos iguais a 0,91 metros nas regiões dos pratos presentes no topo e no fundo da coluna, bem como do prato de alimentação. Tais espaçamentos adicionais, denotados por e_a , contribuem com 2,73 m para a altura total da coluna.

A altura da região do fundo da coluna de destilação depende do nível de líquido presente nessa região da coluna durante a sua operação. Uma vez que tal nível pode variar

ao longo da operação de destilação, é necessário se estimar o nível máximo alcançado pelo líquido no fundo da coluna; dessa forma, pode-se estabelecer uma altura para a coluna de forma a se levar em consideração tal situação limite. A determinação de tal nível máximo de líquido - denominado *High Liquid Level* (HLL) - depende da consideração feita para o nível mínimo de líquido - chamado *Low Liquid Level* (LLL) - e da estimação do nível normal de líquido - denominado *Normal Liquid Level* (NLL) -, conforme será descrito a seguir. Para valores de diâmetro D_m menores que 8 polegadas, convenciona-se que o nível mínimo de líquido é igual a 15 polegadas (SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013). O nível normal de líquido é atingido a partir do nível mínimo após decorrido um intervalo de tempo, denominado *holdup time* e convencionado como sendo igual a 5 minutos (MONNERY; SVRCEK, 1994), sob condições de vazão de saída constante sem interrupção da vazão de entrada. Dessa maneira, pode-se estimar a diferença entre os níveis mínimo e normal de líquido (*NLL – LLL*) a partir do volume acumulado no fundo da coluna durante o *holdup time* da seguinte maneira:

$$NLL - LLL = \frac{V_h}{A_p} = \frac{Q_f t_h}{A_p}$$

em que $V_h = Q_f t_h$ é o volume acumulado da corrente de fundo na coluna durante o holdup time – chamado de holdup volume –; Q_f é a vazão de tal corrente; t_h é o holdup time e A_p é a área da seção transversal interna (correspondente ao diâmetro D_p) da coluna.

De maneira semelhante, o intervalo tempo decorrido desde o estado de nível normal de líquido até o estado de nível máximo de líquido, sob condições de vazão de saída interrompida e vazão de entrada constante, é denominado *surge time* e é convencionado como sendo igual a 2 minutos (MONNERY; SVRCEK, 1994). Assim, é possível estimar a diferença entre os níveis normal e máximo de líquido (*HLL – NLL*) a partir do volume acumulado no fundo da coluna durante o *surge time* da seguinte maneira:

$$HLL - NLL = \frac{V_s}{A_p} = \frac{t_s}{Q_f A_p}$$

em que $V_s = Q_f t_s$ é o volume da corrente de fundo na coluna durante o *surge time* – chamado de *surge volume* – e t_s é o *surge time*.

Uma vez estimado o nível máximo de líquido no fundo da coluna, o qual determina a própria altura da região do fundo da coluna, estabelece-se que a altura de

total da coluna H_v é igual ao somatório das alturas do fundo, HLL; da seção na qual os pratos serão dispostos, H_p ; e dos espaçamentos adicionais considerados para os pratos de fundo, de alimentação e de topo, e_a ; de maneira que se expressa o seguinte:

$$H_v = HLL + H_p + e_a$$

Com base nas dimensões calculadas para a coluna, é possível se estimar seu peso e, com isso, sua massa, grandeza a qual é usada para se determinar os custos associados à aquisição e à instalação da coluna. O peso do vaso da coluna (desconsiderando os seus pratos) em função do seu diâmetro D_m ; da sua altura H_v e da sua espessura *e* é dado – em newtons, considerando que as demais grandezas são expressas em unidades do Sistema Internacional (SI) – pela seguinte expressão (SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013):

$$W = C_w \pi \rho_m D_m g (H_v + 0.8D_m) e$$

em que ρ_m trata-se da densidade do material do qual o vaso da coluna é confeccionado; *g* é aceleração da gravidade e C_w é um fator que procura contabilizar o peso referente a bocais, andaimes, suportes internos dentre outros elementos auxiliares presentes na torre. No caso em que o material do vaso é aço carbono, aproxima-se $\pi \rho_m g = 240$. Para vasos de colunas de destilação, os quais tipicamente possuem diversos elementos internos, o valor do fator C_w normalmente é tomado como sendo igual a 1,15 – em contraste com o valor de 1,08 usado no caso de vasos que possuem menos elementos auxiliares. Vale notar que a massa *M* do vaso de peso *W* é igual /a

$$M = \frac{W}{g} = C_w \pi \rho_m D_m (H_v + 0.8D_m)e$$

O custo C_v do vaso da coluna de destilação em função da sua massa M é estimado de acordo com a correlação da forma

$$C_v = a_v + b_v M^{n_v}$$

em que a_v , b_v e n_v são parâmetros de custo tabelados em (SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013). O custo C_v estimado por meio da correlação acima é dado com base no U.S. Gulf Coast referente a janeiro de 2010 (CEPCI = 532,9, NF índice de inflação de refinaria = 2281,6). Para o caso do aço inoxidável 304, os valores utilizados para os parâmetros mencionados são $a_v = 17400$, $b_v = 79$ e $n_v = 0,85$. De maneira semelhante, o custo de cada prato utilizado (custo unitário) C_t – na mesma base citada anteriormente – é estimado por meio da seguinte correlação:

$$C_t = a_t + b_t D_p^{n_t}$$

em que a_t , b_t e n_t são os parâmetros de custo, também tabelados em (SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013), referentes a pratos de colunas de destilação.

No caso de pratos valvulados, os valores utilizados para os parâmetros são $a_t = 210$, $b_t = 400$ e $n_t = 1,9$. Vale lembrar que, por C_t se tratar do custo unitário de cada prato, o custo total com pratos para a coluna de destilação é dado por $n_p \cdot C_t$. Dessa maneira, o custo total C_e de aquisição dos equipamentos utilizados na coluna de destilação é dado pela seguinte expressão:

$$C_e = C_v + n_p C_t$$

Além da aquisição dos equipamentos, faz-se necessária a sua instalação. O custo total do investimento na coluna incluindo sua instalação pode ser estimado em função do custo dos equipamentos C_e por meio da aplicação sobre ele de um fator de instalação F, de maneira que o custo total da planta considerada é dado por FC_e (SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013).

Com base no desenvolvimento acima, foram determinados os custos totais de diferentes cenários para a coluna de destilação. De acordo com (TURTON *et al.*, 2018), um possível cenário para a coluna de destilação utilizada na planta considerada no presente projeto é descrito pelos parâmetros relacionados na Tabela 38. No entanto, sabendo-se que o ponto de ebulição do óxido de etileno é igual a 10,7 °C e o da água é igual a aproximadamente 100 °C, espera-se que a separação da mistura de óxido de etileno com água na coluna de destilação seja possível com uso de menos estágios em relação ao número proposto em (TURTON *et al.*, 2018). Vale também notar que, devido à alta pureza especificada para o produto, igual a 99,5%, é descartada a avaliação do cenário de uma destilação flash, uma vez que, nesse caso, aumentar-se-iam os custos com as utilidades da coluna.

Parâmetro característicos	Valor
Diâmetro da torre (m)	4,0
Altura da torre (m)	30,0
Número de pratos	90
Espaçamento entre pratos (m)	0,3048
Prato de alimentação	18
Pressão de projeto (kPa)	628,46
Temperatura de projeto (°C)	155,4

Tabela 38. Parâmetros sugeridos para a coluna em (TURTON et al., 2018).

Realizou-se o processo de otimização econômica da coluna de destilação descrito anteriormente para os cenários de 6, 8, 10 e 12 pratos. Os custos de equipamentos bem como os custos totais (os quais incluem o custo de instalação) da torre estimados para cada cenário estão relacionados na Tabela 39.

Tabela 39. Custos do vaso da coluna (incluindo-se sua instalação) em função donúmero de pratos considerado.

Número de pratos	Custo (US\$)
6	1.428.362,34
8	1.353.121,04
10	1.444.181,18
12	852.396,78

4.7. Vaso pulmão

A unidade em questão tem como função acumular o líquido que sai do condensador (topo da coluna de destilação) e garantir que o refluxo tenha uma vazão constante. As condições de operação do vaso pulmão são definidas pela sua dimensão, onde temos a razão entre a largura L e o diâmetro D, e pelo tempo de retenção do líquido dentro da unidade. No caso estudado a razão L/D é igual a 4 (TURTON *et al.*, 2018).

Para calcular o volume do líquido que é retido no vaso pode-se aceitar um tempo de retenção de 12 minutos, considerando-se um *holdup time* de 3 minutos, surge time de 2 minutos e acréscimo de 5 e 2 minutos pelo refluxo e produto acumulados. A vazão volumétrica do condensado Q_{cond} foi obtida somando-se as vazões molares do refluxo e do destilado e multiplicando o valor obtido pela densidade molar da corrente do destilado.

Como o nível normal de operação é de 50%, o volume V dele deve ser duas vezes maior do que o volume de líquido, V_{liq} . Assim, o diâmetro do vaso pode ser encontrado com a equação (25).

$$D = \left(\frac{4V}{\pi L/D}\right)^{1/3} \tag{25}$$

A espessura *t* do pulmão é dada pela equação (26) (TOWLER; SINNOTT, 2013), em que o material é aço inoxidável, portanto, a tensão máxima *S* e eficiência de solda *E* são 88,94 N/mm² e 0,85 e a pressão de projeto P_i vale 0,57 N/mm².

$$t = \frac{P_i D}{2SE - 1, 2P_i} \tag{26}$$

O diâmetro interno médio do vaso D_{in} é calculado somando a espessura calculada anteriormente com *D*. Já os níveis máximo, normal e máximo de líquido, HLL, NLL e LLL, são obtidos considerando 80, 50 e 20% de D_{in} respectivamente.

O peso do pulmão W é obtido de acordo com a equação (27) (TOWLER; SINNOTT, 2013), em que o fator de complexidade C_w , para o recipiente pulmão, vale 1,08.

$$W = 240C_w D(L+0.8D)t$$
(27)

O custo de material para fabricação do pulmão e o imobilizado são calculados de acordo com a seção 3.2. A Figura 18 é uma representação do vaso pulmão da planta.



Figura 18. Esquema do vaso pulmão V-701.

A Tabela 40 apresenta os resultados encontrados para os quatro cenários testados.

Nº de pratos	6	8	10	12
Q_{cond} (m ³ /h)	40,37	16,15	14,67	14,60
<i>V</i> (m ³)	16,15	6,46	5,87	5,84
<i>D</i> (m)	1,73	1,27	1,23	1,23
<i>L</i> (m)	6,90	5,09	4,93	4,92
<i>t</i> (mm)	10,65	8,64	8,46	8,45
D_{in} (m)	1,74	1,28	1,24	1,24
HLL (m)	1,39	1,02	0,99	0,99
NLL (m)	0,87	0,64	0,62	0,62
LLL (m)	0,35	0,26	0,25	0,25
W (Kg)	3.618,13	1.611,40	1.482,12	1.476,65
C_e (US\$)	90.074,21	51.654,64	48.988,83	48.875,26
<i>I</i> (US\$)	360.296,83	206.618,55	195.955,31	195.501,03

Tabela 40. Otimização do vaso pulmão.

A Tabela 41 apresenta os parâmetros característicos do vaso C-701.

Parâmetro característicos	Valor
Comprimento do vaso (mm)	4920
Altura do vaso (mm)	1240
Espessura do vaso (mm)	8,45
Nível máximo de líquido (mm)	992
Nível normal de líquido (mm)	619
Nível mínimo de líquido (mm)	248
Pressão de projeto (bar)	5,7
Temperatura de projeto (°C)	155,4

Tabela 41. Parâmetros característicos do vaso C-701.

4.8. Listagem de indicadores da torre de destilação

Para que seja possível realizar o controle do processo, se faz necessário a presença de diversos sensores, indicadores e transmissores, ao longo da planta. Desta forma é possível medir, monitorar e controlar, quando necessário, variações nos parâmetros da planta. A Tabela 42 traz todos os instrumentos indicadores e transmissores, com suas

respectivas localizações de acordo com o diagrama P&ID da malha da torre de destilação, da seção 4.13.

INSTRUMENTOS DE VAZÃO		INSTRUMENTOS DE NÍVEL		
Identificação	Localização	Identificação	Localização	
FT-01	Malha da corrente 1	LT-08	Fundo da torre	
FT-11	Malha da corrente 11	LT-06	Vaso pulmão	
FI-09	Corrente 9	_	_	
FI-04	Corrente 4	_	_	
FT-07	Malha da corrente 7	_	_	
INSTRUMENTOS DE PRESSÃO		INSTRUMENTOS DE TEMPERATURA		
Identificação	Localização	Identificação	Localização	
PI-01	Corrente 1	TI-01	Corrente 1	
PI-11	Corrente 11	TI-02	Topo da torre	
PI-09	Corrente 9	TI-11	Corrente 11	
PI-10	Corrente 10	TI-10	Corrente 10	
PT-03	Malha da corrente 3	TI-03	Corrente 3	
PI-04	Corrente 4	TI-04	Corrente 4	
PI-07a	Corrente 7	TI-05	Vaso pulmão	
PI-07b	Corrente 7	_	-	

Tabela 42. Listagem de instrumentos.

4.9. Listagem de controladores

Da mesma forma que indicadores são necessários para mensurar e indicar os parâmetros da planta, os controladores são essenciais para de fato atuarem na planta, corrigindo as possíveis variações dos parâmetros a serem controlados. A Tabela 43 traz todos os dispositivos controladores existentes na malha da torre de destilação, e suas respectivas localizações de acordo com o diagrama P&ID, da seção 4.13.

Identificação	Localização
FIC-01	Malha da corrente 1
FCV-01	Corrente 1
FIC-11	Malha da corrente 11
FCV-11	Corrente 11
LIC-08	Malha da corrente 8
LCV-08	Corrente 8
PIC-03	Malha da corrente 3
LIC-06	Malha da corrente 6
LCV-06	Corrente 6
PCV-03	Corrente 3
FIC-07	Malha da corrente 7

 Tabela 43. Listagem de controladores.

4.10. Listagem de alarmes

Em uma planta industrial podem ocorrer problemas operacionais, por esse motivo, os alarmes são dispositivos de segurança implementados na planta como forma de indicar aos seus operadores alguma situação fora dos padrões. Normalmente os alarmes visam fomentar a adoção de ações corretivas por parte de operadores de painel com o objetivo de se retomar as condições padrões da planta. Tais dispositivos são capazes de detectar anomalias em variáveis de processo, como vazão, nível, pressão ou temperatura, casos nos quais eles emitem sinais sonoros e luminosos (CABRA DUEÑAS *et al.*, 2010).

Para o caso da planta de produção de óxido de etileno em questão, a qual envolve a operação de um reator e de uma coluna de destilação, por exemplo, é necessária implementação de diversos sistemas de alarmes para que a planta se torne segura.

A seguir, algumas situações de perigo possíveis e os alarmes associados utilizados serão descritos. É sabido que a perda de refluxo ou uma reação descontrolada, por exemplo, podem provocar um aumento da pressão na coluna de destilação. Devido a isso, adiciona-se alarmes de alta pressão e de pressão muito alta na coluna. Em relação a situações de perigo envolvendo nível, utiliza-se alarmes de baixo e de alto nível no vaso pulmão e na coluna de destilação. Uma situação de baixo nível, por exemplo, pode causar o desescorvado da bomba e a passagem de gás a um circuito líquido (CABRA DUEÑAS *et al.*, 2010). Já uma situação de alto nível pode causar o transbordamento do vaso e um consequente fluxo reverso da corrente de topo da coluna. Em relação à vazão, alarmes de

baixo nível são necessários para garantir quantidades adequadas de refluxo e da alimentação para a torre, de forma a prevenir danos à coluna. Um alarme de muito baixa vazão de refluxo se faz necessário uma vez que, na ausência de uma quantidade adequada de refluxo, pode ocorrer o aquecimento descontrolado da coluna devido à continua geração de vapor em seu *reboiler*. O último alarme adicionado diz respeito à alta vazão de vapor no *reboiler*, caso no qual, conforme mencionado anteriormente, ocorre o aquecimento indesejado da coluna.

A Tabela 44 lista os alarmes relacionados à coluna de destilação presentes na planta de produção do óxido de etileno.

Identificação	Localização (número do instrumento ou laço de controle com alarme)	Descrição
PAH	PIC-03	Alta pressão na coluna
PAHH	PIC-03	Pressão muito alta na coluna
LAL	LIC-08	Baixo nível no fundo da torre
LAH	LIC-08	Alto nível no fundo da torre
LAL	LIC-06	Baixo nível no vaso pulmão
LAH	LIC-06	Alto nível no vaso pulmão
FAL	FIC-01	Baixa vazão de alimentação da torre
FAL	FIC-07	Baixa vazão de refluxo da torre
FALL	FIC-07	Muito baixa vazão de refluxo da torre
FAH	FIC-11	Alta vazão de vapor no reboiler

4.11. Listagem de intertravamentos

Em conjunto com alarmes, em algumas situações faz-se necessária a utilização dos chamados intertravamentos. Intertravamentos tratam-se de sistemas de controle que realizam alguma ação corretiva na planta de maneira automática, dispensando ações humanas por parte dos operadores de painel (CABRA DUEÑAS *et al.*, 2010). Sua utilização e implementação têm como objetivo impedir a evolução de situações indesejadas e que poderiam oferecer risco à integridade dos equipamentos utilizados na planta e à segurança dos seus operadores.

Em situações de alto perigo, como a falha de refluxo na torre de destilação ou uma pressão muito alta na torre, o sistema de intertravamento é acionado e o aporte de vapor

na caldeira é interrompido de forma automática. A válvula de segurança associada a esse aporte de vapor na presente planta possui identificação FCV-12.

Identificação	Localização (número do instrumento ou laço de controle com intertravamento)	Ação sobre
PSHH	PIC-03	SE-01: Válvula de aporte vapor da torre (FCV-11)
FSLL	FIC-07	SE-01: Válvula de aporte vapor da torre (FCV-11)

 Tabela 45. Listagem de intertravamentos.

4.12. Listagem de válvulas de segurança

As válvulas de segurança PSV (do inglês, *pressure safety valve*) tratam-se do nível mais básico de segurança e são adicionadas na planta com o objetivo de proteger o equipamento ao qual elas estão associadas (CABRA DUEÑAS *et al.*, 2010). Em sistemas que lidam com vapores e gases, por exemplo, um aumento de temperatura indesejado pode provocar um aumento de pressão concomitante.

Na presente planta, a qual depende fundamentalmente da operação unitária de destilação, faz-se necessária a implementação de PSVs nos vasos os quais contêm fluidos passíveis de vaporização. Por esse motivo, foram adicionadas duas válvulas de segurança, uma delas na coluna de destilação e outra no vaso pulmão, uma vez que tais equipamentos apresentam maiores riscos à segurança em casos de problemas operacionais, como os sugeridos previamente.

No caso da coluna de destilação, um aumento de pressão pode ocorrer devido à geração excessiva de vapor em seu *reboiler*. Alternativamente, em caso de fogo externo, é possível que a pressão no interior dos vasos, ambos o da coluna e seu vaso pulmão, aumente por decorrência do aumento da temperatura em seus interiores e supere as respectivas pressões de projeto de cada vaso (CABRA DUEÑAS *et al.*, 2010). Nesses casos há o risco de explosão dos vasos, assim, a válvula de segurança atua redirecionando o fluido do interior desses equipamentos para a atmosfera ou para a tocha. Vale notar que, em situações que o fluido a ser redirecionado é tóxico, evita-se utilizar a via de desvio para a atmosfera.

Tabela 46.	Listagem	das	válvulas	de	segura	nça.
------------	----------	-----	----------	----	--------	------

Identificação	Localização (número do vaso)
PSV-01	T-702
PSV-02	V-701

4.13. Diagrama mecânico de processo

O diagrama P&ID da planta é apresentado a seguir.



Equipamento Descrição	T-702 Purificação óxido de etileno	Equipamento Descrição	V-701 Pulmão da T-702	Equipamento Descrição	E-703 Trocador de	calor	E-704 Trocador	de calor	Equipamento Descrição	P-701
P topo (bar)	4,9	P (bar)	5,7	Tipo	Casco-tubo		Casco-tubo)	Vazão	26,92
P fundo (bar)	5,5	T (°C)	155,4	P entrada / P saída (bar)	5,5	5,5	4,9	4,9	P impulsão (bar)	5,2
T topo (°C)	58,4	Diâmetro (m)	1,23	T entrada / T saida (°C)	150,3	155,2	58,4	58,2	P propulsão (bar)	6,3
T fundo (°C)	150,3	Comprimento (m)	4,92							
Altura (m)	12,8	-								
Número de pratos	12									

4.14. Avaliação econômica do processo

A partir das estimações de custos realizadas para o projeto, conclui-se que o cenário com menor custo (e, portanto, considerado um ótimo econômico) é o correspondente à coluna com 12 pratos. Os custos estimados para cada componente relacionado à coluna, bem como para cada utilidade associada, encontram-se listados na Tabela 47, enquanto os parâmetros da coluna estimados para esse cenário ótimo estão listados na Tabela 48.

Conário	1	2	3	Δ
	1	4	5	4
Numero de pratos	6	8	10	12
	Custos	de equipamentos	5 ¹ (US\$)	
Torre (T-702)	1.428.362,34	1.353.121,04	1.444.181,18	852.396,78
Vaso pulmão (V-701)	360.296,83	206.618,55	195.955,31	195.501,03
Condensador (E-704)	332.321,13	185.372,57	177.377,65	177.013,73
Caldeira (E- 703)	265.121,02	231.299,71	229.183,85	218.035,75
Bomba (P-701)	35.805,62	36.551,68	36.923,98	39.511,99
	Cu	ustos com utilida	des	
Vapor de aquecimento	2.560.844,32	2.120.287,83	2.092.204,55	2.034.282,78
Água de refrigeração	59.094,64	23.638,11	21.471,34	21.383,00
Eletricidade (Bomba)	467,29	553,63	598,88	951,36
Total	5.042.313,19	4.157.443,11	4.197.896,73	3.539.076,41

Tabela 47. Custos relacionados à coluna em função do número de pratos.

¹ Incluindo-se os custos com instalação.

Parâmetro característicos	Valor
Diâmetro da torre (m)	2,04
Altura da torre (m)	12,80
Espessura da torre (mm)	7,32
Número de pratos	12
Espaçamento entre pratos (m)	0,3048
Prato de alimentação	6
Nível máximo de líquido (mm)	7.023,26
Nível normal de líquido (mm)	5.125,47
Nível mínimo de líquido (mm)	381
Pressão de projeto (bar)	6,28
Temperatura de projeto (°C)	155,4

Tabela 48. Parâmetros estimados para a torre T-702 no cenário ótimo.

4.14.1. Capital imobilizado

A análise econômica a seguir será realizada a partir dos custos de equipamentos estimados para o cenário ótimo de 12 pratos. Tal análise baseia-se nos custos de todos os equipamentos da planta obtidos – desconsiderando os custos de instalação. A Tabela 49 lista os custos da torre e seus componentes (vaso, vaso pulmão, bomba, caldeira e condensador), bem como dos demais trocadores de calor da planta, do reator, da torre de absorção e do compressor. Vale lembrar que o custo da bomba utilizada na torre é duplicado, uma vez que a torre possui uma bomba reserva para o caso de algum defeito na bomba principal.

Equipamento	Custo 2010 (US\$)
E-701	176.302,37
E-702	215.561,63
E-703	62.295,93
E-704	50.575,35
E-705	86.530,59
P-701A	9.878,00
P-701B	9.878,00
T-701	1.106.467,26
T-702	213.099,19
V-701	48.875,26
C-701	1.572.189,45
R-701	6.024.459,24
Total	9.576.112,27

Tabela 49. Custos dos equipamentos da planta no cenário ótimo.

A partir do custo total com os equipamentos da planta, estima-se o *Inside Battery Limits* (cuja sigla é ISBL) por meio equação descrita em (SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013).

$$C = \sum_{i=1}^{i=M} C_{e,i,CS} [(1+f_p)f_m + (f_{er} + f_{el} + f_i + f_c + f_s + f_l)]$$

Os valores dos coeficientes f_{er} , f_p , f_i , f_{el} , f_c , f_s , e f_l podem ser encontrados na Tabela 7.5 em (SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013), considerando-se que os componentes envolvidos nos processos do projeto são gases (fluidos). Quanto aos possíveis valores para o coeficiente f_m , o qual refere-se ao material utilizado na confecção dos equipamentos em relação ao aço carbono, estão listados na Tabela 7.6 em (SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013). No caso do aço inoxidável 304, tem-se que f_m é igual a 1,3.

A partir do ISBL é possível estimar o custo de capital imobilizado de acordo com a seguinte expressão (SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013):

$$C_{FC} = C(1 + OS)(1 + D\&E + X)$$

em que *C* denota o ISBL estimado; *OS* refere-se aos custos *offsite* da planta; *D*&*E* referese aos custos de engenharia e design; e *X* trata-se da contingência. Os valores desses parâmetros considerados para o presente projeto são OS = 0,3; D&E = 0,3; e X = 0,1. Vale lembrar que tais custos obtidos têm como base o U.S. Gulf Coast referente a janeiro de 2010. Portanto, faz-se necessária a conversão para os valores atualizados ao ano de 2022 por meio do chamado Índice de Custo de Plantas Químicas (em inglês, comumente abreviado para CEPCI). Essa correção é feita pela multiplicação dos custos pela razão entre o CEPCI de 2022 e o CEPCI de 2010. De acordo com CHARLES MAXWELL (2022) tem-se que o CEPCI de 2022 é igual a 833,1, enquanto o CEPCI de 2010 é igual a 550,8. As estimativas para o ISBL e o custo de capital imobilizado encontram-se na Tabela 50.

Tabela 50. Estimativas para ISBL e capital imobilizado.

Custo	Valor (US\$)
ISBL (US\$ 2010)	35.814.659,90
Custo de capital imobilizado (US\$ 2010)	65.182.681,02
Custo de capital imobilizado (US\$ 2022)	98.590.580,17

4.14.2. Investimento

Com base no custo de capital imobilizado corrigido, podem ser definidos os valores para o investimento total na planta. O cálculo do capital de giro leva em consideração o tamanho do projeto. De acordo com (ANDRÉS; RODRIGO, 2011), podese tomar o capital de giro como sendo igual a 20% do valor imobilizado. Os gastos prévios e gastos de entrada em funcionamento da planta são, respectivamente, iguais a 10% e 5% do custo de capital imobilizado (ANDRÉS; RODRIGO, 2011) . Os valores referentes aos investimentos na planta encontram-se relacionados na Tabela 51.

 Tabela 51. Valores de investimento na planta.

Investimento	Valor (US\$)
Imobilizado (US\$ 2022)	98.590.580,17
Capital de Giro (US\$ 2022)	19.718.116,03
Gastos Prévios (US\$ 2022)	9.859.058,02
Gastos de entrada em funcionamento (US\$ 2022)	4.929.529,01
Total de Investimento (US\$ 2022)	133.097.283,23

4.14.3. Vendas

Para estimar-se o preço de venda final do óxido de etileno, calcula-se a sua produção anual com base na sua produção horária. Vale lembrar que se considera que a planta funciona por 8.000 horas em um ano. Dessa forma, pode-se estimar, ponderando-se ainda o preço de venda de mercado encontrado em (ECHEMI, 2022b) do óxido de etileno, o preço de venda anual desse produto. Os valores relacionados a vendas estão listados na Tabela 52.

Tabela 52. Valores relacionados ao preço de venda anual do óxido de etileno.

Vendas	Valor
Produção horária de OE (kg/h)	10.980,00
Produção anual (ton/ano)	87.840,00
Preço de venda (US\$ 2022/ton)	1.058,10
Preço de venda anual (US\$ 2022/ano)	92.943.504,00

4.14.4. Custos de fabricação diretos

Sabe-se que as matérias-primas utilizadas na presente planta são o etileno e o oxigênio. Os consumos horários dessas matérias-primas são estimados de acordo com a simulação realizada em Aspen HYSYS (8). Para o cenário considerado, tem-se que o consumo horário de etileno é igual a 9.555 kg/h, enquanto o de oxigênio é igual a 12.030 kg/h. A partir disso, e considerando-se que a planta funciona por 8.000 horas em um ano, é possível se estimar a demanda anual de tais matérias-primas, a qual, em conjunto com o custo de compra (ou preço de venda) de cada uma delas, determina os custos com matérias-primas para a planta. Os custos de compra do etileno e do oxigênio foram obtidos em ECHEMI (2022a) e DORRIS *et al.* (2016), respectivamente; as estimações descritas acima estão relacionadas na Tabela 53.

Tabela 53. Custos anuais relacionados às matérias-primas.

Matéria Prima	Etileno	Oxigênio
Produção anual (ton/ano)	76.440	96.240
Preço de venda/Custo de compra (US\$ 2022/ton)	175,70	60,00
Preço de venda/Custo de compra anual (US\$ 2022/ano)	13.430.508,00	5.774.400,00
Preço de venda total (US\$ 2022/ano)	19.204.908,00	

A seguir, trata-se da mão de obra necessária para o funcionamento da planta. A planta possui 3 postos de operação: um operador dentro da sala de controle, um operador fora da sala de controle e outro na área de envio e recepção de produtos. Para cada posto, faz-se necessária a presença de uma média de 4,8 operadores (SINNOTT, R. K.; TOWLER, 2013), levando-se em consideração a rotatividade nos diferentes turnos, aos fins de semana e nas férias. Em relação aos custos referentes à mão de obra utilizada, obtém-se, de acordo com a Secretaria de Estatísticas Trabalhistas dos Estados Unidos (BLS), que o salário anual por posto de trabalho em uma planta química é igual a 70.000,00 US\$ 2022/ano (U.S. BUREAU OF LABOR STATISTICS, 2022). Tal informação, juntamente com o custo anual total – incluindo-se todos os funcionários em cada posto – com mão de obra na presente planta, encontra-se na Tabela 54.

Tabela 54. Custos anuais com mão de obra direta.

Salário anual por posto (US\$ 2022/ano)	70.000,00
Total (US\$ 2022/ano)	1.008.000,00

4.14.5. Custos de fabricação indiretos

Além dos já mencionados custos com equipamentos, com matérias-primas e com mão de obra, uma planta também exige gastos com elementos considerados indiretos. A seguir, estão exemplificados tais elementos e descritas as estimações realizadas para os seus custos.

Para que os equipamentos implementados na planta funcionem, é necessária a utilização de uma série de elementos, os quais são denominados utilidades. Levando-se em consideração os equipamentos presentes na planta, tem-se que as utilidades a serem utilizadas na planta são: fluidos para realizarem as trocas térmicas nos trocadores de calor da planta e eletricidade para o garantir o funcionamento de equipamentos elétricos, como o compressor e a bomba. Os custos anuais estimados para cada utilidade considerada estão relacionados na Tabela 55.

Utilidade	Custo (US\$ 2022/ano)
Vapor E-701	7.022.917,53
Vapor E-703	2.034.282,78
Bomba P-701	951,36
Compressor C-701	1.834.080,00
Água de refrigeração E-702	391.960,80
Água de refrigeração E-704	21.383,00
Água de refrigeração E-705	189.358,49
Total	11.494.933,96

Tabela 55. Custos anuais com utilidades.

Adicionalmente à mão de obra atuante direta sobre a operação da planta, também se faz necessária a contratação de mão de obra indireta. Aqui, assume-se que os custos com tal mão de obra indireta representam 30% do custo total de mão de obra direta estimado anteriormente. Por fim, considera-se os custos de processos relacionados ao abastecimento de matérias-primas; à manutenção de equipamentos da planta; ao controle de qualidade (laboratório) e ao envase. Tais custos estimados estão relacionados na Tabela 56.

Elementos indiretos	Critério de estimação	Custo (US\$ 2022/ano)
Mão de obra indireta	30% do custo total da mão de obra direta	302.400,00
Abastecimento	0,75% do custo de capital imobilizado	739.429,35
Manutenção	6% do custo de capital imobilizado	5.915.434,81
Laboratório	15% dos custos com mão de obra direta	151.200,00
Envasado	27,5% do custo de venda do óxido de etileno	25.559.463,60
Total	32.667.927,76	

Tabela 56. Custos anuais de fabricação indiretos.

Somando-se os custos com utilidades com os custos dos demais elementos indiretos, obtém-se um valor de custo de fabricação indireto total igual a US\$ 44.162.861,72.
4.14.6. Custos de fabricação indiretos fixos

O tempo de vida estimado para a planta em questão é igual a 20 anos. Vale lembrar que se considera que o funcionamento efetivo da planta começa aproximadamente após 3 anos do início dos investimentos, período no qual são realizadas todas as obras e as instalações, bem como as contratações de mão de obra, necessárias para o funcionamento da planta.

Elementos indiretos fixos	Critério de estimação	Custo (US\$ 2022/ano)
Diretivo e empregados	25% dos custos de mão de obra direta	252.000,00
Amortização	Valor imobilizado por anos de operação da planta (20 anos)	4.929.529,01
Aluguel	2% do custo de capital imobilizado	1.971.811,60
Impostos	0,75% do custo de capital imobilizado	739.429,35
Seguros	1% do custo de capital imobilizado	985.905,80
Total		8.878.675,77

Tabela 57. Custos anuais de fabricação indiretos fixos.

A partir dos custos diretos, que são relacionados a matéria-prima e mão de obra; dos custos indiretos, os quais referem-se a mão de obra indireta, utilidades, abastecimento, manutenção, laboratório e envasado; e dos custos de fabricação indiretos fixos, os quais englobam diretivo, empregados, amortização, aluguel, impostos e seguros; calcula-se o custo total de fabricação de produto por meio da soma de tais custos. A Tabela 58 lista tais valores estimados.

 Tabela 58. Custos anuais de fabricação de produto.

Custos totais	Valor (US\$ 2022/ano)	
Custos diretos	20.212.908,00	
Custos indiretos	44.162.861,72	
Custos de fabricação indiretos fixos	8.878.675,77	
Custo total de fabricação	73.254.445,48	

4.14.7. Gastos gerais

Ademais, com base no custo total de fabricação calculado acima, é possível estimar os chamados gastos gerais, os quais tratam-se de custos relacionados a gastos comerciais, a gerência de projeto, bem como a pesquisa e a serviços técnicos.

Gastos gerais	Critério de estimação	Custo (US\$ 2022/ano)
Gastos comerciais	5% do custo total de fabricação	3.662.722,27
Gerência	4,5% do custo total de fabricação	3.296.450,05
Pesquisa e serviço técnico	1% do valor da venda total do óxido de etileno	929.435,04
Custo total dos gastos gerais		7.888.607,36

Tabela 59. Custos anuais com gastos gerais.

Por fim, soma-se o custo total de fabricação e o custo total com gastos gerais para se obter um valor total igual a 81.143.052,84 US\$ 2022, referente a todos os custos associados à planta e à implementação do projeto. Descontando-se o valor de amortização, obtém-se um valor total de custos igual a 76.213.523,84 US\$ 2022.

4.14.8. Fluxo de caixa

Para calcular-se o fluxo de caixa da planta e, consequentemente, sua rentabilidade, é necessário realizar uma série de cálculos, os quais serão descritos a seguir. O lucro antes de impostos, abreviado pela sigla LAI, associado ao projeto é igual ao valor do preço de venda final estimado anteriormente subtraindo-se os custos e a amortização. Já o valor dos impostos, denotado por I, trata-se de 34% do LAI (ANDRÉS; RODRIGO, 2011)., enquanto que o lucro depois de impostos, abreviado por LDI, satisfaz *LDI* = *LAI* – *I*. Os fundos gerados pela planta são, portanto, iguais à adição do valor da amortização com o LDI.

O valor do capital imobilizado varia ao longo dos três primeiros anos, a saber, os anos 0, 1 e 2 da vida da planta, sendo, respectivamente, igual a 10%, a 60% e a 30% do valor imobilizado (ANDRÉS; RODRIGO, 2011).

Variável	Valor (US\$ 2022)
Total de custos	76.213.523,84
Lucro antes de impostos ^a (LAI)	11.800.451,16
Impostos ^a (I)	4.012.153,39
Lucro depois de impostos ^a (LDI)	7.788.297,76
Fundos gerados ^a	12.717.826,77
Gastos prévios ^b	3.286.352,67
Imobilizado (ano 0)	9.859.058,02
Imobilizado (ano 1)	59.154.348,10
Imobilizado (ano 2)	2.957.717,41

Tabela 60. Listagem de custos, capitais e investimentos associados à planta em cada

ano de sua vida.

^a Valor anual referente aos anos de operação da planta; a saber, a partir do ano 3.

^b Valor anual referente apenas aos 3 primeiros anos de vida da planta (anos 0, 1 e 2).

Com base nas variáveis estimadas, é possível calcular o fluxo de caixa (FC) da planta, sobre o qual se aplica a taxa a mínima de atratividade, abreviada por TMA, para se obter o chamado fluxo de caixa atualizado (FCA). A TMA tomada para a presente análise econômica é igual a 2,5% (INVESTING, 2022). Com isso, torna-se possível a utilização do Valor Presente Líquido (VPL), o qual trata-se da soma de todos os movimentos dos fundos ao longo da vida do projeto corrigidos ao ano atual (ANDRÉS; RODRIGO, 2011), para a avaliação da rentabilidade do projeto. Tal método é capaz de determinar se um projeto é rentável ou não de acordo com os seguintes critérios:

- VLP < 0: caracteriza um projeto não rentável;
- VLP = 0: significa que os fundos gerados são iguais aos fundos investidos; e
- VLP > 0: trata-se de um projeto rentável.

O FC referente aos anos 0 e 1 da vida da planta correspondem ao somatório do valor imobilizado e dos gastos prévios dos respectivos anos. Já o FC referente ao ano 2 considera em seu somatório, além dos já mencionados custos, o capital de giro e os gastos de entrada em funcionamento da planta. O capital de giro estimado para o projeto é igual a US\$ 19.718.116,03, enquanto os gastos de entrada em funcionamento da planta são iguais a US\$ 4.929.529,01. Vale lembrar que os primeiros três anos tratam-se do período no qual são realizadas todas as obras e as instalações, bem como as contratações de mão de obra, necessárias para o funcionamento da planta. O FC referente a um outro ano

qualquer na vida da planta trata-se dos fundos gerados nesse ano. O cálculo do FCA em função da TMA é realizado de acordo com a seguinte expressão (ANDRÉS; RODRIGO, 2011):

$$FCA = FC_0 + \frac{FC_1}{(1 + TMA)^1} + \dots + \frac{FC_n}{(1 + TMA)^n}$$

em que o índice *n*, correspondente ao tempo total de vida da planta, é considerado igual a 22. Ademais, no último ano de vida da planta, considera-se que é possível se recuperar uma porcentagem do valor total imobilizado – aqui, considerada igual a 10% –, bem como o valor integral do capital de giro, investido nos três primeiros anos do horizonte temporal considerado. Tal recuperação deve-se, por exemplo, à possibilidade de venda dos equipamentos utilizados. Tais valores são acrescidos ao fluxo de caixa referente ao último ano considerado.

Por fim, estima-se o VLP do projeto associado ao ano n de vida da planta por meio da equação a seguir (ANDRÉS; RODRIGO, 2011):

$$VPL = \sum_{i=0}^{n} \frac{FC_i}{(1+TMA)^i}.$$

A Tabela 61 relaciona os valores de fluxo de caixa e de fluxo de caixa atualizado, bem como do valor presente líquido, em função do ano de vida da planta.

Ano	FC (US\$ 2022)	FCA (US\$ 2022)	VLP (US\$ 2022)
0	-13.145.410,69	-13.145.410,69	_
1	-62.440.700,78	-60.917.756,85	-74.063.167,54
2	-30.891.715,12	-29.403.179,17	-103.466.346,7
3	12.717.826,77	11.809.766,45	-91.656.580,27
4	12.717.826,77	11.521.723,36	-80.134.856,91
5	12.717.826,77	11.240.705,72	-68.894.151,19
6	12.717.826,77	10.966.542,17	-57.927.609,02
7	12.717.826,77	10.699.065,53	-47.228.543,49
8	12.717.826,77	10.438.112,71	-36.790.430,78
9	12.717.826,77	10.183.524,60	-26.606.906,18
10	12.717.826,77	9.935.145,95	-16.671.760,24
11	12.717.826,77	9.692.825,31	-6.978.934,92
12	12.717.826,77	9.456.414,94	2.477.480,02
13	12.717.826,77	9.225.770,67	11.703.250,69
14	12.717.826,77	9.000.751,88	20.704.002,57
15	12.717.826,77	8.781.221,34	29.485.223,91
16	12.717.826,77	8.567.045,21	38.052.269,13
17	12.717.826,77	8.358.092,89	46.410.362,02
18	12.717.826,77	8.154.236,97	54.564.598,98
19	12.717.826,77	7.955.353,14	62.519.952,12
20	12.717.826,77	7.761.320,13	70.281.272,26
21	12.717.826,77	7.572.019,64	77.853.291,90
22	39.633.055,16	23.021.441,47	100.874.733,36

Tabela 61. Fluxos de caixa e valor presente líquido da planta em função do seu ano de

vida.

Outro parâmetro importante a ser mensurado é a Taxa Interna de Retorno (TIR). O TIR é uma taxa de desconto hipotética, mensurada a partir de uma projeção de fluxo de caixa (previsão de receitas geradas por um investimento ao longo de determinado período) quando consideramos que o VPL é igual a zero (WARREN, 2022). A partir de tal definição, tem-se que a TIR deve satisfazer a seguinte equação:

$$0 = \sum_{i=0}^{n} \frac{FC_i}{(1+TIR)^i}$$

Tal taxa pode ser utilizada para se indicar se um projeto é ou não viável. De modo geral, utiliza-se o critério TIR > TMA para se determinar que o projeto é considerado atrativo (ANDRÉS; RODRIGO, 2011). A Tabela 62 lista os valores estimados para o VLP e a TIR.

Variável	Valor
Valor Presente Líquido (US\$ 2022)	100.874.733,36
Taxa Interna de Retorno	10%

 Tabela 62. Índices de rentabilidade e de atratividade do projeto.

A partir dos valores obtidos, conclui-se que o presente projeto é rentável e atrativo, de acordo com os critérios descritos previamente.

4.15. Avaliação de impacto ambiental

4.15.1. Leis e Normas Ambientais Brasileiras

A Avalição de Impacto Ambiental (AIA) é, segundo (IBAMA, 2016), "o processo de análise técnica que subsidia o licenciamento, por meio da análise sistemática dos impactos ambientais decorrentes de atividades ou empreendimentos".

No que tange à geração de resíduos industriais, a legislação ambiental prevê normas e leis que descrevem os procedimentos técnicos e medidas a serem tomadas desde a geração até a destinação final de efluentes (TERA, 2021).

A Associação Brasileira de Normas Técnicas, ABNT, trata na NBR 10004:2004 sobre a classificação de resíduos sólidos. O objetivo dessa norma é categorizar esses rejeitos de acordo com potenciais riscos à saúde pública e ao meio ambiente, de modo a promover o gerenciamento mais adequado a eles (ABNT, 2004).

Derivadas da norma supracitada, a ABNT também estabeleceu duas outras NBRs para tratar do correto armazenamento de efluentes sólidos. A NBR 12235:1992 versa sobre a retenção de resíduos sólidos perigosos (ABNT, 1992), enquanto a NBR 11174:1990 aborda o armazenamento de resíduos classes II-não inertes e III-inertes. (ABNT, 1990).

No que se refere ao transporte terrestre de rejeitos, a NBR 13221:2021 estabelece requisitos aplicáveis àqueles "classificados na Portaria n° 204 do Ministério dos Transportes, inclusive aqueles materiais que possam ser reaproveitados, reciclados e/ou reprocessados. Aplica-se também aos resíduos perigosos segundo a definição da Convenção da Basiléia" (ABNT, 2003). Essa norma prevê o uso adequado de

equipamentos durante o transporte e o correto acondicionamento para que não haja riscos de vazamentos contaminantes, por exemplo.

O CONAMA, Conselho Nacional do Meio Ambiente, dispõe através da Resolução nº 357 (com complemento da Resolução nº 430) "sobre a classificação dos corpos de água e diretrizes ambientais para o seu enquadramento, bem como estabelece as condições e padrões de lançamento de efluentes, e dá outras providências" (BRASIL, 2005).

Um grande marco da legislação ambiental foi a instituição da Política Nacional de Resíduos Sólidos (PNRS) através da lei nº 12.305, de 2 de agosto de 2010. Tal lei foi resultado de extenso debate decorrente dos padrões definidos na Agenda 21, estabelecida na Conferência das Nações Unidas sobre Meio Ambiente e Desenvolvimento (Rio-92) (FARIA, 2012).

A PNRS trata de objetivos e metas, tanto para pessoas físicas, quanto jurídicas, referentes ao gerenciamento de efluentes. O intuito dela é ajustar o gerenciamento de resíduos às legislações e normativas existentes, promover a preservação ambiental com a redução do uso de aterros e promover a logística reversa de resíduos pós consumo (GROUP, 2022).

4.15.2. Efluentes do Processo Produtivo

A planta em questão possui três efluentes resultantes do processo de produção do óxido de etileno e são eles: dióxido de carbono, metano e água. Portanto é necessário estabelecer os cuidados a serem tomados com os gases gerados e a correta destinação de todos os rejeitos.

4.15.2.1. Dióxido de Carbono (CO₂)

- Segurança e Perigos: sob pressão, o dióxido de carbono pode explodir se aquecido e queimaduras se refrigerado (PUBCHEM, 2022a).
- Toxicidade: o dióxido de carbono pode causar sintomas de asfixia em concentrações superiores a 2% que progridem com o aumento da quantidade da substância. Em altas

concentrações o CO₂ causa insuficiência circulatória e, como consequência, o estado de coma e a morte (MARTINS, 2001).

4.15.2.2. Metano (CH4)

- Segurança e Perigos: o gás metano é extremamente inflamável na presença de um gás oxidante (por exemplo, ar), uma fonte de ignição ou quando a concentração do gás estiver entre os limites inferior e superior de explosividade (entre 5,3% e 14% em volume em ar). Ele deve ser mantido afastado de fontes de calor e/ou faíscas. Ademais, o contato com gás ou gás liquefeito pode causar queimaduras, ferimentos graves e/ou congelamento (PUBCHEM, 2022d).
- Toxicidade: em concentrações muito altas, os vapores de metano podem causar tonturas ou asfixia. O fogo gerado pela combustão dessa substância também produz gases irritantes e/ou tóxicos (PUBCHEM, 2022d).

Tanto o dióxido de carbono, quanto o metano são efluentes gasosos e classificados como GEEs (Gases de Efeito Estufa). Portanto, suas emissões não são controladas por uma legislação específica. Entretanto, o decreto federal nº 11.075/22 estabeleceu as bases jurídicas preliminares para a criação e a instalação do Mercado Brasileiro de Carbono, cujo objetivo é, em suma, a comercialização regulamentada dos Créditos de Carbono, além de atuar como um mecanismo oficial em prol da mitigação das mudanças climáticas (MIGALHAS, 2022).

A solução tecnológica atual mais utilizada para promover a neutralização de emissão de carbono é o CCS (*Carbon Dioxide Capture and Storage*), que se baseia na captura, transporte e armazenamento de CO₂. Na fase de captura, as tecnologias mais utilizadas, de acordo com METZ *et al.* (2005) são absorção, adsorção, membrana e criogenia. Dado o caráter puro do dióxido de carbono gerado na planta, as etapas de captura podem ser descartas, uma vez que são utilizadas para separar a substância de interesse de outras. De forma simplista, o dióxido de carbono é transportado por tubulações para compartimentos subterrâneos (METZ *et al.*, 2005).

Pesquisas recentes também propõem outros caminhos para a destinação do dióxido de carbono, como o uso dele na produção de metanol, tanto na rota direta (via hidrogenação) quanto indireta (via bi-reforma de gás natural) (WIESBERG, 2016). Essa

tecnologia, ainda em estudo, visa atender dois aspectos importantes da sustentabilidade: substituição economicamente viável de combustíveis fósseis e redução da emissão de gases de efeito estufa (WIESBERG, 2016). Um estudo de 2016 simulou, também no software Aspen HYSYS ®, a construção de uma planta para produção de metanol a partir de CO₂ recuperado de outros processos químicos (BRAGA, 2016). A simulação teve como resultado uma redução da emissão de dióxido de carbono em 75,13%.

Outra saída bastante explorada nos últimos anos é a política do Carbono Zero. Esse conceito foi criado durante o Protocolo de Kyoto, em 1997, e reforçado na Conferência do Clima em 2011 (FIA BUSINESS SCHOOL, 2021). Na primeira ocasião, a meta foi reduzir em 5% as emissões de GEEs entre 2008 e 2012, usando como referência níveis de 1990. No segundo momento, as nações se responsabilizaram em diminuir de 18% a 40% a emissão dos gases até 2020 (FIA BUSINESS SCHOOL, 2021). Durante a Conferência do Clima das Nações Unidas em Glasgow, Escócia (COP26) realizada no ano de 2021, o Brasil firmou o compromisso de mitigar 50% de suas emissões de GEEs até 2030, tendo como linha de base o ano de 2005 (WRI BRASIL, 2021).

A política do Carbono Zero consiste em calcular a quantidade de gases de efeito estufa emitidos por determinada indústria e compensar isso com uma série de ações, como a utilização de energias renováveis, uso eficiente dos recursos naturais (BOSCH, 2022), compra de créditos de carbono em mercado voluntários e também recuperando áreas degradadas via arranjos florestais (VALE, 2022). Empresas como a Natura, Vale e Bayer possuem iniciativas para diminuir a emissão de GEEs, o que demonstra que a prática sustentável tem se consolidado e tornou-se também um dos parâmetros para fortalecimento de marca, por exemplo (FIA BUSINESS SCHOOL, 2021).

4.15.2.3. Água

O tratamento de águas industriais tem por objetivo recuperar a qualidade da água para posterior descarte direta ou indiretamente em corpos de água. Tal tratamento deve atender aos critérios estabelecidos na Resolução nº 357 do CONAMA, Capítulo IV - "Das condições e padrões de lançamento de efluentes".

Uma opção bastante utilizada nas indústrias é o uso de uma ETE (Estação de Tratamento de Efluentes) para adequar a água aos parâmetros estabelecidos pela legislação. Uma ETE industrial é composta primordialmente de um tratamento biológico e outro físico-químico.

A etapa de tratamento biológico faz uso, inicialmente, de uma peneira para reter sólidos grandes do efluente bruto. Em seguida o efluente vai para a lagoa aerada que possui aeradores de superfície que promovem a remoção da carga orgânica. Depois ele segue para o tanque pulmão, um reservatório anterior ao tratamento físico-químico (ÁGUAS CLARAS ENGENHARIA, 2017).

A partir disso o rejeito parte para a calha de floculação e recebe dosagens de hidróxido de sódio e policloreto de alumínio. Ao final do percurso na calha observa-se a coagulação de impurezas no rejeito. Após tal processo, o líquido segue para decantadores. No fundo deles se forma uma camada de lodo e acima a água está clarificada. O líquido superficial vai para o filtro gravitacional de carvão ativado e é reservado em um tanque que recebe dosagens de hipoclorito de sódio (ÁGUAS CLARAS ENGENHARIA, 2017).

Amostras são retiradas durante todo o processo de tratamento do efluente para garantir que ele esteja de acordo com a resolução nº 357 ao fim do processo e apto para ser depositado em um corpo receptor. Também é possível armazenar a água tratada em uma lagoa para usos diversos na planta produtiva.

5. CONCLUSÕES

O presente trabalho abordou o projeto para a produção de óxido de etileno a partir de etileno e oxigênio. Para o levantamento de dados foi levado em questão aspectos econômicos, ambientais e operacionais que obtivessem o melhor cenário possível.

Os principais processos abordados foram reação química, absorção e destilação. Tratando-se do reator PFR o melhor valor de comprimento de tubos foi de 20 ft, pois assim respeitou os valores determinados pela biografia de referência. Já na torre de destilação a maior eficiência com menor custo ocorreu com 12 pratos teóricos. Outro equipamento de grande valia foi a torre de absorção que sanou o problema da emissão de rejeitos para atmosfera deliberadamente.

Em posse das normas e diretrizes ambientais foi possível afirmar o enquadramento da planta industrial no órgão nacional de meio ambiente, tendo em vista que os 3 efluentes industriais gerados (dióxido de carbono, metano e água) receberam os devidos tratamentos requeridos. Para os gases CO₂ e CH₄ processo de absorção, já para a água o tratamento físico-químico e biológico.

Com os dados coletados na secção de avaliação econômica definiu-se que o fluxo no caixa nos 2 primeiros anos é negativo, um padrão esperado, entretanto a partir do 3 ano a empresa já consegue seu primeiro fluxo de caixa positivo, alcançando valores de 12 milhões de dólares. Já o fluxo de caixa livre também começa alto e decai com o tempo, visto as perdas com a depreciação (linear) e inflação (exponencial). Os valores tabelados referentes ao VLP e TIR também apresentaram resultado positivos. Por fim, a análise econômica permitiu concluir que o projeto é rentável. Apesar de ser um processo simulado em *software*, diversos parâmetros do projeto podem ser utilizados na vida real.

6. BIBLIOGRAFIA

ABNT. NBR 10.004: Resíduos Sólidos - Classificação. Rio de Janeiro, 2004.

ABNT. NBR 11.174: armazenamento de resíduos classes II–não inertes e III–inertes. **Rio de Janeiro**, 1990. .

ABNT. NBR 12.235: armazenamento de resíduos sólidos perigosos. **Rio de Janeiro**, 1992. .

ABNT. NBR 13221: Transporte terrestre de resíduos. Rio de Janeiro, 2003.

ABOU SHAMA, M. A.; XU, Q. Optimal Design of Gas-Expanded Liquid Ethylene Oxide Production with Zero Carbon Dioxide Byproduct. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 57, n. 15, p. 5351–5358, 18 abr. 2018. https://doi.org/10.1021/acs.iecr.7b05060.

ÁGUAS CLARAS ENGENHARIA. ESTAÇÃO DE TRATAMENTO DE EFLUENTE INDUSTRIAL: SAIBA COMO FUNCIONA. 2017. Available at: https://aguasclarasengenharia.com.br/como-funciona-uma-estacao-de-tratamento-deefluente-industrial/. Acesso em: 22 set. 2022.

AMERICAN CHEMISTRY COUNCIL. Ethylene Oxide. 3. ed. 2007.

ANDRÉS, M.; RODRIGO, R. TÉCNICAS DE OPTIMIZACIÓN PARA INGENIEROS QUÍMICOS. 2011.

BAYLOR UNIVERSITY. Ethylene Oxide. 2022. Available at: https://www.baylor.edu/ehs/index.php?id=93792. Acesso em: 5 out. 2022.

BOSCH. A Bosch é carbono neutro. 2022. Available at: https://www.bosch.com.br/noticias-e-historias/sustentabilidade/carbono-neutro/. Acesso em: 29 set. 2022.

BOXSCORE, C. Shell starts new ethylene oxide, ethoxylates units at Singapore complex. 2022. Available at: https://www.constructionboxscore.com/project-news/shell-starts-new-ethylene-oxide,-ethoxylates-units-at-singapore-complex.aspx. Acesso em: 22 set. 2022.

BRAGA, E. R. PRODUÇÃO DE METANOL ATRAVÉS DA RECUPERAÇÃO DO CO2 EFLUENTE DE PROCESSOS QUÍMICOS: IMPORTÂNCIA, ANÁLISE ECONÔMICA E O IMPACTO NA REDUÇÃO DAS EMISSÕES DO CO2 PARA A ATMOSFERA. **The Journal of Engineering and Exact Sciences**, v. 2, n. 2, p. 104–115, 2016.

BRASIL. Resolução CONAMA nº 357/2005, de 17 de março de 2005. Dispõe sobre a classificação dos corpos de água e diretrizes ambientais para o seu enquadramento, bem como estabelece as condições e padrões de lançamento de efluentes, e dá outras providências. **Oficial da União**, 2005. .

CABRA DUEÑAS, L.; DE LUCAS MARTÍNEZ, A.; RUIZ FERNÁNDEZ, F.; RAMOS MARCOS, M. J.; RUIZ FERNANDEZ, F.; RAMOS MARCOS, M. J. **Metodologías del diseño aplicado y gestión de proyectos para ingenieros químicos**. Univ de Castilla La Mancha, 2010.

CHARLES MAXWELL. Cost Indices. 2022. Available at: https://www.toweringskills.com/financial-analysis/cost-indices/. Acesso em: 20 set. 2022.

CLARIANT. Clariant to increase Ethylene Oxide capacity at Gendorf. 2018. Available at: https://www.clariant.com/en/Corporate/News/2018/11/Clariant-to-increase-Ethylene-Oxide-capacity-at-Gendorfnbsp. Acesso em: 22 set. 2022.

CONECT. Descomplicando o conceito de Limite de Explosividade e Inflamabilidade. 2018. Available at: https://conect.online/blog/limite-de-explosividade/. Acesso em: 29 set. 2022.

COUNCIL, A. C. Ethylene Oxide. 2022. Available at: https://www.mindthescience.org/chemicals-in-products/ethylene-oxide.

DORRIS, C. C.; LU, E.; PARK, S.; TORO, F. H.; DORRIS, C. C. ; LU, E. ;; PARK, S. ; **High-Purity Oxygen Production Using Mixed Ionic-Electronic Conducting Sorbents**. 2016.

DOYLE, A. BASF expands ethylene oxide capacity in Antwerp. 2019. Available at: https://www.thechemicalengineer.com/news/basf-expands-ethylene-oxide-capacity-in-antwerp/. Acesso em: 23 set. 2022.

ECHEMI. Ethylene China Domestic Price. 2022a. Available at: https://www.echemi.com/productsInformation/pid_Rock16565-ethene.html. Acesso em: 28 set. 2022.

ECHEMI. Ethylene oxide China Domestic Price. 2022b. Available at: https://www.echemi.com/productsInformation/pid_Rock13784-ethylene-oxide-eo.html. Acesso em: 20 set. 2022.

FARIA, C. R. S. M. A política nacional de resíduos sólidos. 2012. .

FAVEERE, W. H.; VAN PRAET, S.; VERMEEREN, B.; DUMOLEIJN, K. N. R.; MOONEN, K.; TAARNING, E.; SELS, B. F. Toward Replacing Ethylene Oxide in a Sustainable World: Glycolaldehyde as a Bio-Based C2 Platform Molecule. **Angewandte Chemie - International Edition**, v. 60, n. 22, p. 12204–12223, 2021. https://doi.org/10.1002/anie.202009811.

FIA BUSINESS SCHOOL. Carbono Zero: Entenda o conceito e saiba como aplicá-lo. 2021. Available at: https://fia.com.br/blog/carbono-zero/. Acesso em: 29 set. 2022.

FOGLER, H. S. Essentials of Chemical Reaction Engineering. 2. ed. 2018.

GROUP, A. Conheça os 5 Principais Objetivos da Política Nacional de Resíduos Sólidos. 2022. Available at: https://ambipar.com/noticias/conheca-os-5-principais-objetivos-da-politica-nacional-de-residuos-solidos/. Acesso em: 22 set. 2022.

IBAMA. Caminhos para o Fortalecimento do Licenciamento Ambiental Federal. 2016. Available at:

http://www.ibama.gov.br/phocadownload/noticias/noticias2016/resumo_executivo.pdf. Acesso em: 22 set. 2022.

INDUSTRY, D. Trocador de calor tubular HRS G series. 2022. Available at: https://www.directindustry.com/pt/prod/hrs-heat-exchangers/product-90471-1637342.html. Acesso em: 22 set. 2022.

INVESTING. Monitor da Taxa de Juros do Federal Reserve. 2022. Available at: https://br.investing.com/central-banks/fed-rate-monitor. Acesso em: 20 set. 2022.

KILTY, P. A.; SACHTLER, W. M. H. THE MECHANISM OF THE SELECTIVE OXIDATION OF ETHYLENE TO ETHYLENE OXIDE. **Catalysis Reviews**, v. 10, n. 1, p. 1–16, 19 jan. 1974. https://doi.org/10.1080/01614947408079624.

LEÓN MARTÍNEZ, N.; ARTEAGA COLMENARES, A. Exposición al óxido de etileno del personal auxiliar en odontología . **Acta Odontológica Venezolana**, v. 46, p. 523–530, 2008.

LUYBENT, W. L. Design of cooled tubular reactor systems. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 40, n. 24, p. 5775–5783, 2001. https://doi.org/10.1021/ie0006716.

MARKETS, T. E. Petronas installs huge ethylene oxide reactors at PIC refinery. 2017. Available at: https://www.theedgemarkets.com/article/petronas-installs-huge-ethylene-oxide-reactors-pic-refinery. Acesso em: 23 set. 2022.

MARTINS, W. Ficha de Informações de Segurança de Produtos Químicos. 2001. Available at: https://cloud.cnpgc.embrapa.br/wp-content/igu/fispq/laboratorios/Dioxido de carbono.pdf. Acesso em: 22 set. 2022.

MENEZES, J. E. S. A. de; SIQUEIRA, S. M. C. Química Orgânica II. 2. ed. 2015.

MERK. FICHA DE INFORMAÇÃO DE SEGURANÇA DE PRODUTO QUÍMICO. 2022. Available at: https://www.sigmaaldrich.com/BR/pt/sds/aldrich/387614. Acesso em: 22 set. 2022.

METZ, B.; DAVIDSON, O.; DE CONINCK, H. C.; LOOS, M.; MEYER, L. **IPCC special report on carbon dioxide capture and storage**. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.

MIGALHAS. Decreto auxilia desenvolvimento do mercado de carbono no Brasil. 2022. Available at: https://www.migalhas.com.br/quentes/366576/decreto-auxiliadesenvolvimento-do-mercado-de-carbono-no-brasil. Acesso em: 22 set. 2022.

MONNERY, W.; SVRCEK, W. Successfully Specify Three-Phase Separators. 1994.

MORDOR INTELLIGENCE. MERCADO DE ÓXIDO DE ETILENO -CRESCIMENTO, TENDÊNCIAS, IMPACTO COVID-19 E PREVISÕES (2022 -2027). 2022. Available at: https://www.mordorintelligence.com/pt/industryreports/ethylene-oxide-market. Acesso em: 22 set. 2022.

NOGUERA, I. Reactores de flujo pistón. 2020. Available at: https://www.ingenieriaquimicareviews.com/2020/11/reactores-de-flujo-piston.html. Acesso em: 24 set. 2022.

PUBCHEM. Carbon dioxide. 2022a. Available at: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/280. Acesso em: 20 out. 2022.

PUBCHEM. Ethylene. 2022b. Available at: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Ethylene. Acesso em: 29 set. 2022.

PUBCHEM. Ethylene oxide. 2022c. **COMPOUND SUMMARY**. Available at: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Ethylene-oxide. Acesso em: 23 set. 2022.

PUBCHEM. Methane. 2022d. Available at: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Methane. Acesso em: 20 out. 2022.

SINNOTT, R. K.; TOWLER, G. Chemical Engineering Design. 2013. https://doi.org/10.1016/C2009-0-61216-2.

SINNOTT, R.; TOWLER, G. **Chemical Engineering Design**. 2019. https://doi.org/10.1016/B978-0-08-102599-4.09980-X.

SPOHRER, C.; SCHALLER, C. Oxidation States & Redox Reactions. 2021. Available at: https://chem.libretexts.org/Courses/Palomar_College/PC%3A_CHEM100_-_Fundamentals_of_Chemistry/11%3A_Redox_Reactions/11.4%3A_Oxidation_States_a nd_Redox_Reactions. Acesso em: 10 out. 2022.

SUNDIN, M. S.; MACHADO NETO, V. Esterilização a óxido de etileno: uma revisão. 2012. Anais do XIII Congresso Brasileiro de Engenharia Biomédica, Porto de Galinhas, CBEB.2012.

TERA. Legislação ambiental: 5 aspectos que as indústrias químicas devem se atentar. 2021. Available at: https://www.teraambiental.com.br/blog-da-tera-ambiental/legislacao-ambiental-nas-industrias-químicas. Acesso em: 22 set. 2022.

TOWLER, G. P.; SINNOTT, R. K. Chemical engineering design : principles, practice, and economics of plant and process design. Butterworth-Heinemann, 2013.

TURTON, R.; SHAEIWITZ, J. A.; BHATTACHARYYA, D.; WHITING, W. B. Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes, Fifth Edition. 2018.

U.S. BUREAU OF LABOR STATISTICS. Occupational Employment and Wage Statistics. 2022. Available at: https://www.bls.gov/oes/current/oes518091.htm. Acesso em: 8 set. 2022.

VALE. Carbono Zero. 2022. Available at:

http://www.vale.com/brasil/PT/sustainability/Paginas/carbono-neutro.aspx. Acesso em: 29 set. 2022.

WARREN, M. Taxa Interna de Retorno (TIR): o que é, por que importa e como calcular. 2022. Available at: https://warren.com.br/magazine/taxa-interna-de-retorno-tir/. Acesso em: 22 set. 2022.

WIESBERG, I. L. Produção de metanol via hidrogenação de CO2 ou Bi-reforma de gás natural : análise técnica, exergética, econômica e ambiental. UFRJ, 2016.

WRI BRASIL. O saldo da COP26: o que a Conferência do Clima significou para o Brasil e o mundo. 2021. Available at: https://www.wribrasil.org.br/noticias/o-saldo-da-cop26-o-que-conferencia-do-clima-significou-para-o-brasil-e-o-mundo. Acesso em: 29 set. 2022.

XELEGATI, R.; ROBAZZI, M. L. do C. C.; MARZIALE, M. H. P.; HAAS, V. J. Riscos ocupacionais químicos identificados por enfermeiros que trabalham em ambiente hospitalar. Revista Latino-Americana de Enfermagem, v. 14, p. 214–219, 2006.

ZHANG, D.; HANG, P.; LIU, G. Recycle optimization of an ethylene oxide production process based on the integration of heat exchanger network and reactor. Journal of Cleaner Production, v. 275, 1 dez. 2020.

https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.122773.