



Universidade de Brasília

Instituto de Química

Curso de Engenharia Química

PROJETO DE ENGENHARIA QUÍMICA 2

Planta de produção de acetona a partir da desidrogenação de isopropanol

André Luís Pires de Moraes

Gabriel Felizola de Soroa

Lucas Oliveira Santana

Maísa Ferreira Custódio

Taís Marra Gomes

Tatiane Gomes Sousa

Tayane Alencar Marques Serafim

Orientador: Prof. Dr. José Joaquín Linares León

Brasília, 2022

PROJETO DE ENGENHARIA QUÍMICA 2

Planta de produção de acetona a partir da desidrogenação de isopropanol

Projeto de graduação da disciplina de Projetos de Engenharia Química 2 do Instituto de Química da Universidade de Brasília, como requisito da obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. José Joaquín Linares León

Brasília, 2022

AGRADECIMENTOS

Agradecemos à Universidade de Brasília e ao seu corpo docente por ter nos proporcionado um ambiente de muito aprendizado e crescimento.

Ao nosso orientador, professor Dr. José Joaquín Linares León, por toda a sua atenção e paciência em nos guiar neste projeto, se mostrando sempre disponível em sanar as nossas dúvidas.

Aos nossos familiares, pois foram eles que nos deram força e apoio durante esses anos, nos permitindo persistir no curso e vencer os desafios.

Aos nossos colegas e amigos de curso, que compartilharam diversos momentos conosco, deixando a caminhada muito mais leve.

A todas as pessoas que nos ajudaram de alguma forma, seja por uma orientação, conselho ou, simplesmente, por terem acreditado em nosso potencial.

RESUMO

A Engenharia Química é um campo da ciência que elabora processos físico-químicos de transformação de matéria-prima em escala industrial. Dessa forma, este projeto teve como objetivo a implementação de uma planta química de produção de acetona a partir da desidrogenação do 2-propanol (IPA). O sistema possuiu duas colunas de destilação e uma de absorção, que aumentaram o grau de pureza do produto final e permitiram atingir a conversão molar de 99,62%. Participaram também as bombas para a circulação dos produtos na planta, reator para a conversão de matéria-prima em produto, trocadores de calor para aquecer ou resfriar as correntes de processo, entre outros equipamentos. Ainda foi utilizado o *software* Aspen HYSYS® para efetuar simulações e foi elaborado um diagrama de processo e instrumentação (P&ID) para uma das torres de destilação, com a inserção de todos os elementos necessários de instrumentação, controle e segurança. Ademais, com a avaliação econômica, notou-se uma boa rentabilidade da planta química, com destaque na reutilização do hidrogênio. Por fim, o projeto ainda foi analisado ambientalmente, no qual demonstrou aproveitamento de matéria-prima e alternativa para a redução de desperdícios.

Palavras-chave: Acetona. Isopropanol. Desidrogenação. Planta química.

ABSTRACT

Chemical Engineering is a field of science that elaborates physical-chemical processes of raw material transformation on an industrial scale. Thus, this project aimed to implement a chemical plant for the production of acetone from the dehydrogenation of 2-propanol (IPA). The system had two distillation columns and one absorption column, which increased the degree of purity of the final product and allowed to reach a molar conversion of 99.62%. Pumps for circulating products in the plant, reactor for converting raw material into product, heat exchangers to heat or cool process streams, among other equipment, also participated. The Aspen HYSYS® software was also used to perform simulations and a process and instrumentation diagram (P&ID) was prepared for one of the distillation towers, with the insertion of all necessary instrumentation, control and safety elements. In addition, with the economic evaluation, a good profitability of the chemical plant was noted, with emphasis on the reuse of hydrogen. Finally, it was also studied environmentally, without a project to use raw material and an alternative to reduce waste.

Keywords: Acetone. Isopropanol. Dehydrogenation. Chemical plant.

ÍNDICE

LISTA DE FIGURAS.....	viii
LISTA DE TABELAS	x
LISTA DE ABREVIATURAS, SIGLAS E SÍMBOLOS.....	xii
1. INTRODUÇÃO E OBJETIVOS	1
2. REFERENCIAL TEÓRICO	3
2.1. Acetona.....	3
2.2. Aplicações e mercado da acetona	6
2.3. Isopropanol	8
2.4. Aplicações e mercado do isopropanol	9
3. DESCRIÇÃO DO CENÁRIO.....	11
4. PROJETO DA PLANTA	14
4.1. Correntes de processo.....	14
4.2. Reator.....	15
4.3. Bombas.....	22
4.3.1. Projeto das bombas P-1101 e P-1102	24
4.3.2. Projeto das bombas P-1103 e P-1104	25
4.3.3. Custo das bombas.....	29
4.4. Trocadores de calor	31
4.4.1. Projeto do trocador de calor E-1101	35
4.4.2. Projeto do trocador de calor E-1102	35
4.4.3. Projeto do trocador de calor E-1103	36
4.4.5. Dimensionamento trocadores das colunas de destilação	38
4.4.5.1. Coluna 1 (separação de acetona).....	38
4.4.5.2. Coluna 2 (separação do IPA)	40
4.5 Vasos	42
4.5.1 Vasos pulmões	42
4.5.1.1. Projeto dos vasos pulmões	43
4.5.1.2. Custo dos vasos pulmões	46
4.5.2. Vasos separadores.....	47
4.6. Torres de separação	51
4.6.1 Torres de destilação	52

4.6.2 Torre de absorção	58
5. INSTRUMENTAÇÃO, CONTROLE E SEGURANÇA	60
5.1. Listagem de indicadores	61
5.2. Listagem de controladores	61
5.3. Listagem de alarmes.....	62
5.4. Listagem de válvulas de segurança.....	63
5.5. Listagem de intertravamentos	63
5.6. Diagrama mecânico de processo	64
6. ANÁLISES ECONÔMICA E AMBIENTAL DA PLANTA.....	65
6.1. Avaliação econômica do processo	66
6.1.1. Custo dos materiais	78
6.1.2. Engenharia de detalhe.....	79
6.1.3. Inside Battey Limits (ISBL) e Offsite Costs (OSBL).....	79
6.1.4. Capital de Giro	80
6.1.5 Capital de investimento.....	80
6.1.6 Rentabilidade do projeto.....	81
6.1.7. Vendas	81
6.1.8 Custos.....	81
6.1.9 Valor Atualizado Líquido e Taxa Interna de Retorno.....	83
6.2. Avaliação de impacto ambiental.....	86
7. CONCLUSÕES	90
8. BIBLIOGRAFIA	91
APÊNDICE A – FOLHAS DE ESPECIFICAÇÃO	93
APÊNDICE B – BALANÇO MATERIAL.....	129

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Molécula da acetona (O'NEIL, 2006).	3
Figura 2. Bacilos de <i>C. acetobutylicum</i> (BARATELLA,2019).	4
Figura 3. Reação envolvida na produção de acetona via oxidação do cumeno (VELLASCO, 2011).	5
Figura 4. Reação envolvida na produção de acetona via oxidação do cumeno (VELLASCO, 2011).	5
Figura 5. Rota de síntese da acetona via desidrogenação do álcool isopropílico (IPA) (CHAUVEL, 1989; VELLASCO, 2011).	6
Figura 6. Aplicação global da acetona em 2022 (IHS MARKIT, 2022).	7
Figura 7. Mercado global da acetona em 2022 (IHS MARKIT, 2022).	8
Figura 8. Forma estrutural do isopropanol (O'NEIL, 2006).	8
Figura 9. Rota de síntese do isopropanol via hidratação indireta do propileno (IPA) (CHAUVEL, 1989; VELLASCO, 2011).	9
Figura 10. Rota de síntese do isopropanol via hidratação direta do propileno (IPA) ((CHAUVEL, 1989; VELLASCO, 2011).	9
Figura 11. Aplicação global do isopropanol em 2022 (IHS Markit, 2022).	10
Figura 12. Mercado global de isopropanol em 2022 (IHS Markit, 2022).	11
Figura 13. Diagrama simplificado da planta de produção da acetona a partir de isopropanol (IPA).	11
Figura 14. Esquema de um reator de leito fixo (FOGLER, 2009).	16
Figura 15. Esquema de um reator casco e tubo de leito fixo.	16
Figura 16. Fator de correção para configuração 1-1 (TURTON <i>et al.</i> , 2018).	20
Figura 17. Ilustração de uma bomba centrífuga e o seu funcionamento (Blog da Loxam Degraus).	23
Figura 18. Desenho esquemático usado para o projeto da bomba P-1101.	24
Figura 19. Desenho esquemático usado para o projeto da bomba P-1102.	24
Figura 20. Desenho esquemático usado para o projeto da bomba P-1103.	26
Figura 21. Desenho esquemático usado para o projeto da bomba P-1104.	26
Figura 22. Trocador de calor de tubo duplo (Apresentação em Power Point: Unidade 3.2 - Trocadores de Calor, 2022).	32
Figura 23. Trocador de calor de casco e tubo com cabeçote flutuante (Apresentação em Power Point: Unidade 3.2 - Trocadores de Calor, 2022).	33
Figura 24. Parâmetros para obtenção dos custos dos trocadores de calor (TOWLER e SINNOTT, 2013).	34
Figura 25. Esquema do projeto do trocador E-1101.	35
Figura 26. Esquema do projeto do trocador E-1102.	36
Figura 27. Esquema do projeto do trocador E-1103.	36
Figura 28. Esquema do projeto do trocador E-1108.	37
Figura 29. Esquema do projeto do trocador E-1104.	38
Figura 30. Esquema do projeto do trocador E-1105.	39

Figura 31. Esquema do projeto do trocador E-1106.....	41
Figura 32. Esquema do projeto do trocador E-1107.....	41
Figura 33. Esquema do vaso pulmão V-1103.	43
Figura 34. Razão geométrica de vasos pulmões (TOWLER e SINNOTT, 2013). ...	43
Figura 35. Tempos de <i>holdup time</i> e <i>surge time</i> (TOWLER e SINNOTT, 2013).	44
Figura 36. Parâmetros para obtenção de custo dos vasos (TOWLER. e SINNOTT, 2013).....	46
Figura 37. Separador vertical líquido-vapor (TOWLER e SINNOTT, 2013).	49
Figura 38. Esquema do vaso separador V-1101.	49
Figura 39. Fator de instalação (TOWLER e SINNOTT, 2013).....	51
Figura 40. Esquema da torre T-1102.....	52
Figura 41. Altura para o nível de inferior de líquido (TOWLER e SINNOTT, 2013). 54	
Figura 42. Parâmetros para obtenção de custo dos pratos (TOWLER e SINNOTT, 2013).....	57
Figura 43. Custo da coluna T-1102 <i>versus</i> número de pratos.....	58
Figura 44. Altura entre os anéis (TOWLER e SINNOTT, 2013).	59
Figura 45. Custo do equipamento adquirido para equipamentos comuns da fábrica.	59
Figura 46. Diagrama mecânico (P&ID) da torre para destilação de acetona (T-1102).	65
Figura 47. Gráfico do fluxo de caixa.....	86
Figura 48. Sistema representado como uma caixa preta com correntes de entrada e saída.....	130

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Parâmetros reacionais (TURTON <i>et al.</i> , 2018).	12
Tabela 2. Dados referentes ao catalisador de Cu-SiO ₂ (GONÇALVES e MINGUITA, 2017).	17
Tabela 3. Temperaturas no casco e nos tubos do reator.	19
Tabela 4. Simulação para determinar L/D ótimo.	21
Tabela 5. Parâmetros característicos e custo do reator R-1101.	22
Tabela 6. Parâmetros característicos das bombas P-1101 e P-1102.	25
Tabela 7. Valores dos parâmetros das correntes para o projeto da bomba P-1103.	26
Tabela 8. Valores dos parâmetros das correntes para o projeto da bomba P-1104.	27
Tabela 9. Parâmetros característicos das bombas P-1103 e P-1104.	29
Tabela 10. Custos das quatro bombas.	30
Tabela 11. Custos das bombas duplicadas.	31
Tabela 12. Parâmetros dos trocadores de calor.	37
Tabela 13. Parâmetros obtidos dos trocadores de calor para otimização da primeira coluna.	39
Tabela 14. Custos totais obtidos dos trocadores de calor para otimização da primeira coluna.	40
Tabela 15. Parâmetros obtidos para os trocadores de calor da segunda coluna.	42
Tabela 16. Parâmetros característicos para o vaso V-1101.	47
Tabela 17. Parâmetros característicos para o vaso V-1103.	47
Tabela 18. Parâmetros característicos para o vaso V-1104.	47
Tabela 19. Otimização do vaso V-1101.	50
Tabela 20. Parâmetros característicos para a T-1102.	57
Tabela 21. Parâmetros característicos para a T-1103.	58
Tabela 22. Listagem de instrumentos.	61
Tabela 23. Listagem de controladores.	62
Tabela 24. Listagem de alarmes.	62
Tabela 25. Listagem das válvulas de segurança.	63
Tabela 26. Listagem de intertravamentos.	64
Tabela 27. Dados de calor trocador e custo para trocadores de calor.	69
Tabela 28. Valores do custo de água de refrigeração para trocadores de calor.	70
Tabela 29. Valores do custo de vapor de caldeira para trocadores de calor.	70
Tabela 30. Valores de referência para cálculo dos custos dos trocadores.	71
Tabela 31. Consumo de água de refrigeração do trocador E-1104.	72
Tabela 32. Consumo de vapor de caldeira do trocador E-1105.	72
Tabela 33. Consumo de utilidades dos trocadores E-1106 e E-1107.	73
Tabela 34. Gasto de utilidades das bombas.	73
Tabela 35. Relação dos custos de equipamento e de operação.	74
Tabela 36. Otimização dos pratos.	76

Tabela 37. Custos de equipamento.	76
Tabela 38. Custos de equipamento e material.	78
Tabela 39. Divisão dos custos de equipamento.	78
Tabela 40. Custos de engenharia de detalhe.	79
Tabela 41. Relação para determinar o imobilizado.....	80
Tabela 42. Capital de investimento.....	80
Tabela 43. Custos de venda.	81
Tabela 44. Custos de matéria prima.	82
Tabela 45. Relação de custos.	82
Tabela 46. Custos.....	83
Tabela 47. Relação para o fluxo de caixa.....	84
Tabela 48. Fluxo de caixa.....	85

LISTA DE ABREVIATURAS, SIGLAS E SÍMBOLOS

\dot{Q}_{P-1103}	Vazão volumétrica da bomba P-1103
\dot{Q}_{P-1104}	Vazão volumétrica da bomba P-1104
$\dot{Q}_{refluxo, torre 1}$	Vazão volumétrica do refluxo da torre de destilação T-1102
$\dot{Q}_{refluxo, torre 2}$	Vazão volumétrica do refluxo da torre de destilação T-1103
\dot{m}'	Vazão mássica de vapor de água
\dot{Q}	Vazão mássica
\dot{Q}	Vazão volumétrica
$\dot{Q}_{acetona}$	Vazão volumétrica de acetona
$\dot{Q}_{refluxo}$	Vazão volumétrica do refluxo
$\dot{Q}_{reciclo}$	Vazão volumétrica do reciclo
\dot{m}	Consumo anual de matéria
η_h	Eficiência hidráulica
η_e	Eficiência elétrica
ρ_{H_2O}	Densidade da água
ρ_G	Densidade da fase vapor
ρ_L	Densidade da fase líquida
$\rho_{aparente}$	Densidade aparente do catalisador
ρ_{bulk}	Densidade bulk do catalisador
ρ_{fluido}	Densidade do fluido que passa pela bomba
$\rho_{refluxo}$	Densidade do fluido de refluxo na torre
A	Área exposta total dos tubos
a, b	Constantes tabeladas por equipamento
A_{vaso}	Área do vaso
C	Custo
$C_{(ano)}$	Custo dos equipamentos no ano de referência
C_A	Concentração do componente A
$C_{bomba duplicada}$	Custo total de cada bomba duplicada
C_{bomba}	Custo da bomba
$CEPSI_{(ano)}$	Chemical Engineering Plant Cost Index no ano de referência

C_{estator}	Custo do estator
C_{IPA}	Concentração de isopropanol
CO_2	Gás carbônico
COP26	26ª Conferência das Nações Unidas sobre a mudança no clima
C_p	Calor específico
C_{pratos}	Custo dos pratos
C_{rotor}	Custo do rotor
$C_{\text{t,bomba}}$	Custo total da bomba
CW	Água de resfriamento
C_w	Fator de complexidade
D	Diâmetro dos tubos do reator
D_m	Diâmetro médio
D_p	Diâmetro da partícula de catalisador
D_{real}	Diâmetro real do vaso
D_v ou D_{vaso}	Diâmetro do vaso
E	Eficiência de solda
e	Espessura da torre
E_a	Energia de ativação da reação
f	Fator de Hand
F_{A0}	Vazão molar inicial do componente A
FAL	Alarme de vazão baixa
FC	Controlador de vazão
FI	Indicador de vazão
F_n	Fluxo de caixa corrigido no ano n
F_{sc}	Fluxo de caixa sem correção
F_t	Fator de correção
g	Aceleração da gravidade
H	Altura da torre
h'	Coeficiente de transferência de calor do casco
h''	Coeficiente de transferência de calor dos tubos
h	Elevação dos vasos e torres em relação ao chão
H_{corpo}	Altura do corpo da torre

H_{fundo}	Altura do fundo da torre
H_L	Altura de líquido no vaso
$h_{\text{liq,vaso}}$	Nível de líquido dentro do vaso pulmão
HLL	Nível máximo de líquido
HPS	Vapor de aquecimento de alta pressão
H_{total}	Altura total da torre
IPA	Álcool isopropílico / Isopropanol
ISBL	Limites internos da bateria
K	Constante da equação empírica de York
k_0	Constante cinética da reação
K_j	Juros de referência
L	Comprimento dos tubos do reator
LAH	Alarme de nível alto
LAL	Alarme de nível baixo
LC	Controlador de nível
L/D	Razão de refluxo
L_{eq}	Consumo volumétrico anual de um equipamento
LI	Indicador de nível
LLL	Nível inferior de líquido
LPS	Vapor de aquecimento de baixa pressão
L_{vaso}	Comprimento do vaso
MIBK	Metil-isobutilcetona
MMA	Metacrilato de metila
n	Parâmetro característico do equipamento
NLL	Nível normal de líquido
NP ou np	Número de pratos
N_{tubos}	Números de tubo do reator
ODS	Objetivos de Desenvolvimento Sustentável
OSBL	Limites externos da bateria
P&ID	Diagrama de tubulação e instrumentação
P_{adm}	Pressão de admissão da bomba
PAH	Alarme de pressão alta

PAHH	Alarme de pressão muito alta
PBR	Reator de leito fixo
PC	Controlador de pressão
PI	Indicador de pressão
P_j	Pressão de projeto
P_{imp}	Pressão na impulsão da bomba
pKa	Constante de dissociação ácida
Pot_{bomba}	Potência consumida pela bomba
PPMA	plásticos acrílicos polimetilmetacrilato
$P_{r, vaso}$	Pressão relativa no vaso pulmão
$P_{shut-off}$	Nível de pressão máximo da bomba
$P_{topo, torre}$	Pressão no topo da torre
$P_{válvula}$	Pressão da válvula
Q	Quantidade de energia
$Q_{destilado}$	Vazão volumétrica de destilado da torre
Q_{duty}	Calor
Q_{ee}	Carga energética entregue
Q_L	Vazão de líquido no vaso
Q_{tubo}	Vazão volumétrica nos tubos
Q_{vliq}	Vazão volumétrica de líquido que desce pela seção de esgotamento
$Q_{vmáx}$	Vazão volumétrica máxima
R	Constante Ideal do Gases
R, P	Parâmetros para o método LMTD de fator de correção
-rA	Taxa de reação em relação ao componente A
Re	Número adimensional de Reynolds
RW	Água de refrigeração
S	Parâmetro tabelado por equipamento em unidades específicas
SC	Sobre espessura por corrosão
$S_{estator}$	Parâmetro correspondente à vazão volumétrica da bomba
S_{min}	Seção transversal circular mínima
S_{real}	Seção transversal circular real
S_{rotor}	Parâmetro correspondente à potência consumida da bomba

S_t	Área transversal de 1 tubo
S_{ten}	Tensão máxima que um material suporta
T	Temperatura
T_1'	Temperatura de entrada do fluido de aquecimento no casco do reator
T_1''	Temperatura de entrada nos tubos do reator
T_2'	Temperatura de saída do fluido de aquecimento no casco do reator
T_2''	Temperatura de saída nos tubos do reator
TAH	Alarme de temperatura alta
TAHH	Alarme de temperatura muito alta
TAL	Alarme de temperatura baixa
TC	Controlador de temperatura
TI	Indicador de temperatura
t_r	Tempo de retenção de um vaso
TRI	Taxa interna de retorno
U	Coefficiente de transferência de calor
U_{min}	Coefficiente de transferência de calor mínimo
v	Velocidade de escoamento do fluido
V	Volume do reator
V_L	Volume de líquido no vaso
VLA	Valor atualizado líquido
v_{lim}	Velocidade limite
V_{total}	Volume total do vaso
w'	Consumo anual de energia
W	Massa de catalisador
W_{vaso}	Massa total de um vaso
x_A	Conversão do componente A
ΔP_{bomba}	Diferença de pressão das correntes à montante e à jusante da bomba
ΔT_{ml}	Temperatura média logarítmica
ΔP	Perda de carga
ΔT	Diferença de temperatura
ϕ	Esfericidade da partícula
λ	Calor latente de vaporização

μ	Viscosidade do fluido
ρ	Densidade do fluido na entrada do reator
ε	Porosidade do catalisador

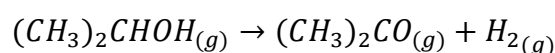
1. INTRODUÇÃO E OBJETIVOS

A acetona é uma substância amplamente empregada na indústria química para produção de outros compostos, tais como: metacrilato de metila (MMA), metil-isobutilcetona (MIBK) e bisfenol A, cujas principais aplicações envolvem: a obtenção de plásticos de policarbonato e resinas epóxi, presentes na constituição desde garrafas plásticas até automóveis e do acrílico; a síntese de inseticidas, defensivos agrícolas, produtos farmacêuticos e agentes flavorizantes; a fabricação de tintas, vernizes, explosivos, entorpecentes, esmaltes e como principal constituinte de produtos removedores de esmaltes. Ainda é utilizada como agente estabilizante do acetileno, uma vez que este gás é transportado de forma segura apenas quando dissolvido em acetona em cilindros de aço (CUNHA, 2019; LLACTA *et al.*, 2015; MANGILI *et al.*, 2016).

As principais rotas de produção da acetona são: a oxidação do cumeno, a oxidação do propileno e a desidrogenação do álcool isopropílico. A oxidação do cumeno é a rota mais comum na indústria global, no entanto, tem como subproduto o benzeno, que diminui a pureza da acetona e aumenta os custos de produção na etapa de separação, além de ser carcinogênico.

A oxidação do propileno tem como desvantagem apresentar baixa conversão da acetona e requerer reagentes de alta pureza. E a desidrogenação do álcool isopropílico apresenta como vantagem a obtenção de uma acetona de alta pureza com elevada taxa de conversão, além de não apresentar subprodutos aromáticos prejudiciais à saúde. Tal via de produção tem como produto secundário o hidrogênio, empregado frequentemente na síntese da amônia, em processos nas refinarias e no tratamento do carvão. Neste trabalho, optou-se pela abordagem da rota de desidrogenação do álcool isopropílico, a qual oferece resultados atrativos com baixo custo de produção (CUNHA, 2019; LLACTA *et al.*, 2015; MANGILI *et al.*, 2016).

A conversão de isopropanol em acetona gera gás hidrogênio como subproduto, representado na reação a seguir (GONÇALVES e MINGUITA, 2017).



O hidrogênio é um elemento simples e abundante na natureza, porém muito difícil de ser encontrado sozinho devido a sua elevada reatividade. É chamado de hidrogênio cinza quando gerado a partir do gás natural ou metano, com menores emissões que o hidrogênio preto e marrom, produzido pelo carvão preto e marrom, respectivamente (CAMPOS; LEÃO e AMORIM, 2021). Por ser possível o seu aproveitamento em outros processos e ser visto atualmente como uma fonte potencial de energia, agrega vantagens econômicas ao processo (VARGAS *et al.*, 2014).

Com base nas premissas descritas anteriormente, o presente projeto tem como objetivo dimensionar uma planta de produção de acetona com uma capacidade de 16115,84 toneladas anuais. Para alcançar este objetivo final, cumpriu-se os seguintes objetivos parciais:

- i) Realização dos balanços de massa da unidade;
- ii) Dimensionamento dos equipamentos de operação requeridos;
- iii) Indicação dos sistemas de instrumentação e controle, tal como os elementos de segurança da planta;
- iv) Realização do diagrama P&ID da unidade T-1102, torre de destilação fracionada;
- v) Análise de viabilidade econômica do processo;
- vi) Estudo preliminar dos impactos ambientais da planta.

2. REFERENCIAL TEÓRICO

Esta seção tem como objetivo contextualizar tópicos relevantes para a compreensão do presente estudo. A seguir, serão apresentados revisões e conceitos para o produto de interesse, a acetona e a matéria-prima base para sua síntese, o isopropanol.

2.1. Acetona

A acetona é um composto orgânico de nomenclatura oficial 2-propanona, cuja fórmula estrutural está representada na Figura 1, constituindo a cetona mais conhecida. É um líquido incolor, inflamável, volátil, com odor ligeiramente pungente e pouco aromático. É miscível em todas as proporções de água e em solventes orgânicos como éter, metanol, álcool etílico e ésteres. Tem peso molecular de 58,08 g/mol, ponto de fusão de -94°C , ponto de ebulição de $56,5^{\circ}\text{C}$, ponto de fulgor de -18°C , pKa de 24,2 e sua densidade, mensurada a temperatura ambiente (25°C), é igual a 0,788 kg/L (O'NEIL, 2006).

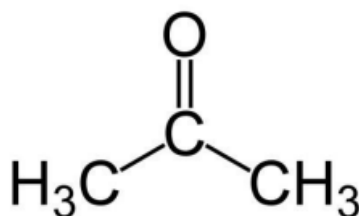


Figura 1. Molécula da acetona (O'NEIL, 2006).

Tal composto foi sintetizado pela primeira vez em 1595, a partir da destilação sob baixa pressão do acetato de chumbo por Andreas Libavius (químico alemão), processo conhecido como “*dry distillation*”. No entanto, sua fórmula molecular só foi corretamente determinada, em 1832, por Liebig e Dumas. A produção industrial da acetona teve início na Primeira Guerra Mundial, sendo factível sua realização devido ao desenvolvimento de um processo fermentativo a partir de carboidratos, desenvolvido por Chaim Weizmann, um químico russo. Em tal processo, Weizmann

empregou uma bactéria ainda desconhecida, que foi identificada posteriormente como sendo a *Clostridium acetobutylicum* (Figura 2). (Luyben,2011; Baratella,2019)



Figura 2. Bacilos de *C. acetobutylicum* (BARATELLA,2019).

Segundo GONÇALVES e MINGUITA (2017), existem diversas formas de produzir acetona entre elas:

- i) Oxidação do cumeno, mais conhecido por processo Hock;
- ii) Desidrogenação do 2-propanol;
- iii) Oxidação do 2-propanol;
- iv) Desidrogenação do álcool isopropílico (IPA);
- v) Oxidação catalítica do álcool isopropílico;
- vi) Oxidação de hidrocarbonetos, como a oxidação do propeno;
- vii) Oxidação do para-di-isopropil benzeno;
- viii) Processo para obtenção de óxido de propileno por oxirano (acetona é um subproduto);
- ix) Fermentação de biomassa.

Atualmente, parte majoritária da produção industrial da acetona é feita partir do cumeno (Figura 3) desenvolvido, em 1944, por Hock e Lang (VELLASCO *et al.*, 2011). Neste processo, o benzeno reage com o propileno (reação de alquilação) na presença de ácido fosfórico como catalisador (Figura 4).

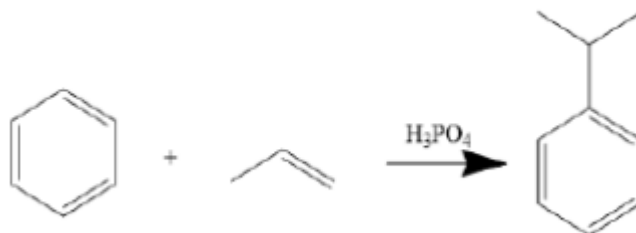


Figura 3. Reação envolvida na produção de acetona via oxidação do cumeno (VELLASCO, 2011).

Em seguida, o isopropilbenzeno - conhecido como cumeno - formado é oxidado pelo oxigênio do ar, gerando o hidroperóxido de cumila, que em presença de ácido sulfúrico é clivado à acetona e fenol (Figura 4).

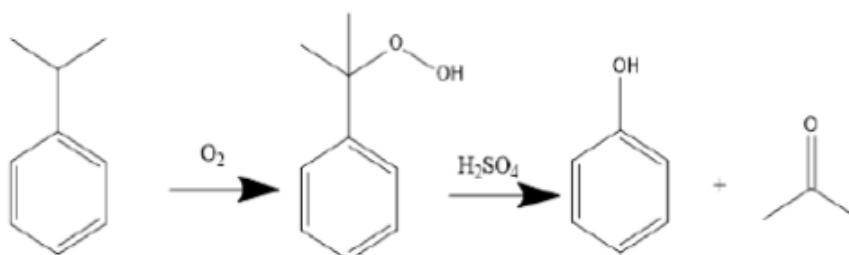


Figura 4. Reação envolvida na produção de acetona via oxidação do cumeno (VELLASCO, 2011).

Um aspecto curioso deste processo é que sua finalidade principal é a obtenção do fenol, cujas aplicações incluem a produção de fármacos, resinas e corantes. No Brasil, as principais empresas produtoras de acetona são a Rhodia (SP) e a Quiminvest (RJ), sendo adeptas desta via de produção. No entanto, segundo CHAUVEL (1989) e VELLASCO (2011), o processo Hock vem sendo substituído pela desidrogenação do álcool isopropílico (IPA). A partir dessa rota de síntese o processo pode ser realizado em fase líquida ou em fase gasosa. Entretanto, para os casos supracitados, além da formação da acetona há a geração de gás hidrogênio conforme demonstrado na Figura 5.



Figura 5. Rota de síntese da acetona via deshidrogenação do álcool isopropílico (IPA) (CHAUVEL, 1989; VELLASCO, 2011).

Em fase líquida, para que a reação ocorra a temperatura de 150°C é necessário um catalisador, o níquel de Raney. Essa situação apresenta-se mais vantajosa dada a pureza dos produtos e o rendimento de 98% obtido. Por outro lado, para que a reação se processe em fase gasosa, a temperatura de operação requerida pode alcançar valores entre 300°C e 400°C, sendo comumente utilizados catalisadores de níquel ou cobre. Uma desvantagem desta fase é que o rendimento permanece em, aproximadamente, 90% em consequência do controle da temperatura ideal, sendo necessário o uso de três colunas para fazer a separação da mistura formada com o álcool isopropílico, acetona, gás hidrogênio e água residual (CHAUVEL, 1989; VELLASCO, 2011).

2.2. Aplicações e mercado da acetona

A acetona é muito aplicada na produção de metacrilato de metila (MMA), possuindo sua maior aplicação na produção de plásticos acrílicos polimetilmetacrilato (PMMA). Tal composto é amplamente utilizado em vários procedimentos médicos, odontológicos e de substituição de articulações por meio de resinas e adesivos. É aplicado, também, no ramo da construção civil em moldagens, em compósitos de superfície mineral e revestimentos. Além disso, o MMA é usado na indústria automotiva para produção de vidros automáticos e para revestimentos externos, visto que é resistente às intempéries e protege contra arranhões. Por sua vez, o bisfenol A constitui um composto relevante para a geração de resinas de plásticos e resinas

epóxi de policarbonato, que são empregados em diversas outras aplicações. Como exemplo, o policarbonato é utilizado em lentes de óculos, equipamentos médicos, garrafas de água, computadores, telefones celulares e outros equipamentos comerciais. O MMA e o bisfenol A ocupam, respectivamente, a primeira e segunda posição em relação a demanda global de acetona como pode ser visto na Figura 6 (IHS MARKIT, 2022) e (MORDOR INTELIGENCE, 2022).

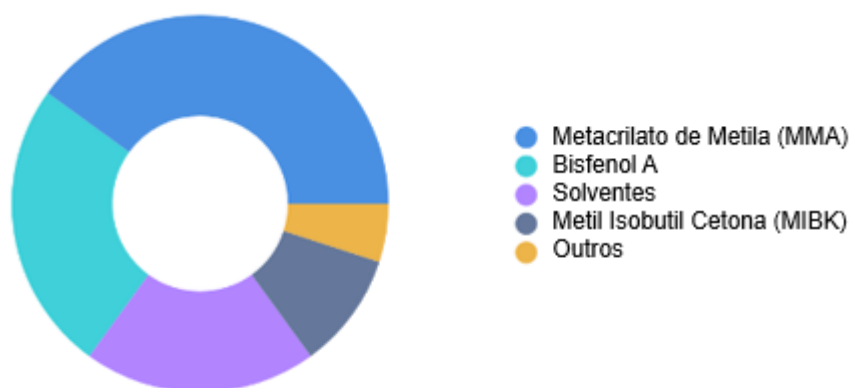


Figura 6. Aplicação global da acetona em 2022 (IHS MARKIT, 2022).

Na Figura 7, observa-se que a região da Ásia-Pacífico, representada principalmente pela China, lidera o consumo mundial de acetona, seguido dos Estados Unidos e Europa Ocidental. Cabe destacar que a indústria chinesa ocupa o primeiro lugar dado que tem a maior base de produção de eletrônicos do mundo. Além disso, possui crescente investimento em setores como construção, cuidados pessoais e solventes com um grande mercado consumidor. Em 2022, o mercado global de derivados de acetona foi orçado em US\$ 11,2 bilhões e deve progredir de forma constante a uma taxa de 5,8%a.a. para atingir uma avaliação de mercado de US\$ 19,9 bilhões até o final de 2032 (IHS MARKIT, 2022) e (MORDOR INTELIGENCE, 2022).



Figura 7. Mercado global da acetona em 2022 (IHS MARKIT, 2022).

2.3. Isopropanol

O isopropanol (IPA) também conhecido como álcool isopropílico, 2-propanol ou pelo nome oficial, propan-2-ol é um líquido claro, incolor e volátil. A Figura 8 apresenta sua forma estrutural. Este composto possui odor característico de álcoois, além de ser inflamável e explosivo. Ademais, possui massa molecular de 60,1 g/mol, densidade de 0,785 kg/L a temperatura ambiente (25°C), ponto de fusão igual a -90°C, ponto de ebulição de 82°C, sendo miscível em água, outros álcoois, clorofórmio, éter, glicerina, benzeno e acetona (O'NEIL, 2006).

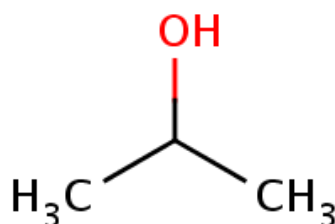


Figura 8. Forma estrutural do isopropanol (O'NEIL, 2006).

O isopropanol foi o primeiro álcool sintético comercial. Os químicos da Standard Oil Company (posteriormente chamada de Exxon Mobil), localizada em Nova Jersey, o produziram pela primeira vez no ano de 1920, enquanto estudavam os subprodutos do petróleo. Segundo CHAUVEL (1989) e VELLASCO (2011), atualmente existem duas rotas para produção de IPA. A primeira e mais antiga rota,

se baseia na hidratação indireta do propileno de refinaria. Inicialmente é adicionado ácido sulfúrico para gerar sulfato de isopropilo, este então é hidrolisado com vapor de água para formar ácido sulfúrico e IPA (Figura 9). Ao final, visando alcançar a pureza desejada o IPA bruto passa por um processo de destilação.

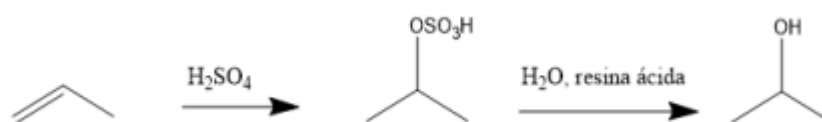


Figura 9. Rota de síntese do isopropanol via hidratação indireta do propileno (IPA) (CHAUVEL, 1989; VELLASCO, 2011).

A segunda, e mais moderna rota, é a hidratação direta do propileno de elevada pureza (90- 99%). Tal processo ocorre em uma única etapa e não se faz necessário o uso do ácido sulfúrico (Figura 10). A mistura líquido-vapor de água e propileno é aquecida e colocada sob pressão de forma a ser inserida em um reator de fluxo de gotejamento com resinas de poliestireno CHAUVEL (1989) e VELLASCO (2011).

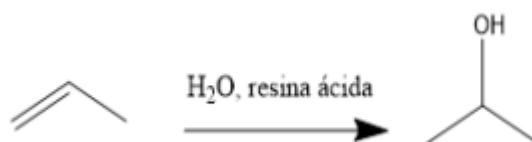


Figura 10. Rota de síntese do isopropanol via hidratação direta do propileno (IPA) ((CHAUVEL, 1989; VELLASCO, 2011).

2.4. Aplicações e mercado do isopropanol

O isopropanol também é um produto versátil sendo aplicado em diversos setores, tais como: industriais, cosméticos, reagentes, eletrônicos e farmacêuticos. A nível industrial é usado como solvente e para limpeza, assim como matéria prima para outros compostos. Sua aplicação direta envolve: revestimentos de superfície, tintas, formulações de pesticidas, solventes de processamento na produção de resinas e produtos de limpeza. A categoria cosmética inclui produtos de higiene pessoal e álcoois. A nível farmacêutico

constitui solvente para a fabricação de drogas e algumas formulações medicinais. No setor eletrônico, é usado como produto de limpeza de placas de circuito impresso, monitores de tela plana, dentre outros dispositivos (IHS MARKIT, 2015) e (MORDOR INTELLIGENCE, 2022).

De acordo com a Figura 11, é possível observar que a indústria farmacêutica e cosmética ocupa, respectivamente, a primeira e segunda posição em relação a demanda global de isopropanol.

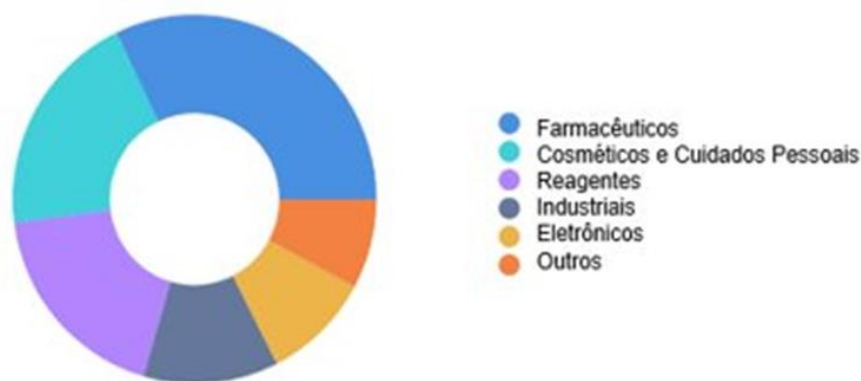


Figura 11. Aplicação global do isopropanol em 2022 (IHS Markit, 2022).

Tal como observado para a produção de acetona, verifica-se que a região da Ásia-Pacífico, representada principalmente pela China, lidera o consumo mundial de acetona, seguido dos Estados Unidos e Europa Ocidental (Figura 12). Fatores que justificam este cenário são: o crescimento robusto do setor de construção civil, investimentos na indústria química, aumento da demanda por produtos cosméticos e aumento de produtos farmacêuticos. Em 2022, o mercado global de isopropanol foi orçado em US\$ 3,2 bilhões e deve progredir de forma constante a uma taxa de 2,5%a.a. para atingir uma avaliação de mercado de US\$ 4,8 bilhões até o final de 2032 (IHS MARKIT, 2022) e (MORDOR INTELLIGENCE, 2022).

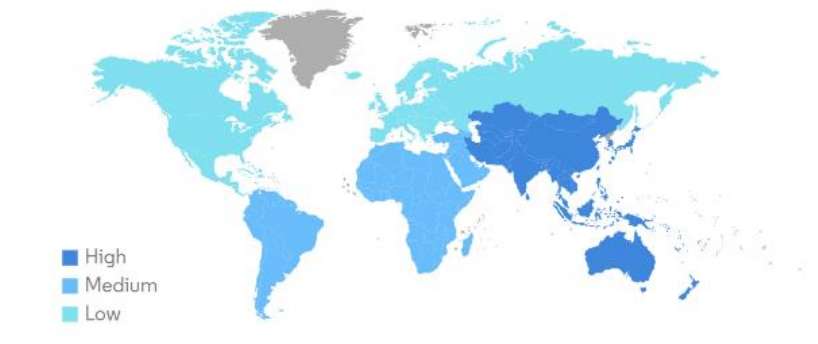


Figura 12. Mercado global de isopropanol em 2022 (IHS Markit, 2022).

3. DESCRIÇÃO DO CENÁRIO

Como discutido na seção anterior, existe mais de uma rota para produção de acetona. Neste trabalho, a rota de estudo escolhida foi a de desidrogenação do isopropanol cujos produtos de reação são acetona e hidrogênio. Para o tanto, simulou-se uma planta adaptada de Turton *et al.* (2003), cujo fluxograma do processo pode ser visto na Figura 13 e os detalhes de cada corrente podem ser vistos no Apêndice A.

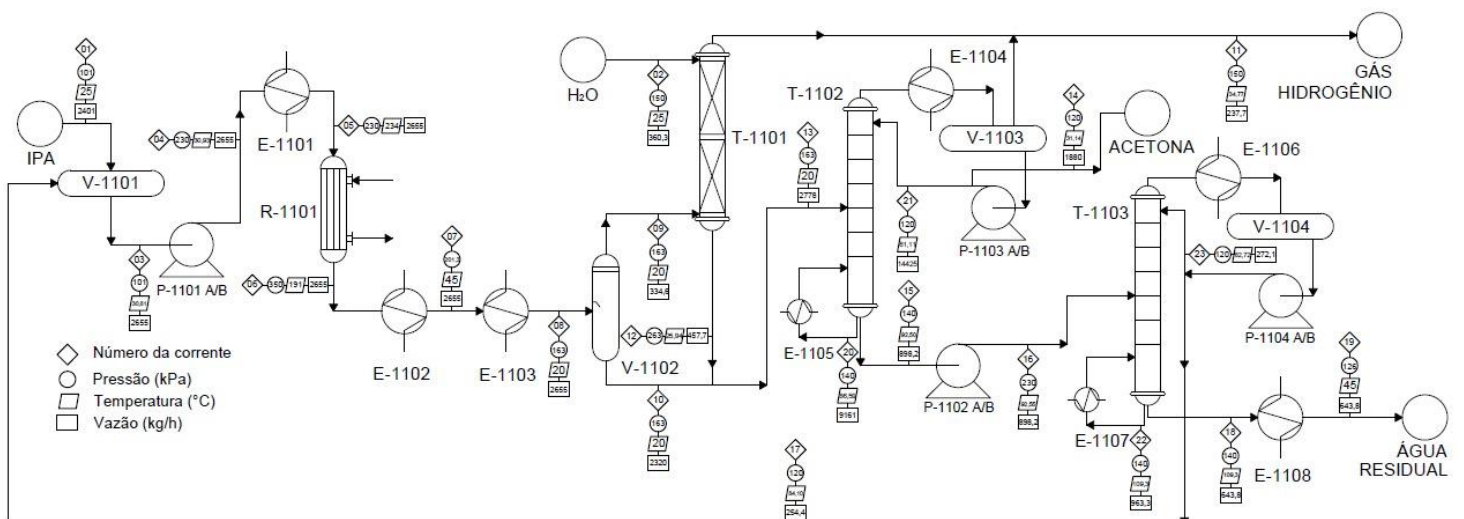


Figura 13. Diagrama simplificado da planta de produção da acetona a partir de isopropanol (IPA).

Para melhor compreensão da planta, ela foi dividida nas seguintes seções: seção de alimentação, de reação e de separação.

i) Seção de alimentação

A alimentação com vazão de 2401 kg/h, é composta pela mistura de isopropanol (88 %) e água (12 %), a 101 kPa e 25°C. Essa corrente é misturada com a corrente de reciclo com vazão de 254,4 kg/h contendo uma mistura de isopropanol não-reagido e água a 120 kPa e 84,10°C, oriunda da coluna de IPA (T-1103). A mistura é pressurizada pela bomba P-1101A/B de 101 kPa para 230 kPa e, em seguida, é vaporizada no aquecedor E-1101, tendo sua temperatura elevada de 30,93°C para 234°C para então ser conduzida ao reator R-1101.

ii) Seção de cinética da reação

A reação da produção da acetona pela desidrogenação do álcool isopropílico, é endotérmica, sendo sua entalpia padrão de 62,9 *kJ/mol*. A reação ocorre sobre um catalisador, em fase gasosa e é cineticamente controlada. Sua cinética é de primeira ordem em relação a concentração do IPA (Equação 1):

$$-r_A = C_A k_o e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (1)$$

Os seus parâmetros, como energia de ativação e constante cinética estão dispostos na Tabela 1.

Tabela 1. Parâmetros reacionais (TURTON *et al.*, 2018).

Reação	Parâmetros		
	Energia de ativação E_a (<i>kJ/kmol</i>)	Constante cinética k_o (<i>s⁻¹</i>)	Concentração de isopropanol (<i>kmol/m³</i>)



A reação ocorre em um reator tubular de leito fixo (R-1101), com fluido de aquecimento de sal fundido e conversão desejada de 90%. Para a simulação, os tubos são preenchidos com catalisador esférico e as características mais detalhadas desse material serão demonstradas durante o projeto do reator.

iii) Seção de separação

O efluente do reator com vazão de 2655 kg/h, contém 61% de acetona, 23,9% de hidrogênio, 7% de isopropanol e 8,1% de água a 191 kPa e 350°C. Essa corrente é conduzida ao refrigerador E-1102, onde sua temperatura é reduzida para 45°C e em seguida, levada ao refrigerador E-1103, onde sua temperatura é reduzida para 20°C. Após esta etapa, o efluente é encaminhado ao vaso separador (V-1102), onde a corrente resultante de vapor com vazão de 334,6 kg/h contendo 23,6% de acetona, 75% de hidrogênio, 0,6% de água e 0,7% de isopropanol, é alimentada no último prato da coluna de absorção (T-1101). Essa coluna, de 0,33 m de diâmetro e 2,5 m de recheio, é também alimentada no primeiro prato por uma corrente de água tratada com vazão de 360,3 kg/h a 25°C e 150 kPa. O produto de topo com vazão de 237,7 kg/h contém 82,9% de hidrogênio, 2% de água, 14,9% de acetona e 0,01% de isopropanol a 34,77°C e 150kPa. O produto de fundo com vazão de 457,7 kg/h contendo 70,3% de água, 27,9% acetona, 1,9% isopropanol e a 25,94°C e 163kPa é misturado com a corrente líquida proveniente do vaso separador. A mistura resultante com vazão de 2778 kg/h a 20°C e 163kPa, é conduzida à coluna de destilação fracionada (T-1102).

A coluna T-1102 é composta por pratos de furos que irão promover uma melhor eficiência de separação entre os componentes, juntamente com uma corrente de refluxo. No caso da torre T-1102, ela é alimentada com uma corrente que possui acetona, álcool isopropílico e água. De forma que o produto de topo será uma corrente composta com 99,8% de acetona, 0,19 mol% de água e 0,01% de isopropanol a 60,2°C e 150 kPa. Os produtos de fundo apresentam a seguinte composição: água

(94,3 %) e isopropanol (5,7 %) a 93,2°C e 140 kPa tem sua pressão elevada para 205,7 kPa pela bomba P-1104A/B e é conduzida à coluna de IPA (T-1103).

Para a coluna T-1103, usará pratos de furos com vazão de refluxo. No entanto, a torre tem como produto de fundo água residual, enquanto que o produto de topo será o isopropanol que será usado para realimentar o processo produtivo.

4. PROJETO DA PLANTA

Para a construção da planta de produção de acetona é necessário caracterizar as correntes de processo como as de serviços, segundo modelo das folhas de especificação. Além de descrever os equipamentos: reator, torres de separação, vasos acumuladores, bombas e trocadores de calor presentes no processo produtivo, assim como os resultados obtidos para cada equipamento.

4.1. Correntes de processo

O diagrama de fluxo de processos do projeto está presente na figura 13. O álcool isopropílico (IPA), corrente 01, é inicialmente misturado com uma corrente de reciclo que contém a matéria prima, água e acetona proveniente de uma das torres de destilação (T-1103) em um vaso acumulador. Em seguida, essa mistura, corrente 03, é bombeada e a corrente 04 com pressão superior é enviada a um trocador de calor (E-1101) que irá vaporizar toda a mistura.

O vapor produzido, corrente 05, é enviado a um reator com leito fixo (R-1101) e transforma reagentes em produtos, corrente 06. Então, o fluxo de matéria segue para dois trocadores de calor (E-1102 e E-1103) para que sua temperatura diminua, dessa forma, a corrente 08 possui menor temperatura que a 07 e 06. O processo continua para que a corrente possa ter suas fases separadas em um vaso separador (V-1102). Assim que separadas, a fase vapor segue pela corrente 09 e líquida pela 10. A corrente 09 entra em uma torre de absorção (T-1103) juntamente com a água,

corrente 02, este processo é necessário para que uma maior quantidade de acetona seja recuperada ao final das etapas.

Assim, o fluxo de vapor que sai pelo topo da T-1103 é puramente gás hidrogênio, corrente 11, e o fluxo de líquido é misturado com a corrente 10. Essas correntes formam a corrente 13 que é a entrada para a primeira torre de destilação (T-1102) que é responsável por separar a mistura em acetona (99,9 mol%), na corrente 14, como produto de topo e uma combinação entre acetona e uma solução contendo álcool e água, na corrente 15, no fundo. Essa corrente é bombeada e adentra a torre de destilação (T-1103) que gera o produto de topo responsável pelo fluxo de reciclo, na corrente 17, rica em IPA e pobre em água e acetona, e, também, o produto de fundo, corrente 18, que é resfriado em um trocador de calor (E-1108) e é, finalmente, tratado, na corrente 19, como água residual.

4.2. Reator

O reator químico é um equipamento fundamental dentro de um processo, pois é nele que ocorrem as reações químicas de interesse. Os reatores podem ser em batelada, quando os reagentes permanecem no tanque durante um período de tempo ou com escoamento contínuo, quando operados em regime estacionário. Em geral, as equações de projeto para escoamento contínuo são dadas em função do volume do reator, V , com exceção do reator de leito fixo (PBR), que é dado em função da massa de catalisador, W (FOGLER, 2009).

O PBR é um reator tubular preenchido por partículas sólidas de catalisador (figura 14). Esse modelo é muito utilizado em reações heterogêneas de fase gasosa que necessitam do uso de catalisadores, como é o caso da reação de produção de acetona (FOGLER, 2009).

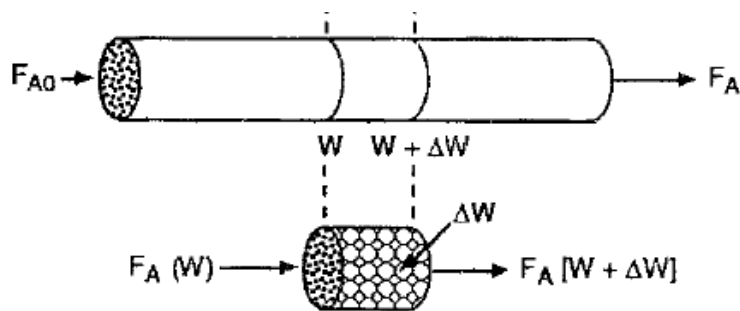


Figura 14. Esquema de um reator de leito fixo (FOGLER, 2009).

Entretanto, esse projeto envolve fatores da geometria do tubo, queda de pressão e área de transferência de calor, sendo necessário o uso de um reator mais complexo, como é o caso do reator casco e tubo de leito fixo. Este consiste em tubos preenchidos com partículas de catalisador e em transferência de calor na parte interna do equipamento. O reator é aquecido a partir de um fluido de aquecimento, que circula no casco com operação semelhante a um trocador de calor (OGATA *et al.*, 2003).

O esquema do equipamento R-1101 pode ser visto na Figura 15. Lembrando que, para atender a demanda energética da reação, é necessário que o calor liberado pelo fluido seja maior que o calor requerido pela reação (FOGLER, 2009).

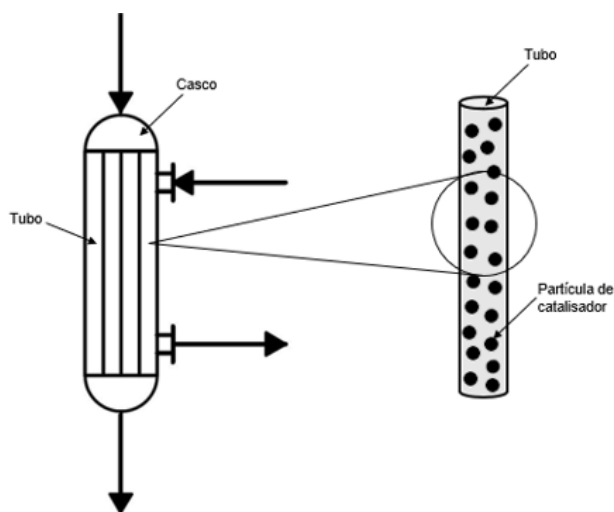


Figura 15. Esquema de um reator casco e tubo de leito fixo.

Luyben (2001) realizou um projeto semelhante para um sistema de reator tubular resfriado, onde considera o impacto da interação dos três fatores (geometria, queda de pressão e transferência de calor) no projeto econômico. Dessa forma, foi

feita uma adaptação de seu estudo para a produção de acetona a fim de realizar o projeto do reator que considere o tempo de residência da reação e atenda à demanda energética.

Inicialmente, foi fundamental definir o catalisador que será usado na planta, bem como suas características, como densidade, porosidade e área específica. De acordo com o estudo de Lokras, Deshpande e Kuloor (1970), o catalisador de cobre depositado em sílica (Cu-SiO₂) apresentou melhor desempenho para a reação de desidrogenação do álcool. Os estudos mostraram que esse catalisador possui atividade constante durante 24h na temperatura de 300 °C, o que evita a regeneração frequente ou troca de catalisador. A Tabela 2 traz algumas informações importantes sobre esse material.

Tabela 2. Dados referentes ao catalisador de Cu-SiO₂, com proporção 1:4 (GONÇALVES e MINGUITA, 2017)

Densidade aparente $\rho_{apar} (g/cm^3)$	Densidade bulk $\rho_{bulk} (g/cm^3)$	Porosidade ϵ	Diâmetro da partícula $D_p (mm)$	Área específica equivalente (cm^2/g)
2,4818	0,8750	0,65	0,2	310

Além disso, também foi determinada a temperatura e a pressão de projeto a partir dos dados de alimentação. Assim, foram adicionados 30 °C à temperatura de operação e 1,8 kg/cm² à pressão de operação, seguindo os critérios de engenharia.

Para estimar o volume V do reator, foi utilizada a equação de projeto de um reator de leito fixo ideal (Equação 2) com ajuda da equação cinética (Equação 3) para se atingir a conversão desejada de 90%. Como tem-se a hipótese de comportamento ideal, foi desconsiderada a presença de gradientes de concentração, temperatura e velocidade entre e dentro das partículas do leito.

$$\frac{V}{F_{Ao}} = \int_0^{x_A} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (2)$$

$$-r_A = C_A k_o e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (3)$$

Onde A representa o isopropanol, F_{A0} é a vazão molar, x_A é a conversão, $-r_A$ é a taxa volumétrica de consumo, C_A é a concentração, k_o é a constante cinética, E_a é a energia de ativação, R é a constante universal dos gases e T é a temperatura.

Também foi calculada a queda de pressão através da Equação de Ergun dada pela equação a seguir.

$$\Delta P(kPa) = L \left(\frac{150\mu v (1 - \varepsilon)^2}{\Phi^2 D_p^2 \varepsilon^3} + \frac{1,75\rho v^2 (1 - \varepsilon)}{\Phi D_p \varepsilon^3} \right) \quad (4)$$

Onde $\Delta P_{m\acute{a}x}$ é a perda de carga máxima igual a 25 kPa, D_p é o diâmetro da partícula, ε é a porosidade, Φ é a esfericidade da partícula igual a 1, μ é a viscosidade do fluido igual a $122,2 \times 10^{-4}$ cP, ρ é a densidade do fluido na entrada igual a $2,369 \text{ kg.m}^{-3}$ e v é a velocidade de escoamento do fluido.

Para o cálculo do custo, variou-se o valor do diâmetro e do comprimento do reator com ajuda do *software* Aspen HYSIS® a fim de encontrar a razão geométrica L/D ótimo, ou seja, aquela que gera menor custo de compra. Para isso, foi obedecida a demanda energética, na qual o calor liberado pelo fluido precisa ser maior que o calor requerido pela reação. Sendo assim, esse processo foi semelhante ao cálculo de custo de um trocador de calor casco e tubo, como visto no trabalho de Luyben (2001).

O primeiro passo é o cálculo da área A exposta total dos tubos, A , dada em função do número de tubos, N_{tubos} , diâmetro do tubo, D , e comprimento do tubo, L , como mostra a Equação (5).

$$A(m^2) = N_{tubos}(\pi DL) \quad (5)$$

Em seguida calcula-se a velocidade v em função de N_{tubos} , D e da vazão volumétrica Q_{tubo} .

$$v(m/s) = \frac{Q_{tubo}}{S_t} = \frac{Q_{tubo}}{N_{tubos} \frac{\pi D^2}{4}} \quad (6)$$

Conhecendo as temperaturas de entrada e saída do fluido de aquecimento no casco do reator, T_1' e T_2' , respectivamente, bem como as de entrada e saída nos tubos do reator, T_1'' e T_2'' , nessa ordem foi criada a Tabela 3. Com isso, foi possível calcular a temperatura média logarítmica, ΔT_{ml} , os parâmetros R e P , fator de correção F_t (deve ser maior que 0,75) e o número de Reynolds, Re . Para a estimativa do fator F_t , foi considerada a configuração 1-1 e calculado pelo método gráfico, Figura 16.

Tabela 3. Temperaturas no casco e nos tubos do reator.

T_1''	T_2''	T_1'	T_2'
234 °C	350 °C	407 °C	357 °C

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T_1' - T_2'') - (T_2' - T_1'')}{\ln \frac{(T_1' - T_2'')}{(T_2' - T_1'')}} \quad (7)$$

$$R = \frac{(T_1' - T_2')}{(T_2'' - T_1'')} \quad (8)$$

$$P = \frac{(T_2'' - T_1'')}{(T_1' - T_1'')} \quad (9)$$

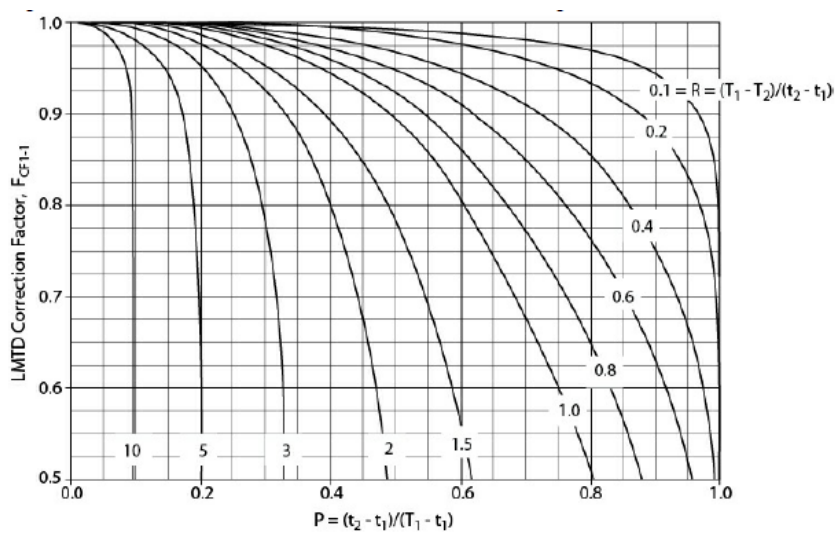


Figura 16. Fator de correção para configuração 1-1 (TURTON *et al.*, 2018).

$$Re = \frac{D_p v \rho}{\mu} \quad (10)$$

Assim, sabendo esses parâmetros e a taxa energética necessária para a reação Q_{duty} , é possível determinar o calor requerido U_{min} , como mostra a seguir.

$$U_{min} \left(\frac{kcal}{h^\circ C m^2} \right) = \frac{Q_{duty}}{F_t A \Delta T m l} \quad (11)$$

O cálculo do coeficiente de transferência de calor U liberado foi dado pela Equação (12), onde h' é com respeito ao fluido de aquecimento no casco e h'' é com respeito aos tubos.

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h'} + \frac{1}{h''} \quad (12)$$

Como o fluido de aquecimento utilizado no projeto é o sal fundido, foi utilizado um valor de $h' = 515,91 \frac{kcal}{h^\circ C m^2}$, encontrado na literatura (TOWLER; SINNOTT, 2013). Já h'' foi calculado com a Equação (13) a partir da correlação a seguir (LUYBEN, 2001).

$$h'' \left(\frac{kcal}{h^\circ C m^2} \right) = 0,01545 + \frac{0,6885 \times 10^{-6}}{D_p} Re \quad (13)$$

Substituindo h' e h'' na Equação (12), é possível comparar U com U_{min} e verificar se a demanda energética foi atendida para cada variação de diâmetro ou comprimento. A partir disso, é calculado o custo conforme a Equação (14) assumindo que o custo de compra desse reator é o dobro do custo de um trocador casco e tubo com mesma área de transferência de calor (LUYBEN, 2001; TOWLER e SINNOTT, 2013).

$$C(US\$) = 2(32000 + 70A_{exp}^{1,2}) \quad (14)$$

O custo de compra ainda precisa ser multiplicado pelo fator de correção do material de construção. Considerando um aço inoxidável 304, o fator vale 1,3 (TOWLER; SINNOTT, 2013).

Para o custo da instalação, multiplica-se o custo de compra pelo fator de Lang, que neste caso, é igual a 4 (TOWLER; SINNOTT, 2013). A Tabela 4 mostra a simulação com a variação da taxa L/D e a Tabela 5 os parâmetros característicos do reator com L/D ótimo, sendo que o comprimento escolhido foi de 20 ft, o mais comum.

Tabela 4. Simulação para determinar L/D ótimo.

N_{tubos}	L (m)	D (m)	L/D	$\Delta P(bar)$	$U_{min} \left(\frac{kcal}{h^\circ C m^2} \right)$	$U \left(\frac{kcal}{h^\circ C m^2} \right)$	C(US\$)
1817	6,096	0,0508	120	0,2500	4,59	30,76	1168140,14
808	6,096	0,0762	80	0,2500	6,89	22,02	966167,63
454	6,096	0,1016	60	0,2500	9,19	22,03	707573,78
291	6,096	0,1270	48	0,2500	11,47	22,01	561765,33
202	6,096	0,1524	40	0,2500	13,77	22,02	467533,99
114	6,096	0,2032	30	0,2500	18,31	21,99	356411,80
126	5,486	0,2032	27	0,1990	18,40	21,14	354687,16

Tabela 5. Parâmetros característicos e custo do reator R-1101.

Temperatura de projeto ($^{\circ}C$)	264
Pressão de projeto (kPa)	392,6
Volume do reator (m^3)	22,45
Tempo de residência (s)	79,2
Comprimento do tubo (m)	6,096
Diâmetro do tubo (m)	0,2032
Número de tubos	114
Perda de carga (bar)	0,25
Taxa de conversão (%)	90,94
Custo de compra (US\$)	356411,80
Custo de instalação (US\$)	1425647,20

4.3. Bombas

Nesta seção será apresentado o projeto das bombas centrífugas que compõem a planta química de produção de acetona a partir da desidrogenação do IPA. Tal projeto consiste em determinar as correntes na impulsão e na admissão de cada bomba, a potência consumida e o custo associado ao equipamento e à instalação.

De modo geral, as bombas são equipamentos responsáveis pelo escoamento dos fluidos de trabalho através das tubulações de uma instalação industrial. Uma bomba transforma a energia mecânica que recebe do motor de acionamento em energia hidráulica para o fluido de trabalho (FILHO, 2015).

O presente processo possui oito bombas centrífugas, fabricadas com aço carbono. São elas: P-1101 A/B, P-1102 A/B, P-1103 A/B e P-1104 A/B. As bombas centrífugas são o tipo mais simples de turbobombas e são as mais empregadas na prática, pois possuem baixo custo e ampla faixa de operação (MACINTYRE, 1997). Nelas, a movimentação do fluido é consequência da ação de forças que se

desenvolvem em sua própria massa devido a rotação de um eixo onde se acopla a um disco (impulsor ou rotor) dotado de pás (hélices ou palhetas). Sob ação da força centrífuga, o disco recebe o fluido em seu centro (sucção) e o expulsa pela periferia (descarga), como demonstra a Figura 17.

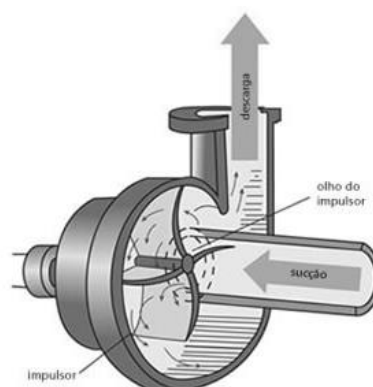


Figura 17. Ilustração de uma bomba centrífuga e o seu funcionamento (Blog da Loxam Degraus¹).

De acordo com Filho (2015), as bombas são consideradas a força motriz do escoamento. Logo, para que as necessidades da instalação sejam atendidas, é necessário que a vazão volumétrica, a altura e a potência da bomba sejam estabelecidas.

A bomba P-1101 é responsável pelo bombeamento da mistura de IPA, água e reciclo contida no vaso pulmão V-1101 que alimenta todo processo. A bomba P-1102 é responsável pela alimentação da segunda torre de destilação (T-1103). As bombas P-1103 e P-1104 são responsáveis pelo refluxo das torres de destilação 1 (T-1102) e 2 (T-1103), respectivamente. Além disso, a bomba P-1103 bombeia o produto de topo da torre de destilação (T-1102) (a acetona, que é o produto de interesse desse processo) e a bomba P-1104 retorna a mistura de IPA e água que não foi convertida no processo de destilação da torre 2 para o início do processo, ou seja, é responsável pelo reciclo.

¹ Disponível em: <<https://degraus.com.br/entenda-o-funcionamento-de-uma-bomba-centrifuga>>. Acesso em: 25 set. 2022.

4.3.1. Projeto das bombas P-1101 e P-1102

As Figuras 18 e 19 apresentam os desenhos esquemáticos das bombas P-1101 e P-1102, bem como a vazão e a densidade das correntes envolvidas e as pressões na admissão (à jusante) e na impulsão (à montante) de cada bomba.

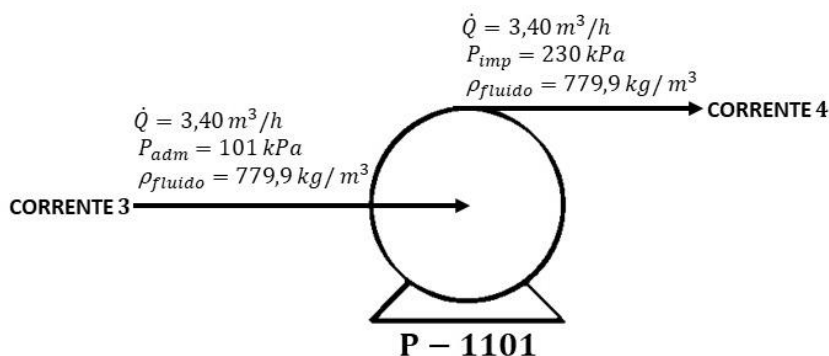


Figura 18. Desenho esquemático usado para o projeto da bomba P-1101.

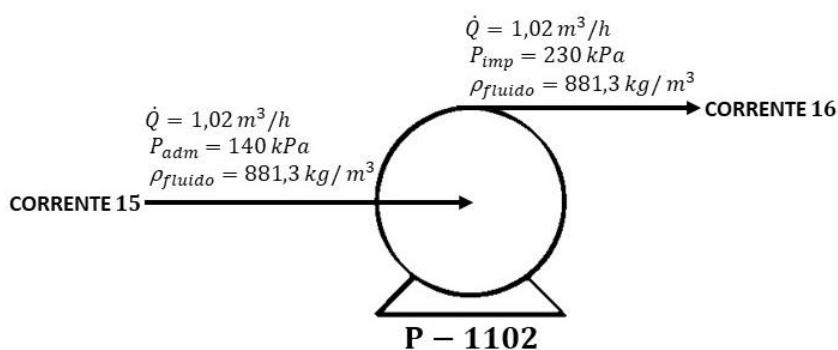


Figura 19. Desenho esquemático usado para o projeto da bomba P-1102.

Para o projeto de cada uma dessas bombas considerou-se a vazão volumétrica que a bomba movimenta (\dot{Q}), a pressão na admissão (P_{adm}) e a pressão na impulsão da bomba (P_{imp}) e o cálculo da potência consumida pela bomba (Pot_{bomba}).

A potência consumida pela bomba, em kW , é dada pela Equação 15.

$$Pot_{bomba} = \frac{\dot{Q} \Delta P_{bomba}}{\eta_h \eta_e} \quad (15)$$

Onde \dot{Q} está em m^3/s , $\Delta P_{bomba} = P_{imp} - P_{adm}$ é a diferença de pressão das correntes à montante e à jusante da bomba em N/m^2 , η_h é a eficiência hidráulica e η_e é a eficiência elétrica. Normalmente, as eficiências hidráulica e elétrica variam de 30 a 60% e 85 a 95%, respectivamente. Logo, para os cálculos da potência utilizou-se $\eta_h = 45\%$ e $\eta_e = 90\%$. Os demais parâmetros foram obtidos através da simulação no software Aspen HYSYS®.

A pressão de *shut-off* ($P_{shut-off}$) trata-se de uma situação em que não há fluxo e o nível de pressão na bomba é máximo. Para o seu cálculo foi utilizado um fator de correção sobre a diferença de pressão conforme a Equação 16.

$$P_{shut-off} = 1,2 \Delta P_{bomba} \quad (16)$$

A Tabela 6 apresenta os parâmetros característicos obtidos para as bombas P-1101 e P-1102.

Tabela 6. Parâmetros característicos das bombas P-1101 e P-1102.

Bomba	P-1101	P-1102
Parâmetro característicos	Valor	Valor
Pressão na admissão (kPa)	101	140
Pressão na impulsão (kPa)	230	230
Diferença de pressão (kPa)	129	90
Pressão de <i>shut-off</i> (kPa)	154,8	108
Vazão volumétrica (m^3/h)	3,404	1,019
Potência consumida (kW)	0,301	0,063

4.3.2. Projeto das bombas P-1103 e P-1104

Os desenhos esquemáticos das bombas P-1103 e P-1104 são apresentados nas Figuras 20 e 21, bem como os valores dos parâmetros de suas correntes nas Tabelas 7 e 8, respectivamente. Ressaltando que para a bomba P-1103 os cálculos foram realizados conforme o número de pratos utilizados para a otimização da torre de destilação (T-1102) (66, 80, 100, 120, 150, 180 e 200 pratos).

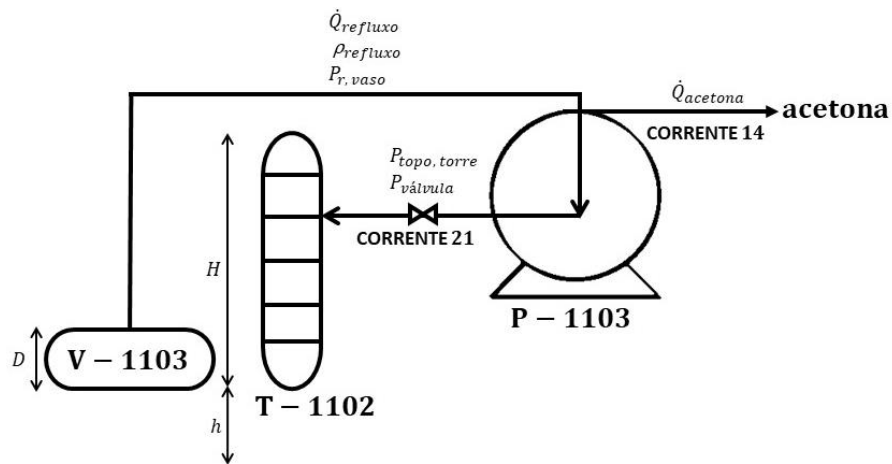


Figura 20. Desenho esquemático usado para o projeto da bomba P-1103.

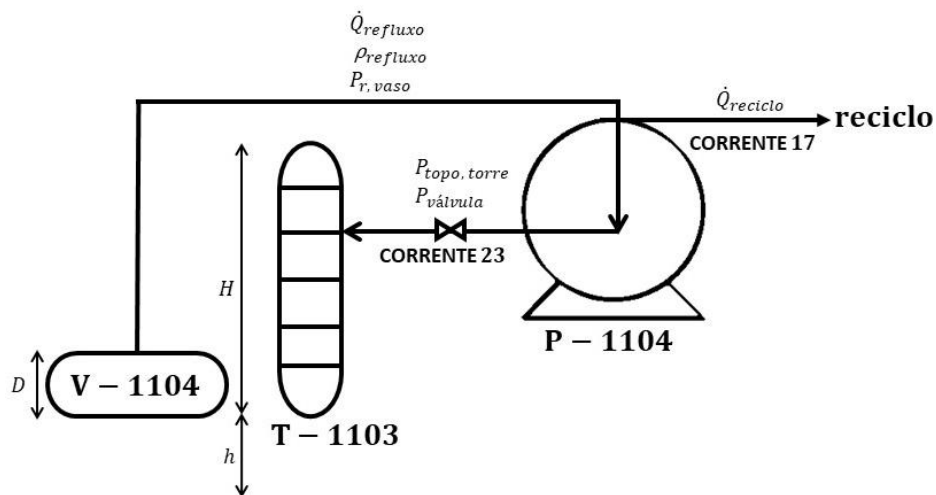


Figura 21. Desenho esquemático usado para o projeto da bomba P-1104.

Tabela 7. Valores dos parâmetros das correntes para o projeto da bomba P-1103.

Bomba	P-1103	P-1103	P-1103	P-1103	P-1103	P-1103	P-1103
Nº de pratos	66	80	100	120	150	180	200
Parâmetros das correntes	Valor	Valor	Valor	Valor	Valor	Valor	Valor
$\dot{Q}_{acetona} (m^3/h)$	2,52	2,52	2,52	2,52	2,52	2,52	2,52
$\dot{Q}_{refluxo} (m^3/h)$	234,36	66,20	33,30	24,60	19,53	17,23	16,29
$\rho_{refluxo} (kg/m^3)$	738,58	738,58	738,58	738,58	738,58	738,58	738,58
$P_{r, vaso} (kPa)$	19,61	19,61	19,61	19,61	19,61	19,61	19,61
$P_{topo, torre} (kPa)$	19,61	19,61	19,61	19,61	19,61	19,61	19,61
$P_{válvula} (kPa)$	9,81	9,81	9,81	9,81	9,81	9,81	9,81

Tabela 8. Valores dos parâmetros das correntes para o projeto da bomba P-1104.

Bomba	P-1104
Nº de pratos	19
Parâmetros das correntes	Valor
$\dot{Q}_{reciclo} (m^3/h)$	0,38
$\dot{Q}_{refluxo} (m^3/h)$	0,71
$\rho_{refluxo} (kg/m^3)$	738,58
$P_{r, vaso} (kPa)$	19,61
$P_{topo, torre} (kPa)$	19,61
$P_{válvula} (kPa)$	9,81

Para a segunda torre de destilação, considerou-se os cálculos somente para 19 pratos.

Diferentemente das outras duas bombas já descritas, cada uma destas está associada a uma torre de destilação, sendo responsáveis tanto pelo refluxo das torres, quanto por bombear o destilado e o reciclo. Logo, para projetá-las foram consideradas as vazões volumétricas das correntes de refluxo ($\dot{Q}_{refluxo}$), do destilado ($\dot{Q}_{acetona}$) e reciclo ($\dot{Q}_{reciclo}$) que passam pelos equipamentos, a pressão na admissão (P_{adm}) e a pressão na impulsão das bombas (P_{imp}), considerando a elevação das torres de destilação e dos vasos, assim como o nível de líquido nos vasos pulmões e a pressão das válvulas de controle à montante das bombas. Com estes parâmetros foi possível realizar o cálculo da potência consumida por cada bomba.

Analogamente, a potência consumida ($P_{ot_{bomba}}$) e a pressão de *shut-off* ($P_{shut-off}$) foram calculadas através das Equações 15 e 16. Porém, as vazões volumétricas para as bombas P-1103 e P-1104, \dot{Q}_{P-1103} e \dot{Q}_{P-1104} , foram calculadas a partir das Equações 17 e 18, respectivamente.

$$\dot{Q}_{P-1103} = \dot{Q}_{refluxo, torre 1} + \dot{Q}_{acetona} \quad (17)$$

$$\dot{Q}_{P-1104} = \dot{Q}_{refluxo, torre 2} + \dot{Q}_{reciclo} \quad (18)$$

Onde $\dot{Q}_{refluxo, torre 1}$ é a vazão volumétrica de refluxo da torre de destilação 1 (T-1102) e $\dot{Q}_{acetona}$ é a vazão volumétrica da acetona (produto de topo da torre 1) em m^3/s , $\dot{Q}_{refluxo, torre 2}$ é a vazão volumétrica de refluxo da torre de destilação 2 (T-1103) e $\dot{Q}_{reciclo}$ é a vazão volumétrica da mistura de álcool isopropílico e água que não foram convertidos no processo de destilação da torre 2 em m^3/s .

Já a pressão de admissão (P_{adm}) e a pressão de impulsão (P_{imp}) foram calculadas para cada equipamento a partir das Equações 19 e 20, respectivamente.

$$P_{adm} = P_{r, vaso} + \rho_{fluido}gh + \rho_{fluido}gh_{liq,vaso} \quad (19)$$

$$P_{imp} = P_{topo, torre} + \rho_{fluido}g(H + h) + P_{válvula} \quad (20)$$

Onde ρ_{fluido} é a densidade do fluido que passa pela bomba, $P_{r, vaso}$ é a pressão relativa do vaso pulmão, $P_{topo, torre}$ é a pressão no topo da torre e $P_{válvula}$ é a pressão da válvula de controle associada à torre (ambas em N/m^2), ρ é a densidade do fluido de trabalho em kg/m^3 , g é a aceleração da gravidade em m/s^2 , h é a elevação dos vasos e das torres em relação ao chão, $h_{liq,vaso}$ é o nível de líquido dentro do vaso pulmão que corresponde a 50% do seu diâmetro D_{vaso} e H é a altura da torre (ambos em metros). Para os cálculos, foram considerados $g = 9,81 m/s^2$ e $h = 3 m$. Os valores de D_{vaso} e H foram obtidos nas seções 4.5 e 4.6, respectivamente. Todos os demais parâmetros foram obtidos através das simulações no software Aspen HYSYS®.

Logo, os parâmetros característicos obtidos para as bombas P-1103 e P-1104 são apresentados na Tabela 9.

Tabela 9. Parâmetros característicos das bombas P-1103 e P-1104.

Bomba	P-1103	P-1103	P-1103	P-1103	P-1103	P-1103	P-1103	P-1104
Nº de pratos	66	80	100	120	150	180	200	19
Parâmetro característicos	Valor	Valor	Valor	Valor	Valor	Valor	Valor	Valor
Pressão na admissão (kPa)	52,63	48,81	47,49	47,04	46,73	46,56	46,50	43,64
Pressão na impulsão (kPa)	285,40	332,19	400,68	467,45	567,55	667,61	734,30	138,96
Diferença de pressão (kPa)	232,77	283,38	353,19	420,41	520,82	621,04	687,80	95,32
Pressão de <i>shut-off</i> (kPa)	279,33	340,06	423,83	504,50	624,99	745,25	825,36	114,39
Vazão volumétrica (m ³ /h)	236,88	68,72	35,82	27,12	22,05	19,75	18,81	1,09
Potência consumida (kW)	37,82	13,36	8,68	7,82	7,88	8,41	8,88	0,07

4.3.3. Custo das bombas

Segundo Towler e Sinnott (2013), para calcular o custo associado a uma bomba devemos considerar:

- i) a parte do estator (bomba sem o motor), a qual dependente da vazão volumétrica da corrente que entra no equipamento;
- ii) a parte do rotor (motor), a qual dependente da potência da bomba, considerando-se um motor de explosão.

O custo de um equipamento (C), em dólares, é dado pela Equação 21.

$$C = a + bS^n \quad (21)$$

Onde S é o parâmetro de tamanho em unidades específicas, n é o expoente para cada tipo de equipamento, a e b são constantes tabeladas.

Logo, o custo de uma bomba (C_{bomba}) é dado pela Equação 22.

$$C_{bomba} = C_{estator} + C_{rotor} \quad (22)$$

Onde o custo do estator é $C_{estator} = 8000 + 240 \times S^{0,9}$, o custo do rotor é $C_{rotor} = -1100 + 2100 \times S^{0,6}$ e S assume a vazão volumétrica da corrente que entra no equipamento em L/s e a potência da bomba em kW , respectivamente (TOWLER e SINNOT, 2013).

Além do custo direto dos equipamentos, existem outros custos associados à instalação. Estes custos podem ser contabilizados pelo fator f de Hand para cada equipamento, estudo que evoluiu a partir do fator proposto por Lang.

Logo, considerando o fator $f = 4$ para as bombas, temos o custo total de uma bomba ($C_{t,bomba}$), incluindo o valor do equipamento e sua instalação, dado pela Equação 23.

$$C_{t,bomba} = 4 \times C_{bomba} \quad (23)$$

A Tabela 10 apresenta os custos obtidos para as quatro bombas.

Tabela 10. Custos das quatro bombas.

Bomba	Nº de pratos	$S_{estator}$ (L/s)	S_{rotor} (kW)	$C_{estator}$ (US\$)	C_{rotor} (US\$)	C_{bomba} (US\$)	$C_{t,bomba}$ (US\$)
P-1101	Não se aplica	0,946	0,301	8228,21	3200	11428,21	45712,83
P-1102	Não se aplica	0,283	0,063	8077,07	3200	11277,07	45108,29
P-1103	66	65,80	37,82	18389,96	19671,30	38061,27	152245,06
	80	19,09	13,36	11411,45	11046,10	22457,55	89830,20
	100	9,95	8,68	9898,02	8778,52	18676,54	74706,16
	120	7,53	7,82	9477,62	8314,19	17791,81	71167,25
	150	6,13	7,88	9226,55	8345,65	17572,21	70288,83
	180	5,49	8,41	9110,56	8636,55	17747,12	70988,47
	200	5,23	8,88	9063,12	8882,82	17945,94	71783,75
P-1104	19	0,30	0,07	8081,85	3200,00	11281,85	45127,38

É recomendado que as bombas sejam duplicadas e colocadas em paralelo para assegurar que todo o processo não seja interrompido quando uma bomba falhar e/ou receber quaisquer tipos de manutenção, por isso a denominação A/B para cada uma das bombas, totalizando as oito bombas. A Tabela 11 apresenta os custos ao se duplicar cada bomba.

Tabela 11. Custos das bombas duplicadas.

Bomba	Nº de pratos	$C_{bomba\ duplicada}$ (US\$)
P-1101	Não se aplica	91425,66
P-1102	Não se aplica	90216,57
P-1103	66	304490,13
	80	179660,40
	100	149412,32
	120	142334,51
	150	140577,65
	180	141976,93
	200	143567,51
P-1104	19	90254,76

Com o projeto das bombas e os demais equipamentos, foi possível calcular os custos operativos demonstrados na seção 6.1 e, assim, encontrar o ótimo do processo.

4.4. Trocadores de calor

Em operações industriais o uso de trocadores de calor faz-se necessário para o aquecimento ou o resfriamento de uma determinada corrente do processo. Tais equipamentos são caracterizados pela presença de duas correntes de interesse: aquela composta pelo fluido integrante da operação denominada corrente de processo e aquela composta pelo fluido que irá proporcionar a diferença térmica para que ocorra a transferência de calor denominada corrente auxiliar (CAO, 2010).

Os trocadores podem ser de diversos tipos e a escolha do trocador mais adequado para cada operação depende das variáveis características do processo, dentre elas: área de troca térmica; características dos fluidos de trabalho; pressão e temperatura de operação.

Neste trabalho foram utilizados os seguintes tipos de trocadores de calor:

- i) Trocador de calor de tubo duplo: constituído por 2 tubos concêntricos, cujo interior de cada tubo circula um fluído (Figura 22). É empregado para superfícies de troca pequenas até 20 m². (TOWLER, 2008; CAO, 2010; SERTH, R. W., 2010).

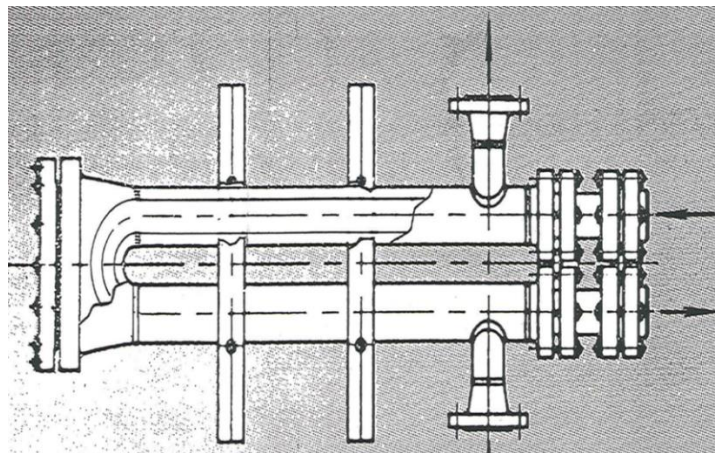


Figura 22. Trocador de calor de tubo duplo (Apresentação em Power Point: Unidade 3.2 - Trocadores de Calor, 2022).

- ii) Trocador de calor de casco e tubo: constitui o tipo mais utilizado. É formado por um feixe de tubos (onde no interior circula um dos fluídos), inserido dentro de uma carcaça que confina ao outro fluído que circula pelo exterior dos tubos. A Figura 23 apresenta um trocador de casco e tubo com cabeçote flutuante. Nessa configuração o feixe de tubos é extraível, dessa forma, uma das placas tubulares, chamada de fixa, está parafusada à carcaça, enquanto a outra fica livre, de forma a absorver dilatações térmicas. (TOWLER, 2008; CAO, 2010; SERTH, R. W., 2010).

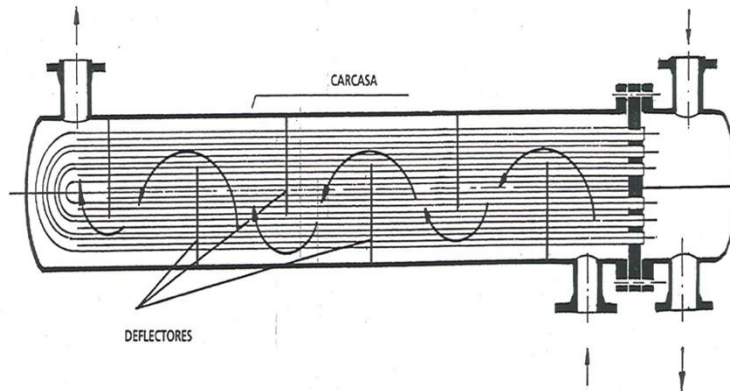


Figura 23. Trocador de calor de casco e tubo com cabeçote flutuante (Apresentação em Power Point: Unidade 3.2 - Trocadores de Calor, 2022).

Para dimensionamento dos trocadores de calor, inicialmente calculou-se a diferença de temperatura média logarítmica (ΔT_{ml}):

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

Em que T_1' é a temperatura de entrada do fluido quente, T_2' é a temperatura de saída do fluido quente, T_1'' é a temperatura de entrada do fluido frio e T_2'' é a temperatura de saída do fluido frio. Após, estimou-se o fator de correção, F_t , da diferença de temperatura:

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

Onde F_t é igual a 1 para condensadores e vaporizadores. Assim, calculou-se a área, A , de troca térmica.

Onde Q é o calor transferido por unidade de tempo e U é o coeficiente global de transferência de calor. Após, foi calculado a área de cada tubo do trocador (A_{tubo}):

$$A_{tubo} = \pi \cdot D \cdot L$$

Onde D é o diâmetro do tubo e L é o comprimento do tubo. Por fim, o número de tubos foi obtido através da razão entre a área de troca térmica e a área do tubo.

$$N_{tubos} = \frac{A}{A_{tubos}}$$

O custo dos trocadores, em dólar, segue a equação:

$$C = a + bA^n$$

Em que a , b e n são parâmetros específicos por tipo de trocador empregado, cujos valores utilizados nesse projeto foram retirados do livro *Chemical Engineering Design* (Figura 24).

Equipment	Units for Size, S	S_{lower}	S_{upper}	a	b	n
<i>Dryers</i>						
Direct contact Rotary	m ²	11	180	15,000	10,500	0.9
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
<i>Evaporators</i>						
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
<i>Exchangers</i>						
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

Figura 24. Parâmetros para obtenção dos custos dos trocadores de calor (TOWLER e SINNOTT, 2013).

Por fim, o custo total do trocador de calor (C_t) é dado pela expressão:

$$C_t = fC$$

Em que f é o Fator de Hand, cujo valor assumido para todos os trocadores empregados equivale a 3,5. Nos tópicos a seguir, foram descritos detalhadamente cada trocador empregado no presente trabalho.

4.4.1. Projeto do trocador de calor E-1101

O objetivo desse trocador de calor é a vaporização da corrente com mistura azeotrópica de 2-propanol (IPA) e água com a corrente de reciclo do processo (uma mistura de IPA não reagido, água e acetona), bombeada a partir do vaso de mistura. Tal processo faz-se necessário, visto que a reação na próxima unidade (reator) se processa em fase gasosa. Na corrente de serviço é utilizado vapor de aquecimento de alta pressão (HPS), Figura 25.

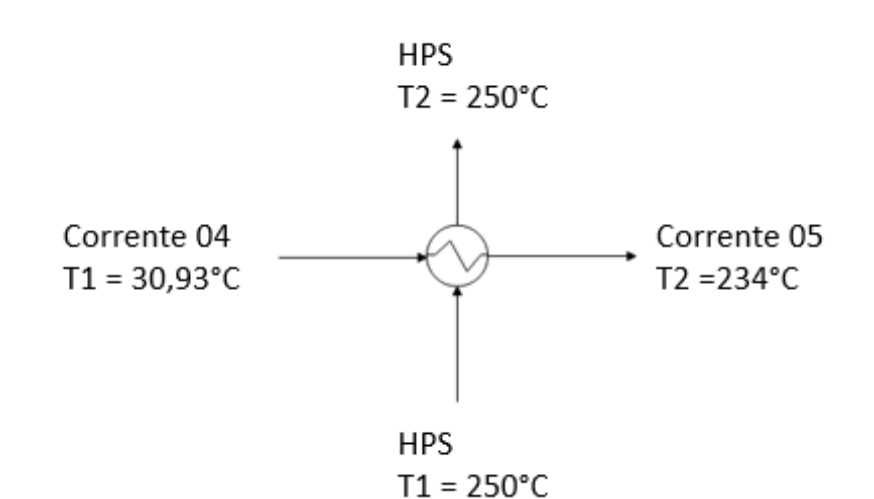


Figura 25. Esquema do projeto do trocador E-1101.

4.4.2. Projeto do trocador de calor E-1102

Este trocador de calor constitui a primeira etapa de resfriamento do efluente oriundo do reator, que agora contém acetona e hidrogênio, produtos da reação, e contém também IPA não reagido. Tal processo faz-se necessário para que o hidrogênio seja facilmente removido nas próximas etapas (separador de fases e torre de absorção). Na corrente de serviço é utilizado água de resfriamento (CW), Figura 26.

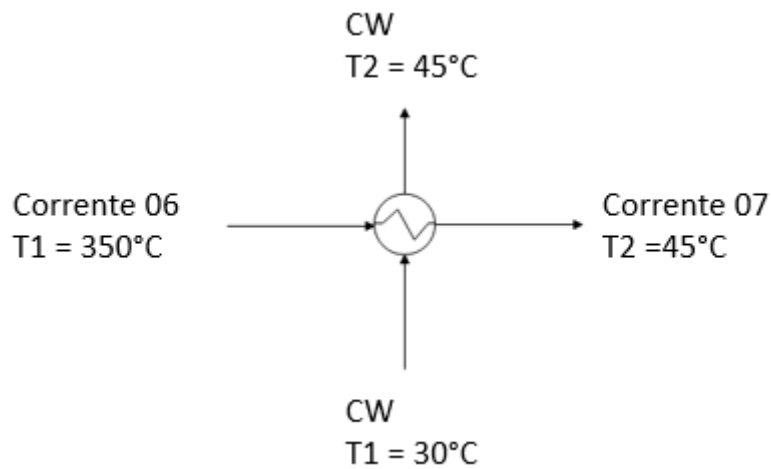


Figura 26. Esquema do projeto do trocador E-1102.

4.4.3. Projeto do trocador de calor E-1103

Este trocador de calor constitui a última etapa de resfriamento do efluente oriundo do reator, que contém acetona e hidrogênio, produtos da reação, e contém também IPA não reagido. Este processo, tal como supracitado, faz-se necessário para que o hidrogênio seja facilmente removido nas próximas etapas (separador de fases e torre de absorção). Na corrente de serviço é utilizado água de refrigeração (RW), Figura 27.

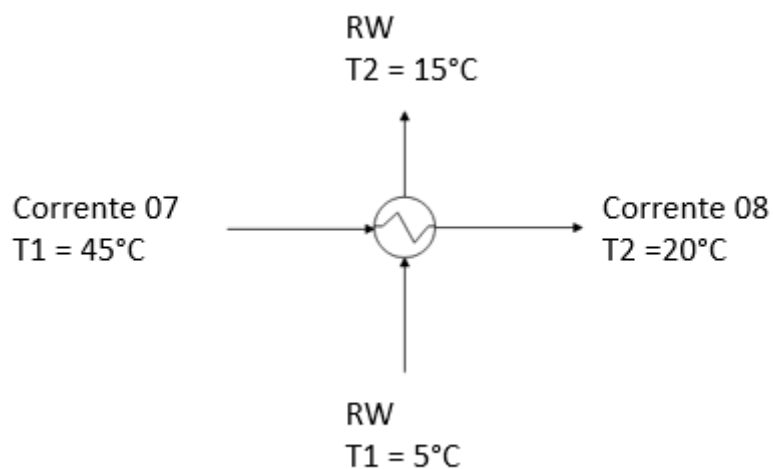


Figura 27. Esquema do projeto do trocador E-1103.

4.4.4. Projeto do trocador de calor E-1108

O objetivo desse trocador de calor é o resfriamento do produto de fundo da torre de destilação (T-1103), que compõe a água residual do processo. Na corrente de serviço é utilizado água de resfriamento (CW), Figura 28.

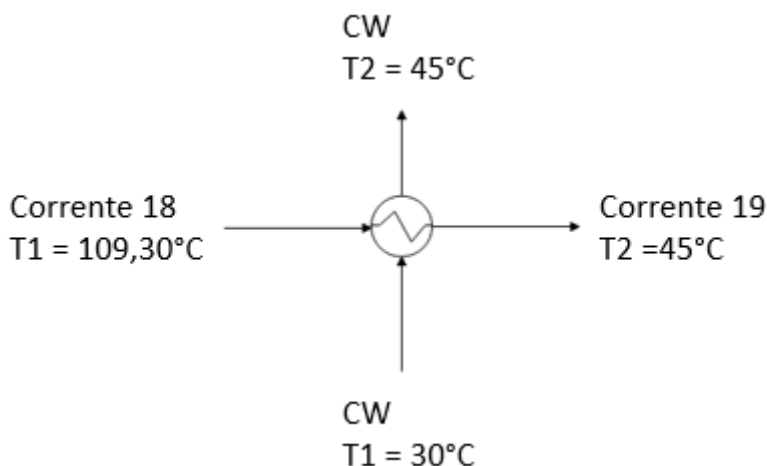


Figura 28. Esquema do projeto do trocador E-1108.

A seguir, o Tabela 12 sumariza os resultados acima apresentados.

Tabela 12. Parâmetros dos trocadores de calor.

	E-1101	E-1102	E-1103	E-1108
Temperatura de entrada do fluido de processo (°C)	30,93	350,00	45,00	109,30
Temperatura de saída do fluido de processo (°C)	234,00	45,00	20,00	45,00
Temperatura de entrada do fluido auxiliar (°C)	250,00	30,00	5,00	30,00
Temperatura de saída do fluido auxiliar (°C)	250,00	45,00	15,00	45,00
Calor trocado (kcal/h)	853404,19	793012,19	110470,00	41589,27
Área de troca (m ²)	10,23	7,66	4,75	1,14
Número de tubos	28,04	21,00	13,02	3,13
Custo total do trocador	115990,33	114821,01	113588,73	16644,22

4.4.5. Dimensionamento trocadores das colunas de destilação

4.4.5.1. Coluna 1 (separação de acetona)

Essa coluna foi tomada como base para a otimização econômica abordada nesse projeto, em que foi realizada a avaliação de rentabilidade da planta considerando os cenários para 66, 80, 100, 120, 150, 180 e 200 pratos teóricos.

a. Trocador de calor E-1104

Este trocador de calor é o condensador da coluna de destilação de acetona, o seu objetivo é o resfriamento do efluente que sai do topo da coluna (corrente de entrada). Em seguida, parte da corrente de processo que saí de E-1104 compõe o refluxo que retorna a coluna e parte se transforma no produto principal da planta, a acetona (tais partes integram a corrente de saída). Na corrente de serviço é utilizada água de resfriamento (CW), Figura 29.

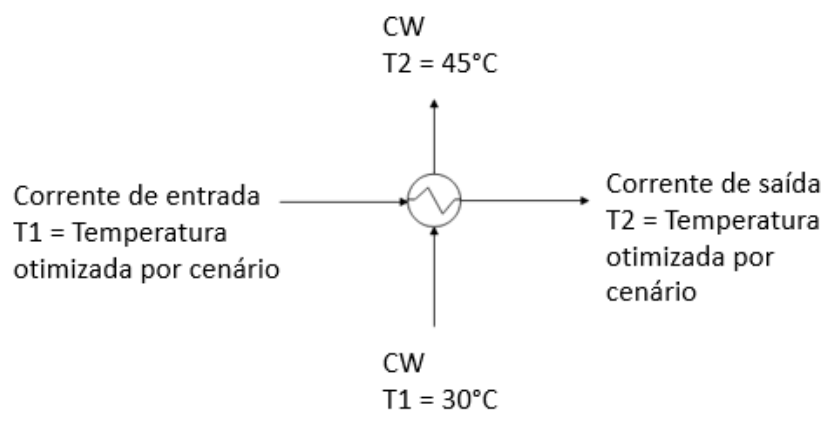


Figura 29. Esquema do projeto do trocador E-1104.

b. Trocador de calor E-1105

Este trocador de calor é a caldeira da coluna de destilação de acetona, o seu objetivo é o aquecimento do efluente que sai do fundo da coluna (corrente de entrada). Então, parte da corrente de processo que saí de E-1105 se transforma em refluxo que retorna a coluna e parte segue para a coluna de destilação de IPA, que

compõe a corrente de reciclo, tais partes integram a corrente de saída. Na corrente de serviço é utilizado vapor de aquecimento de baixa pressão (LPS), Figura 30.

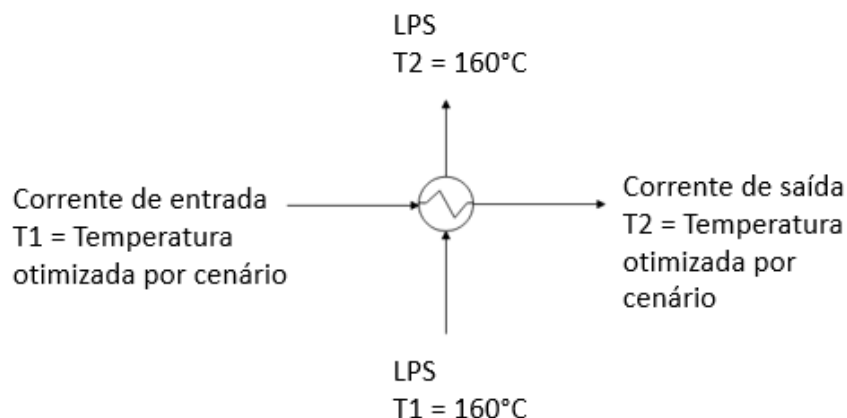


Figura 30. Esquema do projeto do trocador E-1105.

A seguir, os Tabelas 13 e 14 sumarizam os resultados encontrados.

Tabela 13. Parâmetros obtidos dos trocadores de calor para otimização da primeira coluna.

NP	Trocador	Temperatura de entrada do fluido de processo (°C)	Temperatura de saída do fluido de processo (°C)	Temperatura de entrada do fluido auxiliar (°C)	Temperatura de saída do fluido auxiliar (°C)	Calor trocado (kcal/h)	Área de troca (m ²)	Nº de tubos
66	E-1104	61,11	61,11	30,00	45,00	20806246	848,20	2357
	E-1105	86,2	91,66	160,00	160,00	20906811	272,17	757
80	E-1104	61,11	61,11	30,00	45,00	6033361	243,74	678
	E-1105	86,31	91,66	160,00	160,00	6135014	81,40	227
100	E-1104	61,11	61,11	30,00	45,00	3145183	126,74	353
	E-1105	86,43	91,65	160,00	160,00	3247562	43,86	122
120	E-1104	61,11	61,11	30,00	45,00	2382957	97,49	271
	E-1105	86,53	91,66	160,00	160,00	2484471	31,35	88
150	E-1104	61,11	61,11	30,00	45,00	1937191	78,97	220
	E-1105	86,59	91,65	160,00	160,00	2039287	26,66	75
180	E-1104	61,11	61,11	30,00	45,00	1734710	71,17	198
	E-1105	86,65	91,66	160,00	160,00	1836073	24,16	68
200	E-1104	61,11	61,11	30,00	45,00	1652556	67,27	187
	E-1105	86,66	91,65	160,00	160,00	1754432	22,91	64

Tabela 14. Custos totais obtidos dos trocadores de calor para otimização da primeira coluna.

NP	Trocador	Custo total do trocador (US\$)
66	E-1104	912509,16
	E-1105	316628,95
80	E-1104	291254,97
	E-1105	160073,49
100	E-1104	193785,30
	E-1105	134891,99
120	E-1104	171695,72
	E-1105	127301,23
150	E-1104	158358,06
	E-1105	124595,25
180	E-1104	152919,53
	E-1105	123192,99
200	E-1104	150243,89
	E-1105	122498,88

4.4.5.2. Coluna 2 (separação do IPA)

a. Trocador de calor E-1106

Este trocador de calor é o condensador da coluna de destilação de IPA (que compõe a corrente de reciclo), o seu objetivo é o resfriamento do efluente que sai do topo da coluna (corrente de entrada). Em seguida, parte da corrente de processo, que saí de E-1106 é levada a ser o refluxo que retorna a coluna e parte compõe a corrente de reciclo – tais partes integram a corrente de saída. Na corrente de serviço é utilizada água de resfriamento (CW), Figura 31.

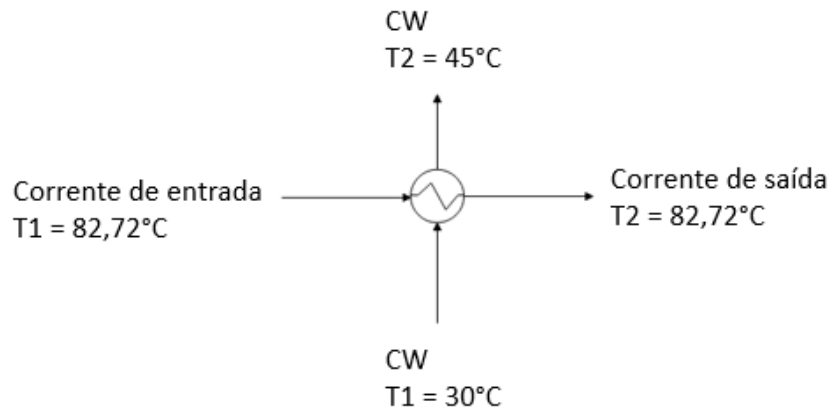


Figura 31. Esquema do projeto do trocador E-1106.

b. Trocador de calor E-1107

Este trocador de calor é a caldeira da coluna de destilação de IPA (que compõe a corrente de reciclo), o seu objetivo é o aquecimento do efluente que sai do fundo da coluna (corrente de entrada). Após, parte da corrente de processo, que saí de E-1107 retorna a coluna e parte resultará em água residual do processo – tais partes integram a corrente de saída. Na corrente de serviço é utilizado vapor de aquecimento de baixa pressão (LPS), Figura 32.

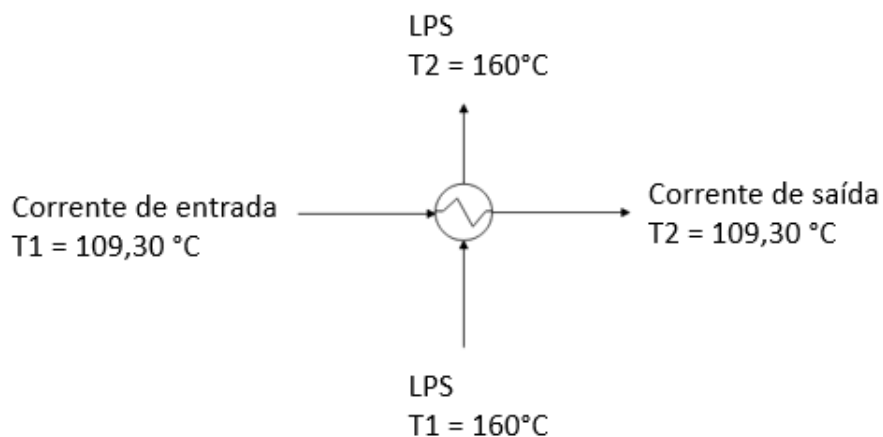


Figura 32. Esquema do projeto do trocador E-1107.

A seguir, a Tabela 15 sumariza os resultados encontrados.

Tabela 15. Parâmetros obtidos para os trocadores de calor da segunda coluna.

Trocador de calor	E-1106	E-1107
Temperatura de entrada do fluido de processo (°C)	82,72	109,30
Temperatura de saída do fluido de processo (°C)	82,72	109,30
Temperatura de entrada do fluido auxiliar (°C)	30,00	160,00
Temperatura de saída do fluido auxiliar (°C)	45,00	160,00
Calor trocado (kcal/h)	162213,99	171531,44
Área de troca (m²)	3,37	3,16
Número de tubos	9,37	8,77
Custo total do trocador	36162,39	34263,41

4.5 Vasos

Os vasos são um dos equipamentos mais comuns em plantas químicas. Suas funções são de armazenar matérias prima e/ou produtos no local de fabricação, separar uma mistura líquida multifásica, no entanto, sua principal função é a de reter fluidos durante determinado tempo para que sejam realizadas as operações que integram o processo produtivo. Quanto à nomenclatura são chamados de vasos acumuladores, vasos separadores e vasos pulmão, respectivamente. Ademais, esses equipamentos apresentam dois tipos de configuração: vertical e horizontal. (GOMIDE, 1997)

4.5.1 Vasos pulmões

Na planta de produção de acetona tem-se 3 vasos pulmões, eles irão uniformizar o processo produtivo garantindo o suprimento de líquidos para a unidade necessária de acordo com a demanda e, também, podendo agir como vasos acumuladores, quando não há consumo. Os principais parâmetros de projeto são o tempo de residência e a razão geométrica de comprimento por diâmetro.

O primeiro vaso (V-1101) irá acumular o reagente do processo (isopropanol), tanto o que foi reciclado durante o processo como o da alimentação antes de ser enviado para o reator.

Já os vasos V-1103 e V-1104 atuam nas torres de destilação acumulando o líquido que sai do condensador de forma a garantir uma vazão de refluxo constante para a coluna. Na Figura 33 tem-se um esquema de um vaso pulmão utilizado na torre de destilação.

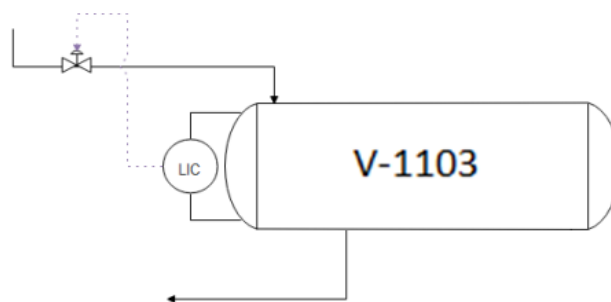


Figura 33. Esquema do vaso pulmão V-1103.

4.5.1.1. Projeto dos vasos pulmões

Inicialmente para projetar-se um vaso pulmão é importante saber a razão geométrica, a qual é baseada na Figura 34.

Operating pressure, bar	Length/diameter, L_o/D_o
0–20	3
20–35	4
>35	5

Figura 34. Razão geométrica de vasos pulmões (TOWLER e SINNOTT, 2013).

É possível calcular a vazão de destilado a partir dos fluxos molares que saem pelo topo da coluna:

$$Q_{\text{destilado}} (\text{m}^3/\text{h}) = \frac{\text{fluxo molar de topo}}{\text{densidade molar}}$$

A partir da taxa de refluxo determina-se a razão de refluxo (L_D):

$$taxa\ de\ refluxo = \frac{L_D}{Q_{destilado}}$$

Logo, a vazão total será a soma da vazão de refluxo e da vazão de destilado.

Sabendo que um pulmão se encontra 50% cheio, para estimar o volume total deve ser o dobro do volume de líquido para determinado tempo de retenção (t_r), no caso do projeto de 15 minutos:

$$V_{total} (m^3) = 2 \times (Q_{destilado} + L_d) \times t_r$$

É importante citar que o tempo de retenção é tomado se baseando na Figura 35.

Service	Holdup time, min (NLL — LLL)	Surge time, min (NLL — HLL)
A. Unit feed drum	10	5
B. Separators		
1. Feed to column	5	3
2. Feed to other drum or tankage		
a. With pump or through exchanger	5	2
b. Without pump	2	1
3. Feed to fired heater	10	3
C. Reflux or product accumulator		
1. Reflux only	3	2
2. Reflux and product	3+	2+
(Based on reflux (3 min) plus appropriate holdup time of overhead product (as per B 1–3))		
D. Column bottoms		
1. Feed to another column	5	2
2. Feed to other drum or tankage		
a) With pump or through exchanger	5	2
b) Without pump	2	1
3. Feed to fired reboiler	5–8	2–4
(Based on reboiler vapor expressed as liquid (3 min) plus appropriate holdup time for the bottom product (as per D 1, 2))		

Figura 35. Tempos de *holdup time* e *surge time* (TOWLER e SINNOTT, 2013).

Considerando os 2 tipos de função do vaso pulmão que são separador e refluxo ou acumulador de produto e os tempos associados a cada um, sendo que o tempo de retenção será a soma de todos os tempos e, ainda, considerando que a vazão de entrada e saída são idênticas.

Para estimar o valor do diâmetro do vaso usa-se a seguinte fórmula:

$$D_v(m) = \sqrt[3]{\frac{4 \times V_{total}}{\pi \times \left(\frac{L}{D}\right)}}$$

O comprimento do vaso (L_{vaso}) é facilmente encontrado usando a razão geométrica.

Para se calcular o custo do vaso pulmão, primeiramente é necessário calcular a espessura segundo a equação abaixo:

$$e (mm) = \frac{P_i \times D_{real}}{2 \times S_{ten} \times E - 1,2 \times P_i} + SC$$

Onde:

e – Espessura da torre

Pi – é a pressão de projeto

Dreal - diâmetro do vaso

S_{ten} - tensão máxima que o material suporta

E - eficiência da solda

SC – Sobre espessura por corrosão

Sendo que a tensão máxima para o aço carbono em temperaturas moderadas (menores que 150°C) é 12,9 ksi e a eficiência da solda é uma constante de valor 0,85 e a sobre espessura por corrosão usada é de 3 mm.

Ademais, a pressão de projeto é a maior pressão sob a qual o processo, em todos os casos a pressão das torres é de 1,4 bar, é conduzido acrescido 10% ou de 1,8 kg/cm². No entanto, se a pressão acrescida pela margem de segurança não ultrapasse o valor de 3,5 kg/cm², será usado esse valor. Sendo assim, tanto para o projeto da torre como para dos vasos pulmões foi utilizado o valor de 3,5 kg/cm².

Com o valor da espessura do vaso calcula-se o peso do mesmo:

$$W_{vaso}(kg) = 240 \times C_w \times D_m \times (H_{total} + 0,8 \times D_m) \times e$$

Onde:

H_{total} – Altura total da torre

C_w – fator de complexidade de 1,08

D_m – diâmetro médio, o qual é dado pela seguinte fórmula

$$D_m(m) = D_{real} + e \times 10^{-3}$$

4.5.1.2. Custo dos vasos pulmões

O custo do vaso pulmão foi calculado a partir dos dados da seguinte Figura 36 para a seguinte equação, sabendo que se trata de um vaso horizontal, cs:

$$C = a + b \times S^n$$

Equipment	Units for size, S	S lower	S upper	a	b	n
PVC structured packing	m3			0	500	1.0
304 ss structured packing	m3			0	6,900	1.0
Pressure vessels						
Vertical, cs	shell mass, kg	160	250,000	10,000	29	0.85
Horizontal, cs	shell mass, kg	160	50,000	8,800	27	0.85
Vertical, 304 ss	shell mass, kg	120	250,000	15,000	68	0.85
Horizontal, 304 ss	shell mass, kg	120	50,000	11,000	63	0.85

Figura 36. Parâmetros para obtenção de custo dos vasos (TOWLER. e SINNOTT, 2013).

Por fim, o custo do vaso pulmão considerando o custo de instalação do equipamento será de:

$$C_{vaso\ pulmão} = 4 \times C$$

Para a planta química apresentada tem-se 3 vasos pulmões. O primeiro vaso pulmão V-1101, apresentou os parâmetros contidos na Tabela 16.

Tabela 16. Parâmetros característicos para o vaso V-1101.

V_{total} (m³)	D (m)	L (m)	W (kg)	Custo (US\$)
1,70	0,90	2,69	410,50	99806,98

Foi feita uma otimização econômica para os vasos a partir de diferentes números de pratos da torre, sendo os seguintes valores encontrados (Tabela 17)

Tabela 17. Parâmetros característicos para o vaso V-1103.

Número de pratos	L_D/D	V_{total} (m³)	D (m)	L (m)	Espessura (mm)	W_{torre} (kg)	Custo (US\$)
66	92,83	118,44	3,69	11,07	11,40	15654,56	1124762,95
80	26,21	34,34	2,44	7,33	8,56	5152,25	468626,87
100	13,18	17,90	1,97	5,90	7,47	2915,19	308446,66
120	9,747	13,56	1,79	5,38	7,08	2295,03	261119,49
150	7,737	11,03	1,67	5,02	6,81	1922,49	231779,40
180	6,453	9,87	1,61	4,84	6,67	1750,12	217921,58
200	6,823	9,41	1,59	4,76	6,61	1679,53	212187,72

Para o segundo vaso da torre de destilação obteve-se os seguintes valores:

Tabela 18. Parâmetros característicos para o vaso V-1104.

Número de pratos	L_D/D	V_{total} (m³)	D (m)	L (m)	W_{torre} (kg)	Custo (US\$)
19	1,886	1,62	0,88	2,65	394,26	98167,33

4.5.2. Vasos separadores

A planta é composta por um vaso separador, onde o projeto foi calculado em função da densidade das fases vapor e líquido. Para dimensionar o vaso separador foi escolhido um vaso vertical e cilíndrico pelo fato de a separação ser bifásica. Estima-se a velocidade limite para evitar o arraste das gotículas de líquido por meio da velocidade limite utilizando a equação empírica de York.

$$v_{lim} = K \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_G}{\rho_G}}$$

Substituindo os valores:

$$v_{lim} = 0,23 \sqrt{\frac{813,17 - 0,5663}{0,5663}} = \frac{8,7125 ft}{s} = 2,7125 \frac{m}{s}$$

A partir disso podemos encontrar o diâmetro do vaso:

$$D = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot 2,7125}{\pi \cdot 3}} = 1,0481 \text{ m}$$

Para determinar a altura do líquido vamos utilizar a vazão e o tempo de residência do líquido, usando os valores da Figura 35 para o tempo de retenção (*holdup time*) e um *surge time*.

Usaremos o tempo de 10 minutos:

$$Q_L = \frac{2,852 m^3}{h} \cdot \frac{1 h}{60 \text{ min}} \cdot 10 \text{ min} = 0,4753 m^3$$

Com o valor do volume determinado e sabendo que o diâmetro é de 1,04806 m podemos descobrir o valor da altura do líquido:

$$V_L = A_L \cdot H_L$$

$$\frac{\pi \cdot 1,04806^2}{4} \cdot H = 0,4753 m^3$$

$$H = 0,5509 \text{ m}$$

A Figura 37 ilustra a separação de seções do vaso.

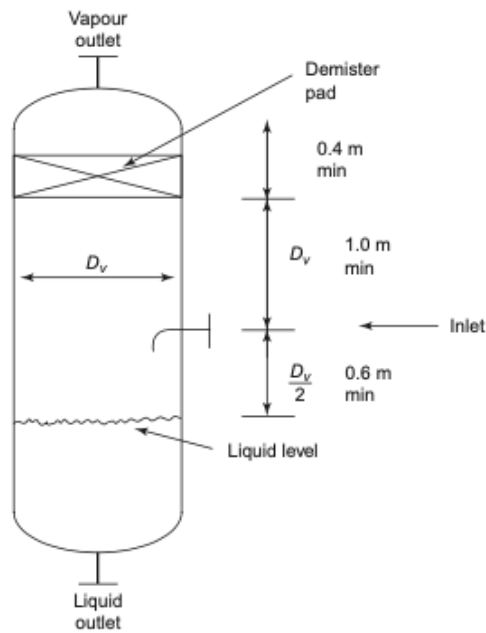


Figura 37. Separador vertical líquido-vapor (TOWLER e SINNOTT, 2013).

Com base na figura podemos determinar a altura das outras partes da torre, de forma conservadora a altura entre o líquido e entrada deve ser a metade do diâmetro sendo de no mínimo 0,6 m, portanto consideraremos 0,6m, entre a entrada e o demister deve ser o diâmetro ou 1 m, portanto consideraremos o diâmetro de 1,0481 m e como tamanho padrão o demister de 0,15 metros e a altura entre o demister e o topo de 0,3 m. A Figura 38 abaixo representa o vaso separador:

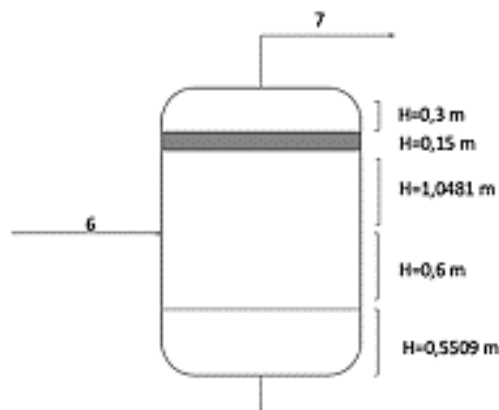


Figura 38. Esquema do vaso separador V-1101.

Portanto a altura total é de 2,6490 metros e o volume é de 2,2853 m³. Para a espessura usa-se a seguinte equação:

$$e \text{ (mm)} = \frac{P_i \times D_{real}}{2 \times S_{ten} \times E - 1,2 \times P_i} + SC$$

Sendo P_i a pressão do projeto que será de 3,5 kg/cm², a eficiência da solda, E , de 0,85, o diâmetro do vaso D_{vaso} e S_{ten} o esforço máximo que o material pode suportar. Para o peso do material foi usada a seguinte equação:

$$W_v = 240 \cdot C_w \cdot D_m (H_v + 0,8 \cdot D_m) t$$

Considerando $C_w=1,08$ e para o custo usaremos:

$$C = 1000 + a * w^b$$

Sendo $a=29$ e $b=0,85$ por ser um vaso vertical.

Considerando a relação L/D, a espessura, o peso, e o custo podemos otimizar o vaso.

Tabela 19. Otimização do vaso V-1101.

L/D	D (m)	L (m)	e (mm)	W (kg)	Custo (US\$)
2	1,13	2,27	5,58	533,3222	7030,30
2,25	1,09	2,45	5,48	527,5193	6974,49
2,5	1,05	2,63	5,39	523,7461	6938,14
2,75	1,02	2,80	5,32	521,4116	6915,63
3	0,99	2,97	5,25	520,1252	6903,23
3,25	0,96	3,13	5,19	519,6188	6898,34
3,5	0,94	3,29	5,14	519,7036	6899,16
3,75	0,92	3,44	5,09	520,2425	6904,36
4	0,89	3,59	5,04	521,1346	6912,96
4,25	0,88	3,74	5,00	522,3036	6924,23
4,5	0,86	3,89	4,97	523,6916	6937,61
4,75	0,85	4,03	4,93	525,2534	6952,66
5	0,84	4,17	4,90	526,9538	6969,04

A melhor relação é vista em L/D=3,25, com custo total de 6.898,345 dólares. Com o custo de instalação usando o fator 4 de acordo com a Figura 39.

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 39. Fator de instalação (TOWLER e SINNOTT, 2013).

$$C_{total} = 4 \cdot C_{vaso} = 4 \cdot 6898,345 = 27393,38 \text{ dólares}$$

Portanto, o custo do vaso com a instalação é de 27393,38 dólares.

4.6. Torres de separação

Na indústria, é frequente a necessidade de separar componentes de uma mistura. No caso de misturas líquido-líquido o equipamento mais comum de se utilizar são as torres de separação. As torres são equipamentos de formato cilíndrico regidas pelo fenômeno de transferência de massa entre um líquido e um vapor, no qual o equilíbrio entre essas duas fases é mantido permitindo a separação dos componentes. (GEANKOPLIS, 2018)

De forma a se aumentar a eficiência de separação entre os componentes são colocados pratos que possibilitarão o escoamento da fase vapor para cima, através de furos nesses pratos, enquanto a fase líquida escoar para baixo. Ademais, a corrente de refluxo contribui para aumentar a eficiência de separação entre os dois componentes. (GEANKOPLIS, 2018)

As torres são compostas pelo vaso que é dividido em 2 partes: zona de enriquecimento e zona de empobrecimento, além de um reboiler, condensador e um vaso pulmão, no entanto será abordado nessa parte somente a construção do corpo principal da torre. (GEANKOPLIS, 2018)

O projeto da planta de produção de acetona a partir de isopropanol é composto de 3 torres de separação, sendo 1 de absorção e 2 de destilação fracionada. A torre T-1102 tem como objetivo separar a acetona, produto final, da água e do isopropanol (produtos de fundo) enquanto a torre T-1103 separa o isopropanol que será reaproveitado no processo dá água residual (produto de topo) que será enviada para um posterior tratamento com um possível uso.

No projeto de um vaso de uma torre de destilação ou absorção, dois parâmetros influenciam na dimensão e nos custos da torre, são eles os números de pratos (np) e a razão de refluxo (L_D/D) no topo da coluna. Abaixo é possível visualizar a torre de destilação T-1102.

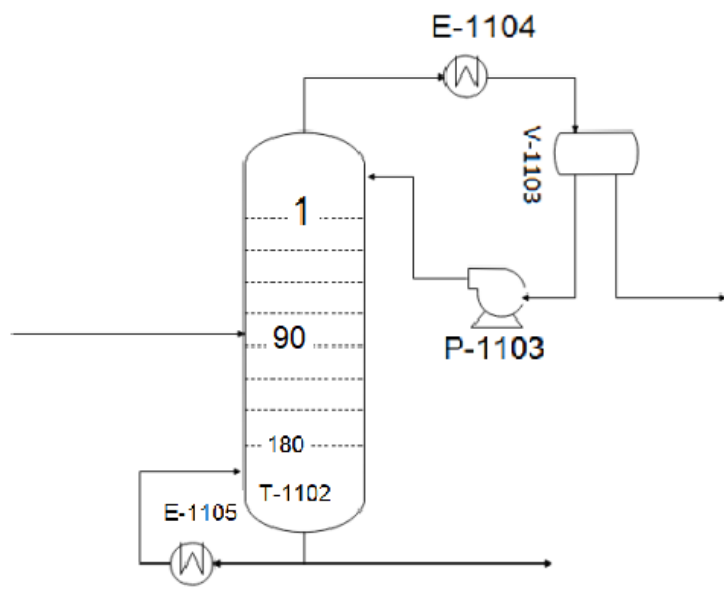


Figura 40. Esquema da torre T-1102.

4.6.1 Torres de destilação

A seguir será descrito o processo de cálculo para a construção do equipamento. Primeiramente, calcula-se a altura do vaso principal da torre, levando em conta a quantidade de pratos e usando espaçamentos entre os mesmos, sendo utilizada a seguinte equação:

$$H_{\text{corpo}}(m) = [(np - 2) \times 0,46 m + 3 \times 0,91 m]$$

Onde:

H é a altura do corpo da torre

Usa-se um espaçamento de 0,46m para cada prato e um espaçamento de 0,91m para uma separação do prato de alimentação, do topo da torre e do fundo.

Para calcular a seção mínima transversal leva-se em conta os parâmetros das correntes de alimentação, produto de topo e fundo de forma que se tenha a maior velocidade ascendente de vapor possível para evitar gotejamento de líquido por entre os partos da torre (“sangramento”) e para que o líquido não seja arrastado pelo vapor.

A velocidade limite é dada pela equação de York, a qual se usa os dados da maior vazão volumétrica, que pode ser da seção de enriquecimento ou da de empobrecimento.

$$v_{lim}(m/s) = (0,3048 m/ft) \times (0,23 ft/s) \times \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_G}{\rho_G}}$$

Onde:

v_{lim} é a velocidade limite em m/s

ρ_g é a densidade de gás em kg/m³

ρ_L é a densidade de líquido em kg/m³

A seção transversal mínima será calculada a partir da vazão volumétrica máxima ($Q_{v_{max}}$) dividida pela velocidade limite, conforme abaixo:

$$S_{min}(m^2) = \frac{Q_{v_{max}}}{v_{lim}}$$

Sabendo que a seção transversal é circular é possível calcular o diâmetro mínimo, porém é necessário colocar um sobredimensionamento de 120% para garantir que alterações nas condições de projeto estejam dentro de um limite de segurança.

$$D_{real}(m) = 1,2 \times \sqrt{\frac{4 \times S_{min}^2}{\pi}}$$

Pode-se calcular também a seção real que será:

$$S_{real}(m^2) = \frac{\pi \times D_{real}^2}{4}$$

Obtido o diâmetro e seção real da torre é necessário obter a altura real, para tanto é necessário determinar a altura mínima de fundo que será responsável por reter o resíduo por um tempo.

Para estimar o valor do nível inferior de líquido (LLL) usa-se a seguinte tabela, levando em consideração que se trata de um vaso vertical e que o diâmetro é conhecido.

Vessel diameter	Vertical LLL		Horizontal LLL
	< 300 psia	> 300 psia	
≤ 4 ft	15 in.	6 in.	9 in.
6 ft	15 in.	6 in.	10 in.
8 ft	15 in.	6 in.	11 in.
10 ft	6 in.	6 in.	12 in.
12 ft	6 in.	6 in.	13 in.
16 ft	6 in.	6 in.	15 in.

Figura 41. Altura para o nível de inferior de líquido (TOWLER e SINNOTT, 2013).

Para estimar o nível normal de líquido (NLL) leva-se em conta os valores tabelados para o tempo de retenção (holdup time) e um surge time, de acordo com a Figura 35

Logo, sabendo a vazão volumétrica de líquido que desce pela seção de esgotamento (Q_{vliq}), é possível calcular o nível normal de líquido.

$$NLL(m) = \left(\frac{Q_{vliq} \times Holdup\ time \times \frac{1h}{60min}}{S_{real}} \right) + LLL$$

Por fim, deve-se calcular o nível máximo de líquido (HLL):

$$H_{HLL-NLL} (m) = \left(\frac{Q_{vliq} \times surge\ time \times \frac{1h}{60min}}{S_{real}} \right)$$

Tendo os dois valores anteriores é possível calcular a altura de fundo da torre que será:

$$H_{fundo}(m) = H_{HLL-NLL} + NLL$$

Logo, a altura da torre será a soma das alturas de fundo e de corpo:

$$H_{total} = H_{corpo} + H_{fundo}$$

Para estimar o custo da torre, primeiramente é necessário estimar a espessura dela, pela seguinte equação:

$$e (mm) = \frac{P_i \times D_{real}}{2 \times S_{ten} \times E - 1,2 \times P_i} + SC$$

Onde:

e – Espessura da torre

Pi – é a pressão de projeto

Dreal - diâmetro do vaso

S_{ten} - tensão máxima que o material suporta

E - Eficiência da solda

SC – Sobre espessura por corrosão

Sendo que a tensão máxima para o aço carbono em temperaturas moderadas (menores que 150°C) é 12,9 ksi e a eficiência da solda é uma constante de valor 0,85 e a sobre espessura por corrosão usada é de 3 mm.

Ademais, a pressão de projeto é a maior pressão sob a qual o processo, em todos os casos a pressão das torres é de 1,4 bar, é conduzido acrescido 10% ou de 1,8 kg/cm². No entanto, se a pressão acrescida pela margem de segurança não ultrapasse o valor de 3,5 kg/cm², será usado esse valor. Sendo assim, tanto para o projeto da torre como para dos vasos pulmões foi utilizado o valor de 3,5 kg/cm².

Estimado a espessura da coluna, calcula-se o peso de material por meio da seguinte equação:

$$W_{vaso}(kg) = 240 \times C_W \times D_m \times (H_{total} + 0,8 \times D_m) \times e$$

Onde:

C_W – fator de complexidade de 1,15

D_m – diâmetro médio, o qual é dado pela seguinte fórmula

$$D_m(m) = D_{real} + e \times 10^{-3}$$

Com isso, tem-se todas as condições para se realizar o cálculo econômico de uma torre de destilação. Sabendo que a equação para o cálculo do custo apresenta a seguinte forma:

$$C = a + b \times S^n$$

Onde os coeficientes são obtidos a partir da Figura 36, o valor de S é o obtido para o peso do vaso tipo vertical, cs.

O custo dos pratos é dado de forma similar a equação anterior, exceto leva-se em conta o número de pratos (np):

$$C_{pratos} = np \times (a + b \times S^n)$$

Os valores dos coeficientes são dados pela Figura 42, sabendo que o tipo de prato usado foi prato com furos (sieve tray).

Equipment	Units for size, S	S lower	S upper	a	b	n
<i>Trays</i>						
Sieve trays	diameter, m	0.5	5.0	110	380	1.8
Valve trays	diameter, m	0.5	5.0	180	340	1.9
Bubble cap trays	diameter, m	0.5	5.0	290	550	1.9

Figura 42. Parâmetros para obtenção de custo dos pratos (TOWLER e SINNOTT, 2013).

Finalmente o custo da torre levando em conta um fator de instalação 4, conforme Figura 39.

$$C_{torre} = 4 \times (C_{vaso} + C_{pratos})$$

Para a otimização econômica do nosso projeto foram calculados valores para 5 tipos de condições variando o número de pratos e conseqüentemente a taxa de refluxo, de forma a se analisar a influência desses fatores no custo e determinar a melhor condição.

Para a primeira torre de destilação foi feita a seguinte tabela a partir dos dados:

Tabela 20. Parâmetros característicos para a T-1102.

Número de pratos	L _D /D	Seção transversal (m ²)	D (m)	H (m)	Espessura (mm)	W (kg)	Custo (US\$)
66	92,83	16,13	5,439	32,33	13,64	86638,27	7188173,60
80	26,21	4,68	2,929	38,79	9,67	32891,04	3129973,22
100	13,18	2,43	2,115	48,24	7,81	23309,63	2328439,02
120	9,747	1,85	1,840	57,46	7,19	22037,88	2223175,15
150	7,737	1,50	1,659	71,27	6,78	23079,66	2319067,22
180	6,823	1,35	1,570	85,08	6,57	25197,82	2506578,82
200	6,453	1,28	1,532	94,29	6,49	26853,84	2651417,25

Para a segunda torre obteve-se os seguintes valores:

Tabela 21. Parâmetros característicos para a T-1103.

Número de pratos	L_D/D	Seção transversal (m^2)	D (m)	H (m)	Espessura (mm)	W (kg)	Custo (US\$)
19	1,886	0,084	0,395	12,36	3,89	553,59	151190,62

Apesar da torre T-1103 apresentar um diâmetro muito pequeno e uma grande altura foi necessário projetá-la de tal forma para se recuperar a maior quantidade de acetona e evitar que a simulação da coluna perca a convergência.

A seguir foi feito um gráfico para ilustra a relação entre o número de pratos e o custo da torre.

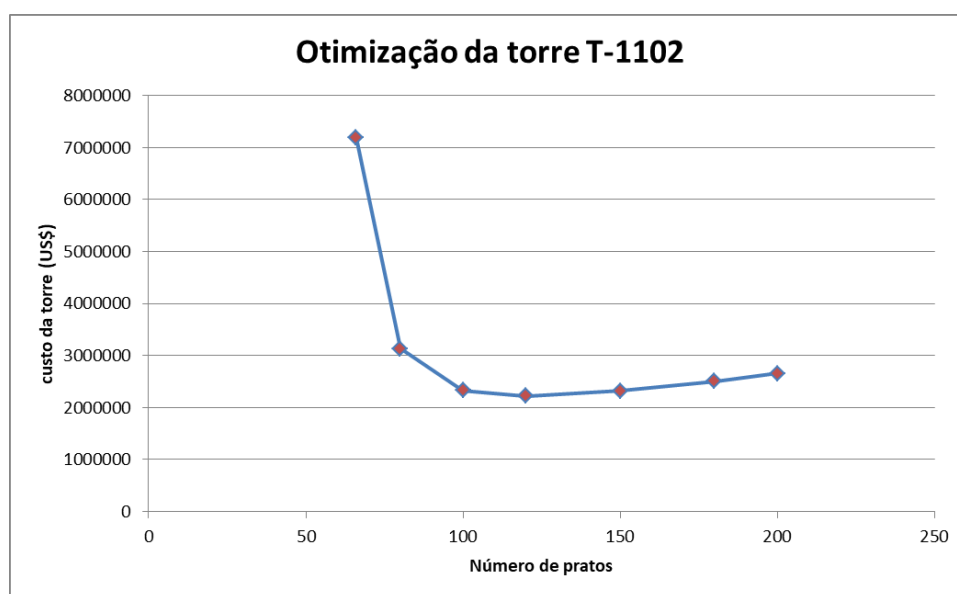


Figura 43. Custo da coluna T-1102 *versus* número de pratos.

4.6.2 Torre de absorção

A torre de absorção tem a mesma funcionalidade das torres de destilação separar os componentes, no caso da torre de absorção são separados em produto de topo, o hidrogênio, e de fundo, a acetona, isopropanol e água. Os cálculos da torre de absorção são os mesmos usados na torre de destilação, portanto temos como

velocidade limite 2,95 m/s; seção transversal mínima 0,062 m; diâmetro com fator de sobredimensionamento 0,34 m; vazão de produto de fundo 0,4802 m³/h.

A torre de absorção tem como número de pratos 20 e por ser uma torre com um diâmetro reduzido será usada uma torre de recheio do tipo "1" anéis Raschig", já que o líquido não é corrosivo e pelo fato desses anéis possuírem um custo menor. A separação entre os anéis foi de 0,5 metros de acordo com os dados apresentados no *Chemical Engineering Design*.

Size, mm	HETP, m
25 (1 in.)	0.4–0.5
38 (1½ in.)	0.6–0.75
50 (2 in.)	0.75–1.0

Figura 44. Altura entre os anéis (TOWLER e SINNOTT, 2013).

Com isso temos uma altura total de 12,11; espessura total de 3,77 mm e peso do material de 447,38 Kg. Para o custo da torre sabemos que o material não é corrosivo, portanto, os anéis de Raschig que serão usados são de cerâmica. Com isso, podemos calcular o custo da torre. Para o custo da torre primeiro é necessário calcular o volume do recheio:

$$V = (\pi/4) * D^2 * H_{pratos} = 0,80m^2$$

O custo do recheio é calculado com base na equação do *Chemical Engineering Design*:

$$C = a + b * S^n$$

Equipment	Units for Size, S	S _{lower}	S _{upper}	a	b	n	Note
<i>Dryers</i>							
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	7,000	0.5	
Spray dryer	evap rate kg/h	400	4,000	410,000	2,200	0.7	
<i>Evaporators</i>							
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
<i>Exchangers</i>							
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
<i>Filters</i>							
Plate and frame	capacity, m ³	0.4	1.4	128,000	89,000	0.5	
Vacuum drum	area, m ²	10	180	-73,000	93,000	0.3	
<i>Furnaces</i>							
Cylindrical	duty, MW	0.2	60	80,000	109,000	0.8	
Box	duty, MW	30	120	43,000	111,000	0.8	
<i>Packings</i>							
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
<i>Pressure vessels</i>							
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

Figura 45. Custo do equipamento adquirido para equipamentos comuns da fábrica.

Usando os dados referentes a *ceramic intalox saddles* temos o custo total do recheio:

$$C = 0 + 2000 \times (0,80)^1 = 1606,70USD$$

Portanto o custo do vaso incluindo o recheio é de 33154,82 US\$ e o custo da torre com a instalação usando o fator de instalação 4 é de 132.619,28 US\$.

5. INSTRUMENTAÇÃO, CONTROLE E SEGURANÇA

Toda planta química precisa funcionar de forma eficiente e segura a fim de que isso seja alcançado é feito um projeto de instrumentação e controle, o qual determinará a instalação de diversos equipamentos para fazer a avaliação de parâmetros de processo, sendo os mais usuais: temperatura; pressão; nível e vazão, assim como o de instrumentos que irão avisar controladores sobre falhas operacionais, para que acidentes decorrentes de mau funcionamento no processo químico sejam evitados.

Os principais equipamentos são os instrumentos de medição e controladores que são responsáveis pelo monitoramento da planta química enquanto que alarmes, válvulas de segurança e intertravamentos estão relacionados com a segurança.

Todas as informações referentes aos instrumentos citados anteriormente, juntamente com a numeração de tubulações e equipamentos são apresentados em um diagrama mecânico do processo, conhecido como *Piping and Instrumentation Diagram* (P&ID). A seguir será listado os principais elementos de controle e segurança da planta química e um P&ID para a torre T-1102.

5.1. Listagem de indicadores

Os indicadores são instrumentos que medem variáveis de processo, sendo as principais: pressão, temperatura, vazão e nível, e conseqüentemente o controlador pode visualizar seu valor numérico, tanto in situ como na sala de controle. A seguir são listados indicadores de diversos tipos.

Tabela 22. Listagem de instrumentos.

INSTRUMENTOS DE VAZÃO		INSTRUMENTOS DE NÍVEL	
Identificação	Localização (núm. da tubulação)	Identificação	Localização (do vaso)
FI	Todas as correntes de processos	LI	V-1101/V-1102/ V-1103/V-1104
FI	Serviços auxiliares	LI	T-1101/T-1102/T- 1103
-	-	-	-
INSTRUMENTOS DE PRESSÃO		INSTRUMENTOS DE TEMPERATURA	
Identificação	Localização (núm. da tubulação ou vaso)	Identificação	Localização (núm. da tubulação ou vaso)
PI	T-1101/T-1102/T-1103	TI	Todos os trocadores
PI	Todas as bombas	TI	R-1101
PI	R-1101	-	-

INSTRUMENTOS DE COMPOSIÇÃO

Identificação	Localização (núm. da tubulação ou vaso)
S	Entrada e saída do reator e torres

5.2. Listagem de controladores

Os controladores servem para manter as variáveis de processo mais relevantes no valor desejado, podendo agir tanto de forma automática como manual pela sala de controle. Seus principais objetivos: são a otimização do processo produtivo através da melhora no rendimento e qualidade dos produtos; automatização das operações e melhora da segurança da planta.

Tabela 23. Listagem de controladores.

Identificação	Localização (núm. da tubulação ou vaso)
FC	Refluxo das torres/ bombas/ trocadores
PC	R-1101 V-1101/V-1102/V-1103
TC	R-1101/trocadores de calor/qualquer etapa que ocorra mudança de temperatura
LC	V-1101/V-1102/V-1103

5.3. Listagem de alarmes

Os alarmes são sinais sonoros e luminosos que tem como principal função garantir a segurança da planta quando algum parâmetro de processo (vazão, nível, pressão, temperatura) não está nos conformes, ou seja, com valor mais alto ou baixo do padrão (set point). Todavia, tais elementos não agem de forma imediata para acionar as ações de controle, logo necessita que um operador humano que veja o sinal dos alarmes na sala de controle tome a decisão para a ação de controle que será realizada. Os alarmes empregados são descritos na tabela a seguir.

Tabela 24. Listagem de alarmes.

Identificação	Localização (número do instrumento ou laço de controle)	Descrição
TAHH TAH TAL PAHH PAH	R-1101	Temperatura muito alta, alta e baixa. Pressão muito alta e alta
LAL LAH	V-1101 V-1102 V-1103	Nível alto e baixo
PAH LAH LAL	T-1101 T-1102 T-1103	Pressão alta Nível alto e baixo

FAL	P-1101 P-1102 P-11103	Fluxo baixo
FAL	Tubulação de refluxo das torres	Fluxo de refluxo baixo

5.4. Listagem de válvulas de segurança

As válvulas de segurança são um elemento extra para se garantir a segurança operacional da planta química. As mesmas são acionadas automaticamente caso um valor crítico seja alcançado, sendo os principais de aumento excessivo de temperatura e pressão e fogo externo no vaso. As válvulas de segurança empregadas são descritas na tabela a seguir.

Tabela 25. Listagem das válvulas de segurança.

Identificação	Localização (número do vaso)	Situação de acionamento
PSV-01	R-1101	Aumento excessivo de temperatura
PSV-02	V-1101	Fogo externo no vaso
PSV-03	V-1102	Fogo externo no vaso
PSV-04	V-1103	Fogo externo no vaso
PSV-05	T-1101	Aumento excessivo de pressão
PSV-06	T-1102	Aumento excessivo de pressão
PSV-07	T-1103	Aumento excessivo de pressão

5.5. Listagem de intertravamentos

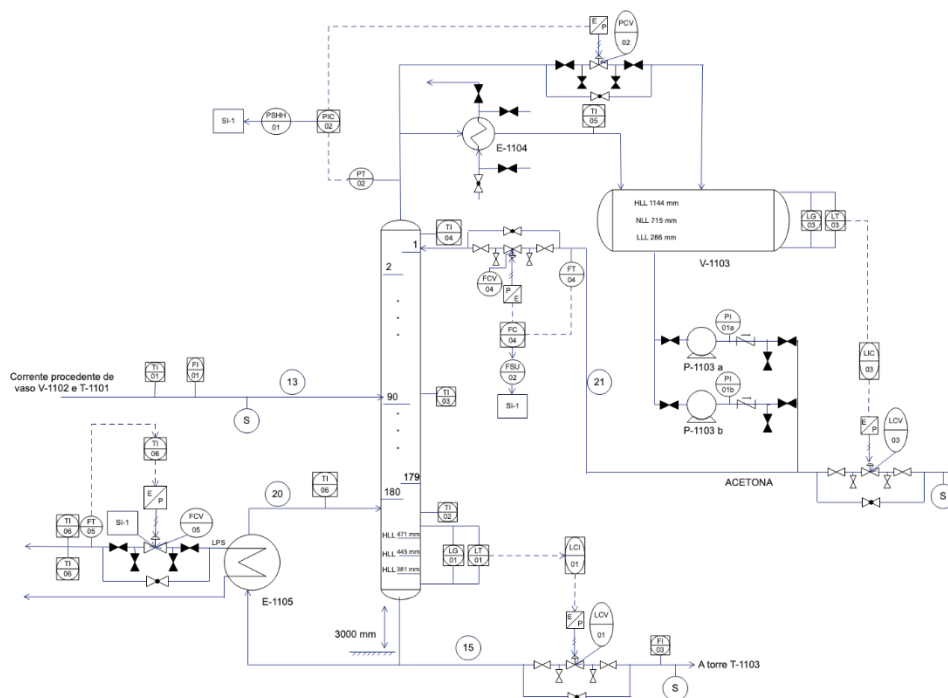
O sistema de intertravamentos funciona como medida de segurança em último caso quando as demais medidas se mostraram ineficazes, esses instrumentos atuam de forma a interromper o processo de produção na planta. Os intertravamentos são acionados de forma computadorizada a partir de alarmes de segundo nível (parâmetros elevados). A seguir lista-se os intertravamentos:

Tabela 26. Listagem de intertravamentos.

Identificação	Localização (número do instrumento ou laço de controle com intertravamento)	Situação de acionamento	Ação sobre
SI-01	R-1101	TAHH/PAHH	Para o aporte de alimentação ao reator ou fluxo de sal fundido
SI-02	T-1102	FALL	Para o aporte de vapor a caldeira
SI-03	T-1103	FALL	Para o aporte de vapor a caldeira

5.6. Diagrama mecânico de processo

A seguir mostra-se o diagrama mecânico de processo (P&ID) para a torre de destilação T-1102.



Equipamento	T-1102	Equipamento	V- 1103	Equipamento	E-1104	Equipamento	E-1105	Equipamento	P-1103
Descrição	Purificador de acetona	Descrição	Acumulador topo	Descrição	Condensador topo	Descrição	Caldeira	Descrição	Bomba refluxo
P topo (KPa)	120	P operacional (KPa)	120	Tipo	Multitubular	Tipo	Kettle	Vazão de op. (m³/h)	19,7
P fundo (KPa)	140	T operacional (C°)	61,1	Lado	Casco Tubo	Lado	Casco Tubo	ΔP (KPa)	621
T topo (C°)	61,1	Altura (m)	1,44	P entrada (KPa)	1,2	P entrada (KPa)	140 60	Potência (KW)	8,41
T fundo (C°)	91,7	Comprimento (m)	6,07	T entrada/saída (C°)	61,2/6,1 30/45	T entrada/saída (C°)	86,6/91,6 160		
Altura (m)	85,1			Área (m²)	70,8	Área (m²)	40,2		
Pratos	180								

Figura 46. Diagrama mecânico (P&ID) da torre para destilação de acetona (T-1102).

6. ANÁLISES ECONÔMICA E AMBIENTAL DA PLANTA

Com todos os parâmetros de projeto dos equipamentos calculados é necessário avaliar o consumo de utilidades para os trocadores de calor e bombas, que são consumo de água de refrigeração e vapor de caldeira; e eletricidade, respectivamente. Feito isso, resta determinar qual será a melhor configuração quanto ao número de pratos para a torre T-1102, ou seja, a que o custo total for o menor. Ademais, será analisado de forma qualitativa o impacto ambiental da planta de produção de acetona.

6.1. Avaliação econômica do processo

As plantas de operação de base química operam por meio do consumo de utilidades. As utilidades fornecem a carga energética ou material necessária para a produção. Utilidades comuns podem ser citadas, tais como: fornecimento de eletricidade, nitrogênio, variedades de água destilada para processos que requeiram elevada pureza e precisão, vapor de caldeira, líquido de arrefecimento, ar comprimido e diversos outros requerimentos para suprir a planta.

A determinação dos custos relacionados as utilidades são normalmente 15% dos custos de produção. É comum, para redução dos custos, integrar correntes de processo a fim de aproveitar demandas de energia, logo, é possível utilizar, por exemplo, recuperação de vapor de caldeira para aquecer outras demandas da planta.

A água de refrigeração é uma utilidade que, geralmente, é utilizada para resfriar uma corrente de processo em alta temperatura. Uma faixa de operação comum para o uso da água de refrigeração varia entre 120°C a 40°C.

Os custos operativos do referente trabalho foram calculados para suprir as demandas da planta de vapor para aquecimento, eletricidade e refrigeração. Dessa forma, referente a refrigeração, ela se dá por meio da corrente de água no condensador. Seu custo pode ser obtido com auxílio da Equação 24.

$$Q = mc_p\Delta T \quad (24)$$

A Equação 24 traz a expressão para o cálculo da troca térmica em um condensador, onde Q é o *duty* do condensador, ΔT é a variação de temperatura da água e c_p é o calor específico da água, cujo valor é $\frac{1kcal}{Kg^{\circ}C}$. Determinado o consumo horário de água, ou seja, a razão $\frac{Q}{\Delta T c_p}$, o custo foi estimado conhecido o valor base de $\frac{0,10USD}{1000gal}$. Ainda, foi considerado um fator de 8000h/ano para estimar o valor total do custo da água de refrigeração. A Equação 25 é obtida a partir da Equação 24.

$$m = \frac{Q}{c_p \Delta T} \left(\frac{kg}{h} \right) \quad (25)$$

O valor do consumo em m^3/ano foi obtido pela divisão do consumo mássico pela massa específica, $\rho_{H_2O} = 993 \frac{kg}{m^3}$ seguido pela multiplicação do resultado pelo fator anteriormente citado de $8000h/ano$. Logo, a Equação 26 trata do consumo volumétrico anual do equipamento.

$$L_{eq} = \frac{m}{\rho_{H_2O}} \times 8000 \left(\frac{m^3}{h} \right) \quad (26)$$

Ainda, o resultado do consumo anual em m^3/ano foi convertido para gal/ano , como segue a Equação 27:

$$L'_{eq} = L_{eq} \times 264,172 \left(\frac{gal}{ano} \right) \quad (27)$$

Por fim, o valor obtido na Equação 27 foi multiplicado pelo fator de custo $\frac{0,10USD}{1000gal}$ para fornecer o resultado em $\frac{USD}{ano}$, como visto abaixo:

$$L' \left(\frac{gal}{ano} \right) \times \frac{0,10USD}{1000gal} = \left(\frac{USD}{ano} \right) \quad (28)$$

O vapor de caldeira é amplamente usado na indústria para aquecimento e geração de energia. Sua principal função é o aquecimento da água e geração de vapor em alta pressão para circular nos tubos da planta, garantindo suprimentos para os trocadores de calor e possivelmente para turbinas de geração de energia elétrica. O custo do vapor vai depender das condições em que este vai operar. Segundo a seção 3.2 do livro *Chemical Engineering Design*, o preço vai depender a pressão de operação e para nosso projeto foi suficiente o fator de $\frac{4,03USD}{1000IB}$.

Em seguida, o custo operativo para o vapor da caldeira foi obtido com auxílio da Equação 29, onde o parâmetro Q_{ee} é a carga energética entregue, \dot{m} é a corrente horária de vapor $\frac{kg}{h}$ e λ é o calor latente de vaporização dado em $\frac{kcal}{kg}$

$$Q_{ee} = \dot{m}\lambda \quad (29)$$

O calor latente de vaporização foi estimado a partir da Equação 30, sendo T °C.

$$\lambda = 606,5 - 0,695T \quad (30)$$

A partir da Equação 29 foi obtido o valor da corrente mássica de vapor da caldeira, visto na Equação 31:

$$\dot{m} = \frac{Q_{ee}}{606,5 - 0,695T} \quad (31)$$

Multiplicando a Equação 31 pelo fator $8000h/ano$ foi obtido a Equação 32, cujo resultado é o valor da corrente mássica em $\frac{kg}{ano}$

$$m' = Q \times 8000 \left(\frac{Kg}{ano} \right) \quad (32)$$

Por fim, o fator disponível para o cálculo do custo operativo foi de $\frac{4,03USD}{1000IB}$, logo é necessário converter a Equação 32 para Ib/ano , por meio do produto pelo termo 2,20462, e, após, multiplicar o resultado pelo fator do custo supracitado. A Equação 33 indica o cálculo necessário para obtenção do custo anual:

$$m' \times 2,20462 \times \frac{4,03USD}{1000IB} = \left(\frac{USD}{ano} \right) \quad (33)$$

Para as bombas a utilidade usada é energia elétrica para alimentação do motor. Tendo sido estimado anteriormente, na fase de custo do projeto, a potência da bomba (kW), o passo seguinte foi multiplicar esse dado por $3600s$ a fim de converter a potência para energia elétrica dada em kJ , e, em seguida foi multiplicado o valor de energia pelo fator $8000h/ano$ e, assim, obtido o consumo anual de energia.

$$w' = w \times 3600 \times 8000 \left(\frac{kJ}{ano} \right) \quad (34)$$

O fator usado para determinação do custo anual foi de $\frac{0,07USD}{kWh}$. Logo, foi necessário conhecer o valor de um kWh para obter o custo anual em USD/ano .

$$1 kWh = 3600 kJ$$

Portanto, a Equação 35 traz o resultado do custo anual:

$$w' \times \frac{0,07USD}{3600kJ} = \left(\frac{USD}{ano} \right) \quad (35)$$

Dessa forma, conhecido os passos para determinação dos custos, a etapa seguinte foi calculá-los. Portanto, a Tabela 27 diz respeito aos trocadores de calor que se encontram na planta, mas não estão acoplados diretamente com as colunas.

Tabela 27. Dados de calor trocador e custo para trocadores de calor.

	E-1101	E-1102	E-1103	E-1108
Calor trocado $\left(\frac{Kcal}{h} \right)$	853404,19	793012,19	110470	41589,27
Custo do trocador $\left(\frac{US\$}{ano} \right)$	115.990,33	114.821,01	113.588,73	16.644,22

O trocador de calor E-1101 é uma caldeira e os demais são condensadores. Dessa forma, aplicado todo o algoritmo necessário para a determinação dos custos operativos, segue a Tabela 28.

Tabela 28. Valores do custo de água de refrigeração para trocadores de calor.

Consumo de água de refrigeração $\left(\frac{US\\$}{ano}\right)$	Trocador
11.251,65	E-1102
2.351,10	E-1103
590,09	E-1108

A Tabela 29 por sua vez, indica o consumo de vapor de caldeira para o trocador de calor E-1101.

Tabela 29. Valores do custo de vapor de caldeira para trocadores de calor.

Consumo do vapor de caldeira (US\$/ano)	Trocador
139.819,41	E-1101

Para os equipamentos da 1ª coluna, têm-se a Tabela 30 os dados referentes aos trocadores.

Tabela 30. Valores de referência para cálculo dos custos dos trocadores.

NP	TROCADOR	Temperatura de entrada do fluido auxiliar (°C)	Temperatura de saída do fluido auxiliar (°C)	Calor trocado (kcal/h)
66	E-1104	30,00	45,00	20.806.246,78
	E-1105	160,00	160,00	20.906.811,39
80	E-1104	30,00	45,00	6.033.361,43
	E-1105	160,00	160,00	6.135.013,68
100	E-1104	30,00	45,00	3.145.183,18
	E-1105	160,00	160,00	3.247.562,28
120	E-1104	30,00	45,00	2.382.957,23
	E-1105	160,00	160,00	2.484.471,02
150	E-1104	30,00	45,00	1.937.191,29
	E-1105	160,00	160,00	2.039.287,07
180	E-1104	30,00	45,00	1.734.709,64
	E-1105	160,00	160,00	1.836.072,67
200	E-1104	30,00	45,00	1.652.556,26
	E-1105	160,00	160,00	1.754.432,20

Vale observar que os dados para os trocadores foram obtidos para um valor especificado de pratos da coluna. Por tanto, para cada número de pratos foi avaliado o custo operativo das utilidades, visando, ao final, realizar uma otimização econômica. Para a otimização econômica foi calculado o ótimo de pratos por meio dos valores relativos aos trocadores de calor, bombas, vasos e torres.

A Tabela 31 traz os valores de custo de água de refrigeração associada aos condensadores da 1ª coluna.

Tabela 31. Consumo de água de refrigeração do trocador E-1104.

Consumo de água de refrigeração	
(US\$/ano)	NP
Trocador E-1104	
295.209,28	66
85.604,31	80
44.625,41	100
33.810,57	120
27.485,82	150
24.612,92	180
23.447,28	200

Analogamente, para o custo de vapor, tem-se a Tabela 32.

Tabela 32. Consumo de vapor de caldeira do trocador E-1105.

Consumo de vapor de caldeira	
(US\$/ano)	NP
Trocador E-1105	
2.992.741,85	66
878.207,19	80
464.877,95	100
355.643,92	120
291.917,29	150
262.827,81	180
251.141,25	200

Para a 2ª Coluna, segue a Tabela 33.

Tabela 33. Consumo de utilidades dos trocadores E-1106 e E-1107.

Consumo de água de refrigeração (US\$/ano)	Trocador
2.301,57	E-1106
Consumo do vapor de caldeira (US\$/ano)	Trocador
24.554,17	E-1107

Em sequência, para as bombas, segue o custo operativo referente ao gasto de eletricidade apresentado na Tabela 34.

Tabela 34. Gasto de utilidades das bombas.

Bomba	Número de pratos	(US\$/ano) 2022
P-1101	Não se aplica	168,56
P-1104	Não se aplica	35,28
	66	21.179,20
	80	7.481,60
	100	4.860,80
P-1103	120	4.379,20
	150	4.412,80
	180	4.709,60
	200	4.972,80
P-1105	19	39,20

Portanto, para obtenção dos custos finais, resultado da soma dos custos de equipamento anualizado pelos custos operativos, foi necessário anualizar os custos de equipamento e corrigir o valor para o ano de projeto. O CEPCI é o *Chemical Engineering Plant Cost Index*, índice importante para anualizar e converter os custos de um ano para outro devido a inflação.

A Equação 36 trata da maneira com que foi calculado o custo anualizado dos equipamentos no ano de 2022.

$$C_{2022} = \frac{C_{2006}CEPSI_{2022}}{CEPSI_{2006}} \quad (36)$$

Da Equação 36, $CEPSI_{2006} = 499,6$ e $CEPSI_{2022} = 833,1$. Para anualizar os custos de equipamento, o valor do custo deve ser multiplicado por 0,163. Portanto, o custo total anual é o custo do equipamento anualizado somado ao custo operativo anual. A Tabela 35 trata dos custos referente aos trocadores de calor e as bombas do processo.

Tabela 35. Relação dos custos de equipamento e de operação.

Equipamento	Identificação no diagrama P&ID	(US\$/ano) 2006	(US\$/ano) 2022	Custo operativo (US\$/ano) 2022	Custo Total (US\$/ano) 2022
Bomba Centrífuga	P-1101	14.902,38	24.850,23	168,56	25.018,79
Bomba Centrífuga	P-1104	14.705,30	24.521,59	35,28	24.556,87
	P-1103(66)	49.631,89	82.762,86	21.179,20	103.942,06
	P-1103(80)	29.284,65	48.833,14	7.481,60	56.314,74
	P-1103(100)	24.354,21	40.611,47	4.860,80	45.472,27
Bomba Centrífuga	P-1103(120)	23.200,52	38.687,66	4.379,20	43.066,86
	P-1103(150)	22.914,16	38.210,14	4.412,80	42.622,94
	P-1103(180)	23.142,24	38.590,47	4.709,60	43.300,07
	P-1103(200)	23.401,50	39.022,80	4.972,80	43.995,60
Bomba Centrífuga	P-1105	14.711,53	24.531,97	39,20	24.571,17
Trocador de Calor	E-1101	18.906,42	31.527,11	139.819,41	171.346,52

Trocador de Calor	E-1102	18.715,82	31.209,27	11.251,65	42.460,92
Trocador de Calor	E-1103	18.514,96	30.874,33	2.351,10	33.225,43
Trocador de Calor	E-1104(66)	148.738,99	248.027,33	295.209,28	543.236,61
	E-1104(80)	47.474,56	79.165,44	85.604,31	164.769,75
	E-1104(100)	31.587,00	52.672,40	44.625,41	97.297,81
	E-1104(120)	27.986,40	46.668,28	33.810,57	80.478,85
	E-1104(150)	25.812,36	43.042,99	27.485,82	70.528,82
	E-1104(180)	24.925,88	41.564,76	24.612,92	66.177,67
	E-1104(200)	24.489,75	40.837,50	23.447,28	64.284,78
Trocador de Calor	E-1105(66)	51.610,52	86.062,30	2.992.741,85	3.078.804,14
	E-1105(80)	26.091,98	43.509,26	878.207,19	921.716,46
	E-1105(100)	21.987,39	36.664,73	464.877,95	501.542,67
	E-1105(120)	20.750,10	34.601,50	355.643,92	390.245,42
	E-1105(150)	20.309,03	33.865,99	291.917,29	325.783,28
	E-1105(180)	20.080,46	33.484,85	262.827,81	296.312,66
	E-1105(200)	19.967,32	33.296,18	251.141,25	284.437,43
Trocador de Calor	E-1106	5.894,47	9.829,23	2.301,57	12.130,80
Trocador de Calor	E-1107	5.584,94	9.313,07	24.554,17	33.867,24
Trocador de Calor	E-1108	2.713,01	4.524,03	590,09	5.114,12

A partir da Tabela 35 foi calculada a otimização de custos da coluna 1 em relação ao número de pratos. Foi somado os custos dos trocadores e das bombas para cada número pratos e obtido a Tabela 36, onde o número de pratos que otimiza os custos vale 150.

Tabela 36. Otimização dos pratos.

Número de Pratos	Custo (US\$/ano)
66	5.985.505,87
80	2.120.929,41
100	1.361.039,50
120	1.189.042,41
150	1.132.275,68
180	1.146.331,54
200	1.171.068,68

A Tabela 37 trata dos custos de equipamento sem anualizar e sem considerar o custo relativo de instalação, os dados da tabela foram importantes para a aplicação do método das porcentagens.

Tabela 37. Custos de equipamento.

Equipamento	Identificação no diagrama P&ID	(US\$) 2006	(US\$) 2022
Bomba Centrífuga	P-1101	11.428,21	19.056,92
Bomba Centrífuga	P-1104	11.277,07	18.804,90
Bomba Centrífuga	P-1103	17.572,21	29.302,25
Bomba Centrífuga	P-1105	11.281,85	18.812,86
Trocador de Calor	E-1101	33.140,09	55.262,23
Trocador de Calor	E-1102	32.806,00	54.705,13

Trocador de Calor	E-1103	32.453,92	54.118,02
Trocador de Calor	E-1104	45.245,16	75.447,84
Trocador de Calor	E-1105	35.598,64	59.361,95
Trocador de Calor	E-1106	10.332,11	17.229,15
Trocador de Calor	E-1107	9.789,55	16.324,40
Trocador de Calor	E-1108	4.755,49	7.929,94
Reator	R-1101	356.411,80	594.328,80
Vaso pulmão	V-1101	24.951,75	41.607,88
Vaso pulmão	V-1103	57.944,85	96.625,01
Vaso pulmão	V-1104	24.541,83	40.924,34
Vaso separador	V-1101	6.848,35	11.419,85
Torre de destilação	T-1102	579.766,81	966.780,88
Torre de destilação	T-1103	37.797,66	63.028,88
Torre de absorção	T-1101	33.154,81	55.286,78
Total			2.296.358,02

A análise econômica visa garantir a viabilidade e lucratividade do projeto. Para tanto, foram utilizados o valor atualizado líquido (VLA) e a taxa interna de retorno (TIR) junto ao método das porcentagens para estudo econômico do processo e projetos a ser implementado.

6.1.1. Custo dos materiais

Seguindo o método das porcentagens, o custo relativo ao material costuma ser um valor entre 60-70% dos custos gastos com equipamentos. Portanto, usando um valor intermediário de 65% para a estimativa, foi obtido o custo de materiais como segue a Tabela 38.

Tabela 38. Custos de equipamento e material.

	Porcentagem (%)	(US\$) 2022
Equipamentos	100,00	2.296.358,02
Materiais	65,00	1.492.632,71
Total	3.788.990,74	

O custo com materiais pode ser subdividido em várias prioridades ou serviços, de tal forma que a Tabela 39 indica essa divisão.

Tabela 39. Divisão dos custos de equipamento.

Serviços	Porcentagem (%)	(US\$) 2022
Materiais	100	1.492.632,71
Obra civil	28	417.937,16
Instrumentação	10	149.263,27
Tubulações e infraestrutura	45	671.684,72
Eletricidade	10	149.263,27
Pintura	2	29.852,65
Isolamento	5	74.631,64
Total	2.985.265,43	

6.1.2. Engenharia de detalhe

Para garantir integridade e segurança do projeto, englobando construção, especificação da documentação e supervisão da execução da obra. O valor destinado a engenharia de detalhe vale varia entre 15-20% do resultado obtido pela soma do custo com equipamentos e materiais. Devido a produção da planta o valor escolhido foi o limite inferior, de 15%. Ainda, os custos de construção de supervisão da obra foram estimados como 60% e 10%, respectivamente. A Tabela 40 traz os resultados calculados.

Tabela 40. Custos de engenharia de detalhe.

	%(E+M)	(US\$) 2022
Engenharia de detalhe	15	568.348,61
Construção	60	2.273.394,44
Supervisão da construção	10	378.899,07
Total		3.220.642,13

6.1.3. Inside Battey Limits (ISBL) e Offsite Costs (OSBL)

O ISBL é resultado da soma de todos os custos da planta. O OSBL está associado com gastos de armazém, transporte, combate a incêndio e estações de tratamento de água, dentre outros, os gastos são estimados como sendo aproximadamente 8% do ISBL. Ainda, são necessários alguns custos para operacionalizar a planta até que esteja funcionando em plena capacidade e gerando o lucro esperado. O custo de arranque compreende aproximadamente 4% do ISBL e compreende o custo inicial de funcionamento da planta até a verificação do retorno financeiro. A taxa de contingência é uma porcentagem de segurança aplicada no custo do ISBL para cobrir imprevistos, seu valor girar em torno de 5% a 15% do ISBL, sendo o valor utilizado a média de 10%. A Tabela 41, a seguir, traz o resultado dos índices citados.

Tabela 41. Relação para determinar o imobilizado.

	(%)	(US\$/ano) 2022
ISBL	100	7.009.632,86
OSBL	8	560.770,63
Arranque	4	280.385,31
Contingência	10	700.963,29
Total		8.551.752,09

O resultado da soma de todas as linhas da Tabela 41 é chamado de capital imobilizado, sendo seu valor igual a 8.551.752,09.

6.1.4. Capital de Giro

O capital de giro foi estimado como sendo 20% do imobilizado, portanto, vale 1.710.350,42 US\$/ano.

6.1.5 Capital de investimento

O capital de investimento é o resultado da soma entre o capital de giro e o imobilizado, logo, seu valor vale 10.262.102,51 US\$/ano. A Tabela 42 traz os resultados para as quantias citadas.

Tabela 42. Capital de investimento.

	Valor (US\$/ano)
Capital de giro	1.710.350,42
Capital de imobilizado	8.551.752,09
Capital de investimento	10.262.102,51

6.1.6 Rentabilidade do projeto

Para garantir a viabilidade e retorno do investimento, normalmente são planejados 3 anos de investimento inicial e mais 20 anos de operação. Na análise temporal é levado em conta a desvalorização da moeda, custos de manutenção, impostos e o montante requerido.

6.1.7. Vendas

A corrente de saída com nosso produto de interesse foi obtida da simulação e vale 2014,48 *kg/h*, ou 16115,84 ton/ano. O custo relativo à acetona foi de 1360 US\$/ton e para o gás hidrogênio foi de 5000 US\$/ton. A Tabela 43 traz uma representação dos custos associado a venda do produto de interesse.

Tabela 43. Custos de venda.

Componente	(US\$/ton)	(ton/ano)	(US\$/ano)
Acetona	1360	16115,84	21.917.542,40
Gás hidrogênio	4000	559,36	2.237.440,00

6.1.8 Custos

Custos são os valores gastos com a planta de maneira direta ou indireta. Os custos diretos são aqueles relacionados diretamente com a produção, como mão de obra, matéria prima e outros, custos indiretos, por sua vez, não estão relacionados de maneira direta com a produção do produto de interesse, são gastos com aluguel, manutenção e outros.

Os custos diretos englobam a matéria prima utilizada, portanto na entrada foram considerados somente o álcool isopropílico, cuja corrente de processo vale 2313,16 *kg/h* e água. As correntes, bem como o custo associado podem ser vistos na Tabela 44.

Tabela 44. Custos de matéria prima.

Matéria prima	(US\$/ton)	(US\$/ano) 2022
IPA	1.019,30	17.063.408,18
Água	2	10.704,00

Seguindo o método das porcentagens, os custos foram especificados como segue a Tabela 45.

Tabela 45. Relação de custos.

	(%)	Variável
Abastecimento	7,6	Imobilizado
Amortização	6,67	Imobilizado
Diretos e empregados	25	Mão-de-obra
Gastos comerciais	7,5	CF
Gerência	4	CF
Manutenção	6	Imobilizado
Mão-de-obra indireta	30	Mão-de-obra
Pesquisas	1	Vendas
Seguros	1	Imobilizado

O custo relativo à mão de obra foi estimado baseado em uma planta com funcionamento intermitente, ou seja, com três turnos de trabalho. Cada turno pode acomodar entre 8 e 12 funcionários que irão trabalhar com a produção, foi escolhido como base 10 funcionários. O custo de cada funcionário vale aproximadamente R\$ 120.000 anuais, ou em dólares, assumindo que 1 dólar vale 5,40US\$, 22.222,22 US\$ por ano. Logo, o custo com mão de obra foi estimado como sendo 222.222,22 US\$. Vale ressaltar que o custo de manutenção citado é associado a manutenção preditiva, preventiva e corretiva. A manutenção preditiva ocorre anualmente ao final do ano com parada de setores da fábrica.

Em relação aos custos com utilidades, o valor total gasto anualmente em 2022 vale 841.982,87US\$.

Tabela 46. Custos.

	(%) - Relativo ao imobilizado	Variável	(US\$)
Abastecimento	7,6	Imobilizado	649.933,16
Amortização	6,67	Imobilizado	570.401,86
Diretos e empregados	25	Mão-de-obra	170.000,00
Gastos comerciais	7,5	Imobilizado	641.381,41
Gerência	4	Imobilizado	342.070,08
Manutenção	6	Imobilizado	513.105,13
Mão-de-obra indireta	30	Mão-de-obra	204.000,00
Pesquisas	1	Vendas	241.549,82
Seguros	1	Imobilizado	85.517,52
Total			3.417.958,98

Portanto, obteve-se os custos gerais anuais para a planta de 22.014.054,03US\$, valor que considerou o custo dos diretos e indiretos da planta.

6.1.9 Valor Atualizado Líquido e Taxa Interna de Retorno

Para avaliação econômica final, foi considerado 3 anos para início das operações e uma análise de 15 anos de operação da fábrica. A inflação utilizada para os cálculos foi de 7,15%. Os parâmetros valor atualizado líquido (VAL) e taxa de retorno (TIR) foram implementados nos cálculos para estudo do fluxo de caixa e averiguação da rentabilidade da planta (Tabela 47).

Tabela 47. Relação para o fluxo de caixa.

Capital de giro	1.710.350,4
Capital imobilizado	8.551.752,09
Curva de investimento do imobilizado	Ano 0: 10% Ano1: 60% Ano2: 30%
Vendas	24,71MM
Amortização	Linear 0,43MM
Impostos	34%
Inflação	7,51%
Juros de ref.	10%

Foi construída uma planilha com o desenvolvimento temporal dos custos ao longo do tempo estabelecido. O imobilizado foi distribuído entre os três primeiros anos. O capital de giro foi investido no ano 2 e recuperado no ano 21. A coluna três foi calculada como sendo a soma entre o imobilizado com o capital de giro.

O passo seguinte foi contabilizar as vendas, custos e amortização para obtenção do lucro bruto. A partir do lucro bruto é retirado a parcela referente ao imposto e determinado o lucro líquido.

Para o cálculo da coluna de fundos gerados, soma-se o rendimento líquido com a amortização, para o fluxo de caixa basta somar o fundo gerado com o fundo investido.

Os fundos são corrigidos anualmente pela Equação 37.

$$F_n = F_{sc}(1 + K)^n \quad (37)$$

Na equação acima, F_n é o fluxo de caixa corrigido para o ano n , K é os juros de referência e F_{sc} é o fluxo de caixa sem correção.

Dessa forma, o cálculo do valor atualizado líquido foi obtido a partir da soma dos fundos atualizados, como na Equação 38.

$$VAL = \sum_{i=0}^n \frac{F_i}{(1 + K)^i} \quad (38)$$

Por sua vez, para o cálculo da taxa de retorno, é preciso conhecer o valor de K quando VAL é igual a 0, após contabilização desse dado, faz-se TIR=K, e, portanto:

$$\sum_{i=0}^n \frac{F_i}{(1 + TIR)^i} \quad (39)$$

Desse modo, caso o valor de VAL seja um número positivo e TIR um valor maior que K, o projeto é considerado rentável.

Tabela 48. Fluxo de caixa.

ANO	Imobilizado	Giro	Fundos investidos	Vendas	Custos	Amortização	Rendimento Bruto	Impostos	Rendimento Líquido	Fundos gerados	Fluxos de caixa	Fluxos atualizados	Fluxos acumulados
0	-0,86		-0,86	-	-	-	-	-	-		-0,86	-0,86	-0,86
1	-5,13		-5,13	-	-	-	-	-	-		-5,13	-4,66	-5,52
2	-2,57	-1,71	-4,28	-	-	-	-	-	-		-4,28	-3,53	-9,05
3	-			24,71	22,02	0,43	2,27	0,77	1,50	1,92	1,92	1,45	-7,61
4	-			26,57	23,67	0,43	2,47	0,84	1,63	2,06	2,06	1,41	-6,20
5	-			28,56	25,45	0,43	2,69	0,91	1,77	2,20	2,20	1,37	-4,84
6	-			30,70	27,35	0,43	2,92	0,99	1,93	2,35	2,35	1,33	-3,51
7	-			33,01	29,41	0,43	3,17	1,08	2,09	2,52	2,52	1,29	-2,21
8	-			35,48	31,61	0,43	3,44	1,17	2,27	2,70	2,70	1,26	-0,95
9	-			38,14	33,98	0,43	3,73	1,27	2,46	2,89	2,89	1,23	0,27
10	-			41,00	36,53	0,43	4,04	1,37	2,67	3,10	3,10	1,19	1,46
11	-			44,08	39,27	0,43	4,38	1,49	2,89	3,32	3,32	1,16	2,63
12	-			47,38	42,22	0,43	4,74	1,61	3,13	3,56	3,56	1,13	3,76
13	-			50,94	45,38	0,43	5,13	1,74	3,38	3,81	3,81	1,10	4,86
14	-			54,76	48,79	0,43	5,54	1,88	3,66	4,09	4,09	1,08	5,94
15	-			58,96	52,45	0,43	5,99	2,04	3,95	4,38	4,38	1,05	6,99
16	-			63,28	56,38	0,43	6,47	2,20	4,27	4,70	4,70	1,02	8,01
17	-	1,71	-0,43	68,02	60,61	0,43	6,99	2,38	4,61	5,04	4,61	0,91	8,92
18	-			73,13	65,15	0,43	7,55	2,57	4,98	5,41	5,41	0,97	9,90
19	-			78,61	70,04	0,43	8,14	2,77	5,37	5,80	5,80	0,95	10,85
20	-			84,51	75,29	0,43	8,79	2,99	5,80	6,23	6,23	0,93	11,77
21	0,86	1,71		90,85	80,94	0,43	9,48	3,22	6,26	6,68	6,68	0,90	12,67
VAL													12,67

O valor do VAL foi de 12,67 milhões de USD por ano e o TIR é um valor que está entre 10% e 11%, portanto a planta é economicamente viável.

O gráfico que segue traz o fluxo de caixa durante os anos de análise econômica, visando realizar a estimativa de 15 anos. O gráfico que segue traz o fluxo de caixa durante os anos de análise econômica, visando realizar a estimativa de 15 anos.

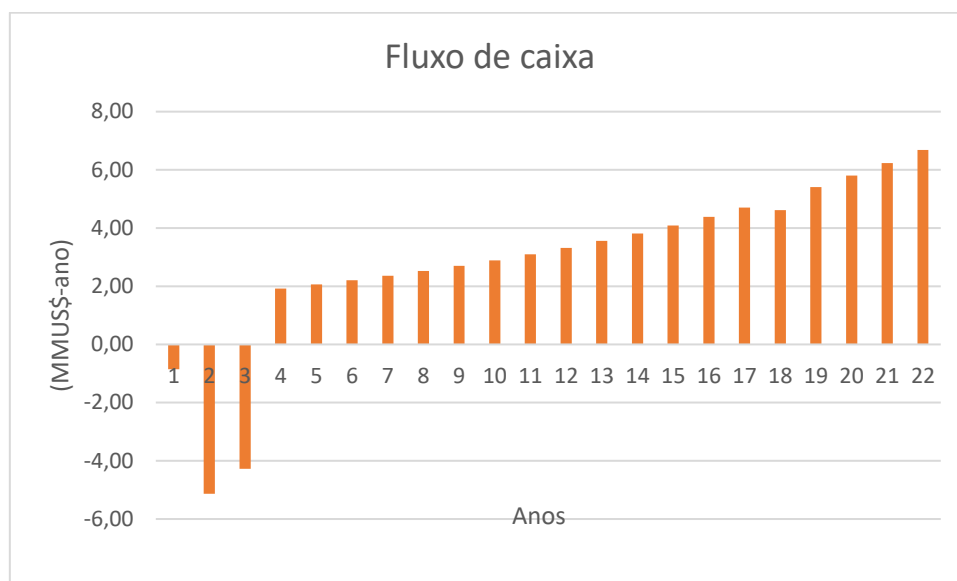


Figura 47. Gráfico do fluxo de caixa.

Pelo gráfico, pode-se ver que o fluxo de caixa se torna rentável a partir do terceiro ano de funcionamento da planta.

6.2. Avaliação de impacto ambiental

Nesta seção será discutido qualitativamente o impacto ambiental que pode ser causado pela planta química de produção de acetona via desidrogenação de álcool isopropílico.

Nas últimas décadas, a preocupação com o meio ambiente ganhou expressiva força. O mundo tem se empenhado em determinar e implementar políticas para um desenvolvimento sustentável. Entre alguns exemplos estão a Agenda 2030 e o Acordo de Paris em 2015 e, mais recentemente, a 26ª Conferência das Nações Unidas sobre Mudança do Clima (COP26) que ocorreu em 2021 na Escócia.

A Agenda 2030 possui 17 Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS), tais como construir infraestrutura resiliente, promover a industrialização inclusiva e sustentável e fomentar a inovação (ODS 9), garantir padrões de produção e de consumo sustentáveis (ODS 12) e adotar medidas urgentes para combater as

alterações climáticas e seus impactos (ODS 13). O Acordo de Paris consistiu em um acordo entre diversos países acerca das mudanças climáticas e objetiva manter o aumento da temperatura média global abaixo de 2 °C. Já a COP26 resultou no Pacto Climático de Glasgow, o qual compreende uma série de medidas para reduzir as emissões globais de gases provenientes da queima de combustíveis fósseis que intensificam o efeito estufa e, assim, favorecem o aquecimento global (ABNETT e VOLCOVICI, 2021).

Em sua obra, Oliveira *et al.* (2021) enfatiza que empresas que se preocupam com o impacto ambiental de suas linhas de produção, não só contribuem para o meio ambiente, como também para a sua própria economia, reduzindo custos associados à obtenção de matéria-prima quando conseguem introduzir um reciclo em sua linha de produção, por exemplo, ou ainda quando conseguem reduzir o consumo de energia e água. Além disso, visto que atualmente as questões relacionadas à sustentabilidade, meio ambiente e temas semelhantes estão cada vez mais presentes e incorporados em nossa sociedade, bem como no plano de negócios de muitas empresas, adotar uma produção sustentável tem proporcionado boa reputação e vantagem competitiva no mercado, atraindo investidores e clientes que também estão diante desse cenário. Para que as empresas de fato implementem ações que visam diminuir os impactos ambientais, econômicos e sociais, os autores sugerem que as empresas busquem por ferramentas desenvolvidas a partir dos conceitos de Ecoeficiência, Economia Circular, Ciclo de Vida de Produtos e Serviços, Produção mais Limpa e Avaliação do Ciclo de Vida (ACV).

A avaliação do impacto ambiental de uma planta química de produção de acetona via desidrogenação de álcool isopropílico pode ser realizada através de ecoindicadores como consumo de energia e de água, emissão de CO₂ e geração de efluentes. A seguir serão apresentados alguns exemplos de análise desses parâmetros envolvendo o processo abordado.

Em seu estudo, Gonçalves e Minguita (2017), através de simulações utilizando o software UniSim Design Suite R390®, determinaram os ecoindicadores para comparar o cenário antes e após tomarem medidas para a melhoria ambiental da planta (muito semelhante à planta do presente trabalho), tais como inclusão de reciclo

de água e integração energética. Como resultado, os autores obtiveram uma redução de 54,28% no descarte da água da segunda torre de destilação ao reciclá-la para a torre de absorção. Além disso, foi feita uma integração energética nas correntes do reator, onde a corrente de saída passou a aquecer a corrente de entrada do próprio e, assim, houve uma redução de 1,07% do consumo energético e de 7,05% do consumo de água para a geração de vapor.

No estudo de Tohaneanu *et al.* (2014) foi realizada uma integração energética entre correntes quentes e frias do processo. Para isso, utilizaram da metodologia *Pinch* e obtiveram uma economia de 35% para os serviços quentes e 37% para os serviços frios para a planta com integração energética em comparação à planta sem integração energética. Semelhantemente, o trabalho de Tonial (2018) concluiu que com a integração energética o gasto anual com utilidades quentes e frias passou de R\$ 1.851.901,58 para R\$ 869.630,02 sem que a eficiência do processo fosse comprometida.

Já a proposta de Luyben (2010) consistiu em aumentar a pressão no absorvedor para que as perdas de acetona fossem minimizadas. Com isso, as temperaturas do reator, das colunas e do vaporizador também foram aumentadas. Mesmo com a elevação dessas temperaturas, o custo total de energia (em colunas, reator, condensador e vaporizador) ficou em 780 mil dólares por ano contra 842 mil dólares por ano para a planta sem as modificações.

No presente trabalho, foi possível perceber que os trocadores de calor são os que apresentam maior custo energético e operativo anual, devido ao elevado consumo de água de refrigeração e vapor (veja seção 6.1).

Diante desta observação e com base nos trabalhos citados, uma sugestão para a avaliação ambiental do presente trabalho, além de manter o ciclo de IPA e água existente (corrente 17), consiste em avaliar quantitativamente os impactos no consumo de eletricidade, de água, de água de refrigeração e de vapor de aquecimento ao se reciclar a água residual ao final do processo para o absorvedor e ao se realizar a integração energética entre os trocadores de calor E-1101, E-1102 e E-1103 e entre o trocador de calor E-1108 e a corrente de refluxo da torre de destilação T-1103. A corrente de quente obtida pelos refrigeradores E-1102 e E-1103,

ao resfriar a corrente 06, pode ser utilizada para aquecer a corrente de frio que entra na caldeira E-1101 (corrente 04). Já o calor retirado da corrente 18 pelo refrigerador E-1108 pode ser utilizado para aquecer a corrente de refluxo da torre de destilação T-1103 (corrente 23).

Em relação à emissão de CO₂, o ponto crítico da planta se encontra nas caldeiras – equipamentos responsáveis pela produção de vapor a partir da queima de combustíveis, desde os fósseis aos renováveis. Reduzir a emissão de gás carbônico é crucial para o planeta, uma vez que é o principal responsável por intensificar o efeito estufa e, assim, o aquecimento global. Entre os combustíveis utilizados nas caldeiras estão gasolina, óleo diesel, óleo combustível, alcoois, óleos vegetais, GLP, lenha, cavaco, briquete e biomassa. O estudo de Ramos *et al.* (2017) objetivou substituir três caldeiras alimentadas a petróleo de baixa influência (óleo BPF) por uma caldeira alimentada por biomassa (cavaco de eucalipto) em uma indústria no sul de Minas Gerais. Como resultado, os autores obtiveram benefícios tanto ambientais, quanto econômicos. No âmbito econômico, a empresa conseguiu uma redução de custos de quase 64% no valor do combustível. Já no âmbito ambiental, através dos inventários de emissões publicados pela empresa foi possível comprovar a redução nas emissões de gases de efeito estufa. Logo, é de suma importância que se identifique quais os tipos de caldeiras presentes na planta e os combustíveis que elas utilizam. Assim, torna-se possível realizar simulações com outros tipos de caldeiras a fim de identificar a quantidade de emissão de CO₂, entre outros gases.

Portanto, para quantificar o impacto ambiental da planta em estudo, pode-se fazer uso da avaliação do ciclo de vida da planta química e/ou da análise de ecoindicadores. Posteriores estudos quantitativos, comparando a planta sem e com modificações, serão importantes não só para contribuir na minimização de impactos ambientais, como de custos com matéria-prima e operacionais, visando aumentar a ecoeficiência da planta e, portanto, a sua sustentabilidade e rentabilidade.

7. CONCLUSÕES

O projeto de uma planta química engloba o estudo de diversos fatores, como o dimensionamento dos equipamentos envolvidos no processo, otimização, instrumentação, controle, avaliação econômica e ambiental. Assim, esses passos foram seguidos para projetar uma unidade da produção de acetona a partir do álcool isopropílico.

Como foi visto, a conversão do isopropanol em acetona é em torno de 90%. Além disso, foi possível obter o produto com pureza molar de 99,62%, potencializada pelo reciclo do álcool isopropílico, que retorna ao processo.

A partir da avaliação econômica, percebe-se que o projeto possui boa rentabilidade, com perspectiva de lucro na venda dos produtos. Isso se deve, principalmente, pelo valor comercial do gás hidrogênio, formado como subproduto da reação. Já com a avaliação ambiental, nota-se que o reciclo já existente no processo colabora com o máximo de aproveitamento da matéria-prima e a adição de mais um reciclo, pode reduzir o descarte de água residual. A integração energética de algumas correntes pode minimizar o consumo de água de refrigeração e vapor. Além disso, dar uma atenção especial às caldeiras presentes nas plantas, bem como os combustíveis que utilizam, pode reduzir as emissões de CO₂ e outros gases que intensificam o efeito estufa. Estudos mostraram que a redução de impactos ambientais dos processos influencia positivamente no âmbito econômico das indústrias/empresas.

Apesar do projeto ter se mostrado eficiente em relação a obtenção da acetona por essa cinética de reação, é necessária uma análise mais robusta para que se aproxime da realidade.

8. BIBLIOGRAFIA

ABNETT, K.; VOLCOVICI, V. **O pacto de Glasgow foi uma vitória para o clima? Só o tempo dirá.** CNN Brasil, 2021. Disponível em: <<https://www.cnnbrasil.com.br/internacional/o-pacto-de-glasgow-cupula-clima-cop-onu-vitoria>>. Acesso em: 27 set. 2022.

BARATELLA, J., **Análise de risco da produção de acetona via desidrogenação do álcool isopropílico.** Trabalho de Graduação. Universidade Federal de São Carlos. São Carlos – SP, 2019.

CAMPOS, M.; LEÃO, C.; AMORIM, L. **O hidrogênio como fonte de energia: uma visão regulatória.** Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2021.

CAO, E. **Heat Transfer in Process Engineering.** 2010.

CHAUVEL, A. **Petrochemical Process Technical and Economics Characteristics.** Institut Français du Pétrole Publications: Paris, 1989, cap. 10.

CHRISTIE, J. G.; HERSEL A. A.; LEPEK, D. H. **Transport Processes and Separation Process Principles.** 5. ed. Pearson, 2018.

CUNHA, A. V. **Análise e melhoria econômica do processo de produção de acetona pela desidrogenação do 2-propanol (IPA) usando o simulador de processos COCO.** Monografia. Universidade Federal de Uberlândia. Uberlândia – MG, 2019.

FILHO, G. F. **Bombas, ventiladores e compressores: fundamentos.** São Paulo: Érica, 2015.

FOGLER, H. S. **Elementos de Engenharia de Reações Químicas.** 4. ed. 854 p. Rio de Janeiro, 2009

GOMIDE, Reynaldo. **Operações com Fluidos.** Edição do Autor. São Paulo, 1997.

GONÇALVES, C. C. R.; MINGUITA, H. F. **Estudo de uma planta industrial de produção de acetona via desidrogenação do 2-propanol.** Projeto Final de Bacharelado em Engenharia Química. Universidade Federal Fluminense, Niterói – RJ, 2017.

IHS MARKIT. **MERCADO ÁLCOOL ISOPROPÍLICO (IPA) – CRESCIMENTO, TENDÊNCIAS, IMPACTO COVID-19 E PREVISÕES (2022 - 2027).** Disponível em: <<https://www.mordorintelligence.com/pt/industry-reports/isopropyl-alcohol-market>>. Acesso em: 27 set. 2022.

IHS MARKIT. **MERCADO ÁLCOOL ISOPROPÍLICO (IPA) – CRESCIMENTO, TENDÊNCIAS, IMPACTO COVID-19 E PREVISÕES (2022 - 2027).** Disponível em: <<https://ihsmarkit.com/products/isopropyl-alcohol-ipa-chemical-economics-handbook.html>>. Acesso em: 27 set. 2022.

IHS MARKIT. MERCADO DE ACETONA - CRESCIMENTO, TENDÊNCIAS, IMPACTO DA COVID-19 E PREVISÕES (2022-2027). Disponível em: <<https://www.mordorintelligence.com/pt/industry-reports/acetone-market#:~:text=o%20mercado%20de%20acetona%20%c3%a9,durante%20o%20per%20adodo%20de%20previs%c3%a3o>>. Acesso em: 27 set. 2022.

IHS MARKIT. MERCADO DE ACETONA - CRESCIMENTO, TENDÊNCIAS, IMPACTO DA COVID-19 E PREVISÕES (2022-2027). Disponível em: <<https://ihsmarkit.com/products/acetone-chemical-economics-handbook.html>>. Acesso em: 27 set. 2022.

LINARES, J. Apresentação em Power Point: Unidade 3.2 - Trocadores de Calor, 2022.

LLACTA, A. R. C. *et al.* Design of an acetone production plant via catalytic dehydrogenation of isopropyl alcohol. Universidad Nacional de Ingenieria, Lima - Peru, 2015.

LOXAM DEGRAUS. Entenda o funcionamento de uma bomba centrífuga. Disponível em: <<https://degraus.com.br/entenda-o-funcionamento-de-uma-bomba-centrifuga>>. Acesso em: 25 set. 2022

LUYBEN, W. **Design and Control of the Acetone Process via Dehydrogenation of 2-Propanol**. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2010.

LUYBEN, W. L. **Design and Control of the Acetone Process via Dehydrogenation of 2-Propanol**. Ind. Eng. Chem. Res. 50, 1206–1218, 2011.

LUYBEN, W. L. **Design of Cooled Tubular Reactor Systems**. Ind. Eng. Chem. Res. 40, 5775-5783, 2001.

MACINTYRE, A. J. **Bombas e instalações de bombeamento**. 2. ed., Rio de Janeiro, 1997.

MANGILI, P. V. *et al.* **Avaliação dos impactos ambientais no processo produtivo de acetona via isopropanol através de simulação computacional**. Conference: XII National Congress of Excellence in Management & III INOVARSE. 2016.

NAÇÕES UNIDAS BRASIL. **Objetivos de Desenvolvimento Sustentável**. Nações Unidas Brasil. Disponível em: <<https://brasil.un.org/pt-br/sdgs>>. Acesso em: 27 set. 2022.

OGATA, Y. *et al.* **Shell-and-tube reactor**. United States Patent, 2003.

OLIVEIRA, J. A. *et al.* **Life Cycle Engineering and Management of Products: Theory and Practice**. Springer, 2021.

O'NEIL, M. J. **The Merck Index: An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals**. 14. ed. New Jersey: Merck, 2006.

RAMOS, L. C. de C.; SANDY, A. M.; JUDICE, L. V. M. da R.; JUDICE, G. H.; ALMEIDA, D. H. de. **Capítulo 3: Viabilidade da substituição de caldeiras de acordo com a utilização de diferentes tipos de combustíveis.** *In:* Tópicos em Gestão da Produção – Volume 7. Belo Horizonte - MG: Poisson, 2017.

SERTH, R. W. **Process Heat Transfer Principles and Applications.** 2010.

TOHANEANU, M.; PLESU, V.; IANCU, P.; BUMBAC G.; RUIZ, A. E. B.; RUIZ, J. B. **Simulation and Process Integration of Clean Acetone Plant.** Chemical Engineering Transactions, 39, p. 469-474, 2014.

TONIAL, G. M. B. **Integração energética em uma rede de trocadores de calor de uma planta de produção de acetona.** Orientador: André Zuber. 2018. Trabalho de Conclusão (Bacharelado em Engenharia Química) – Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Francisco Beltrão, 2018.

TONIAL, G. M. B., **Integração energética em uma rede de trocadores de calor de uma planta de produção de acetona.** Trabalho de Conclusão de Curso. Universidade Federal do Paraná (UFP). Beltrão, 2018.

TOWLER, G. SINNOT, R. **Chemical Engineering Design: Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design.** 2. ed. Butterworth-Heinemann: Elsevier, 2013.

TURTON, R. *et al.* **Analysis, synthesis and design of Chemical processes.** 1. ed. 2018

VARGAS, R. A. *et al.* **Hidrogênio: O vetor energético do future?.** Departamento de Administração, Faculdade Alfacastelo, São Paulo, 2018.

VELLASCO, W. T. **Método de Preparação Industrial de Solventes e Reagentes Químicos.** *Revista Vistual de Química*, Volume 3 - Número 4, pag. 339-343. 2011.

APÊNDICE A – FOLHAS DE ESPECIFICAÇÃO

CORRENTES MATERIAIS

Número de corrente	01	
Descrição	Alimentação de álcool isopropílico (IPA)	
Pressão	101	kPa
Temperatura	25	°C
Vazão mássica	2401	kg/h
Vazão molar	51,96	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	3,054	m ³ /h
Peso molecular	46,21	kg/kmol
Densidade	786,2	kg/m ³
Viscosidade	1,726	cP
Condutividade térmica	0,2465	W/m·°C
Calor específico	3,257	kJ/kg·°C
Tensão superficial	39,17	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m·°C
Calor específico	-	kJ/kg·°C
Fator de compressibilidade	-	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,6701	0,8714
Acetone	0,0000	0,0000

Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	0,3299	0,1286

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	02	
Descrição	Alimentação de água	
Pressão	150	kPa
Temperatura	25	°C
Vazão mássica	360,3	kg/h
Vazão molar	20	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	0,3577	m ³ /h
Peso molecular	18,02	kg/kmol
Densidade	1007	kg/m ³

Viscosidade	0,8904	cP
Condutividade térmica	0,6110	W/m.°C
Calor específico	4,202	kJ/kg.°C
Tensão superficial	72,10	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @P e T de operação	-	m³/h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m.°C
Calor específico	-	kJ/kg.°C
Fator de compressibilidade	-	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,0000	0,000
Acetone	0,0000	0,0000
Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	1,0000	1,0000

--	--	--

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	03	
Descrição	Junção da corrente de alimentação e reuso de IPA	
Pressão	101	kPa
Temperatura	30,81	°C
Vazão mássica	2655	kg/h
Vazão molar	57,42	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	3,404	m ³ /h
Peso molecular	46,24	kg/kmol
Densidade	779,9	kg/m ³
Viscosidade	1,473	cP
Condutividade térmica	0,2458	W/m·°C
Calor específico	3,278	kJ/kg·°C
Tensão superficial	38,32	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	--	W/m·°C
Calor específico		kJ/kg·°C
Fator de compressibilidade	-	
COMPOSIÇÃO		

Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,6703	0,8712
Acetone	0,0004	0,0005
Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	0,3292	0,1283

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	04	
Descrição	IPA com reuso após passar em uma bomba	
Pressão	230	kPa
Temperatura	30,93	°C
Vazão mássica	2655	kg/h
Vazão molar	57,42	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		

Vazão volumétrica @P e T de operação	3,404	m ³ /h
Peso molecular	46,24	kg/kmol
Densidade	779,9	kg/m ³
Viscosidade	1,468	cP
Condutividade térmica	0,2458	W/m.°C
Calor específico	3,279	kJ/kg.°C
Tensão superficial	38,30	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	--	W/m.°C
Calor específico		kJ/kg.°C
Fator de compressibilidade	-	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,6703	0,8712
Acetone	0,0004	0,0005
Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	0,3292	0,1283

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	05	
Descrição	Vapor de IPA após trocador de calor	
Pressão	230	kPa
Temperatura	234	°C
Vazão mássica	2655	kg/h
Vazão molar	57,42	kmol/h
Entalpia total		Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	1	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m.°C
Calor específico	-	kJ/kg.°C
Tensão superficial	-	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @P e T de operação	1121	m ³ /h
Peso molecular	46,24	kg/kmol
Densidade	2,369	kg/m ³
Viscosidade	0,0122	cP

Condutividade térmica	0,0322	W/m·°C
Calor específico	2,174	kJ/kg·°C
Fator de compressibilidade	1	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,6703	0,8712
Acetone	0,0004	0,0005
Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	0,3292	0,1283

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	06	
Descrição	Reagentes e produtos após reator	
Pressão	191	kPa
Temperatura	350	°C
Vazão mássica	2655	kg/h
Vazão molar	92,10	kmol/h

Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	1	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m.°C
Calor específico	-	kJ/kg.°C
Tensão superficial	-	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @P e T de operação	2498	m ³ /h
Peso molecular	28,83	kg/kmol
Densidade	1,063	kg/m ³
Viscosidade	0,0210	cP
Condutividade térmica	0,0897	W/m.°C
Calor específico	2,497	kJ/kg.°C
Fator de compressibilidade	1	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,0413	0,0861
Acetone	0,3769	0,7593
Hydrogen	0,3766	0,0263
H2O	0,2052	0,1283

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	07	
Descrição	Primeiro resfriamento do produto do reator	
Pressão	201,3	kPa
Temperatura	45	°C
Vazão mássica	2655	kg/h
Vazão molar	92,10	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0,5231	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	2,361	m ³ /h
Peso molecular	42,59	kg/kmol
Densidade	792,4	kg/m ³
Viscosidade	0,3772	cP
Condutividade térmica	0,2844	W/m·°C
Calor específico	2,634	kJ/kg·°C
Tensão superficial	39,90	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @P e T de operação	633,1	m ³ /h

Peso molecular	16,28	kg/kmol
Densidade	1,239	kg/m ³
Viscosidade	0,0125	cP
Condutividade térmica	0,0933	W/m·°C
Calor específico	2,502	kJ/kg·°C
Fator de compressibilidade	1	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,0413	0,0861
Acetone	0,3769	0,7593
Hydrogen	0,3766	0,0263
H2O	0,2052	0,1283

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	08	
Descrição	Segundo resfriamento do produto do reator	
Pressão	163	kPa

Temperatura	20	°C
Vazão mássica	2655	kg/h
Vazão molar	92,10	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0,4290	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	2,852	m ³ /h
Peso molecular	44,13	kg/kmol
Densidade	813,7	kg/m ³
Viscosidade	0,5024	cP
Condutividade térmica	0,2710	W/m·°C
Calor específico	2,501	kJ/kg·°C
Tensão superficial	41,68	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	590,9	m ³ /h
Peso molecular	8,467	kg/kmol
Densidade	0,5663	kg/m ³
Viscosidade	0,0099	cP
Condutividade térmica	0,1253	W/m·°C
Calor específico	3,952	kJ/kg·°C
Fator de compressibilidade	1	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,0413	0,0861
Acetone	0,3769	0,7593
Hydrogen	0,3766	0,0263
H2O	0,2052	0,1283

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	09	
Descrição	Fase vapor do vaso de separação	
Pressão	163	kPa
Temperatura	20	°C
Vazão mássica	334,6	kg/h
Vazão molar	39,52	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	1	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m.°C
Calor específico	-	kJ/kg.°C

Tensão superficial	-	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	590,9	m ³ /h
Peso molecular	8,467	kg/kmol
Densidade	0,5663	kg/m ³
Viscosidade	0,0099	cP
Condutividade térmica	0,1253	W/m·°C
Calor específico	3,952	kJ/kg·°C
Fator de compressibilidade	1	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,0031	0,0217
Acetone	0,1087	0,7457
Hydrogen	0,8771	0,2088
H2O	0,0112	0,0237

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	10	
Descrição	Fase líquida do vaso de separação	
Pressão	163	kPa
Temperatura	20	°C
Vazão mássica	2320	kg/h
Vazão molar	52,59	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	2,852	m ³ /h
Peso molecular	44,13	kg/kmol
Densidade	813,7	kg/m ³
Viscosidade	0,5024	cP
Condutividade térmica	0,2710	W/m.°C
Calor específico	2,501	kJ/kg.°C
Tensão superficial	41,68	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m.°C
Calor específico	-	kJ/kg.°C
Fator de compressibilidade	-	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,0700	0,0954

Acetone	0,5784	0,7613
Hydrogen	0,0005	0,000
H2O	0,3511	0,1433

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	11	
Descrição	Fase vapor da torre de absorção (gás hidrogênio)	
Pressão	150	kPa
Temperatura	34,77	°C
Vazão mássica	237,7	kg/h
Vazão molar	38,53	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	1	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol

Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m.°C
Calor específico	-	kJ/kg.°C
Tensão superficial	-	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	657,6	m ³ /h
Peso molecular	6,159	kg/kmol
Densidade	0,3608	kg/m ³
Viscosidade	0,0093	cP
Condutividade térmica	0,1412	W/m.°C
Calor específico	5,133	kJ/kg.°C
Fator de compressibilidade	1	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,0000	0,0003
Acetone	0,0635	0,5990
Hydrogen	0,9002	0,2947
H2O	0,0363	0,1060

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	12	
Descrição	Fase líquida da torre de absorção	
Pressão	163	kPa
Temperatura	25,94	°C
Vazão mássica	457,7	kg/h
Vazão molar	21,01	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	0,4802	m ³ /h
Peso molecular	21,78	kg/kmol
Densidade	953,1	kg/m ³
Viscosidade	0,7763	cP
Condutividade térmica	0,5518	W/m·°C
Calor específico	3,3698	kJ/kg·°C
Tensão superficial	67,45	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m·°C
Calor específico	-	kJ/kg·°C
Fator de compressibilidade	-	

COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,0057	0,0157
Acetone	0,0880	0,2346
Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	0,9063	0,7496

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	13	
Descrição	Fase líquida do vaso separador e da torre de absorção	
Pressão	163	kPa
Temperatura	20	°C
Vazão mássica	2778	kg/h
Vazão molar	73,57	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	

PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	3,315	m ³ /h
Peso molecular	37,76	kg/kmol
Densidade	838,1	kg/m ³
Viscosidade	0,5722	cP
Condutividade térmica	0,3367	W/m·°C
Calor específico	2,697	kJ/kg·°C
Tensão superficial	49,34	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m·°C
Calor específico	-	kJ/kg·°C
Fator de compressibilidade	-	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,0517	0,0823
Acetone	0,4385	0,6745
Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	0,5098	0,2432

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	14	
Descrição	Produto de topo da primeira torre de destilação (acetona)	
Pressão	120	kPa
Temperatura	61,14	°C
Vazão mássica	1880	kg/h
Vazão molar	32,36	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	2,545	m ³ /h
Peso molecular	58,09	kg/kmol
Densidade	738,5	kg/m ³
Viscosidade	0,2163	cP
Condutividade térmica	0,1429	W/m.°C
Calor específico	2,260	kJ/kg.°C
Tensão superficial	19,75	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP

Condutividade térmica	-	W/m.°C
Calor específico	-	kJ/kg.°C
Fator de compressibilidade	-	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,0038	0,0039
Acetone	0,9962	0,9961
Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	0,0000	0,0000

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	15	
Descrição	Produto de fundo da primeira torre de destilação	
Pressão	140	kPa
Temperatura	92,50	°C
Vazão mássica	898,2	kg/h
Vazão molar	41,21	kmol/h

Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	1,019	m ³ /h
Peso molecular	21,80	kg/kmol
Densidade	881,3	kg/m ³
Viscosidade	0,3478	cP
Condutividade térmica	0,6006	W/m.°C
Calor específico	4,007	kJ/kg.°C
Tensão superficial	55,94	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m.°C
Calor específico	-	kJ/kg.°C
Fator de compressibilidade	-	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,0893	0,2462
Acetone	0,0006	0,0016
Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	0,9101	0,7522

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	16	
Descrição	Entrada da segunda torre de destilação	
Pressão	230	kPa
Temperatura	92,55	°C
Vazão mássica	898,2	kg/h
Vazão molar	41,21	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	1,019	m ³ /h
Peso molecular	21,80	kg/kmol
Densidade	881,3	kg/m ³
Viscosidade	0,3476	cP
Condutividade térmica	0,6006	W/m·°C
Calor específico	4,007	kJ/kg·°C
Tensão superficial	55,93	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @P e T de operação	-	m ³ /h

Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m·°C
Calor específico	-	kJ/kg·°C
Fator de compressibilidade	-	

COMPOSIÇÃO

Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,0893	0,2462
Acetone	0,0006	0,0016
Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	0,9101	0,7522

CORRENTES MATERIAIS

Número de corrente	17	
Descrição	Produto de topo da segunda torre destilação (corrente de reuso)	
Pressão	120	kPa

Temperatura	84,10	°C
Vazão mássica	254,4	kg/h
Vazão molar	5,472	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	0,3541	m ³ /h
Peso molecular	46,49	kg/kmol
Densidade	718,4	kg/m ³
Viscosidade	0,4613	cP
Condutividade térmica	0,2339	W/m·°C
Calor específico	3,491	kJ/kg·°C
Tensão superficial	30,50	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m·°C
Calor específico	-	kJ/kg·°C
Fator de compressibilidade	-	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,6724	0,8692
Acetone	0,0045	0,0056
Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	0,3231	0,1252

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	18	
Descrição	Produto de fundo da segunda torre de destilação	
Pressão	140	kPa
Temperatura	109,3	°C
Vazão mássica	643,8	kg/h
Vazão molar	35,74	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	0,6850	m ³ /h
Peso molecular	18,02	kg/kmol
Densidade	940	kg/m ³
Viscosidade	0,2540	cP
Condutividade térmica	0,6841	W/m.°C
Calor específico	4,211	kJ/kg.°C

Tensão superficial	56,82	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m·°C
Calor específico	-	kJ/kg·°C
Fator de compressibilidade	-	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,0000	0,0000
Acetone	0,0000	0,0000
Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	1,0000	1,0000

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	19	
Descrição	Produto de fundo da segunda torre de destilação (água residual)	
Pressão	126	kPa
Temperatura	45	°C
Vazão mássica	643,8	kg/h
Vazão molar	35,74	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	0,6490	m ³ /h
Peso molecular	18,02	kg/kmol
Densidade	992,1	kg/m ³
Viscosidade	0,5939	cP
Condutividade térmica	0,6376	W/m·°C
Calor específico	4,225	kJ/kg·°C
Tensão superficial	68,62	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m·°C
Calor específico	-	kJ/kg·°C
Fator de compressibilidade	-	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,0000	0,0000

Acetone	0,0000	0,0000
Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	1,0000	1,0000

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	20	
Descrição	Corrente que segue para o reboiler da torre T-1102	
Pressão	140	kPa
Temperatura	86,61	°C
Vazão mássica	9157	kg/h
Vazão molar	253,1	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	12,13	m ³ /h
Peso molecular	36,17	kg/kmol

Densidade	755,1	kg/m ³
Viscosidade	0,4165	cP
Condutividade térmica	0,3585	W/m·°C
Calor específico	3,573	kJ/kg·°C
Tensão superficial	41,34	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m·°C
Calor específico	-	kJ/kg·°C
Fator de compressibilidade	-	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,3980	0,6613
Acetone	0,0352	0,0565
Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	0,5668	0,2823

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	21	
Descrição	Corrente de refluxo que segue para o topo da torre T-1102	
Pressão	120	kPa
Temperatura	61,11	°C
Vazão mássica	14425	kg/h
Vazão molar	248,4	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	19,53	m ³ /h
Peso molecular	58,08	kg/kmol
Densidade	738,6	kg/m ³
Viscosidade	0,2154	cP
Condutividade térmica	0,1430	W/m·°C
Calor específico	2,256	kJ/kg·°C
Tensão superficial	19,76	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m·°C
Calor específico	-	kJ/kg·°C
Fator de compressibilidade	-	

COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,0000	0,0000
Acetone	0,9999	1,0000
Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	0,0001	0,0000

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	22	
Descrição	Corrente que segue para o reboiler da torre T-1103	
Pressão	140	kPa
Temperatura	109,3	°C
Vazão mássica	963,3	kg/h
Vazão molar	53,46	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	

PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	1,025	m ³ /h
Peso molecular	18,02	kg/kmol
Densidade	939,9	kg/m ³
Viscosidade	0,254	cP
Condutividade térmica	0,684	W/m·°C
Calor específico	4,207	kJ/kg·°C
Tensão superficial	56,83	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP
Condutividade térmica	-	W/m·°C
Calor específico	-	kJ/kg·°C
Fator de compressibilidade	-	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,0001	0,0003
Acetone	0,0000	0,0000
Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	0,9999	0,9997

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	23	
Descrição	Corrente de refluxo que segue para o topo da torre T-1103	
Pressão	120	kPa
Temperatura	82,72	°C
Vazão mássica	272,1	kg/h
Vazão molar	5,859	kmol/h
Entalpia total	-	Gkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	0,38	m ³ /h
Peso molecular	46,43	kg/kmol
Densidade	714,8	kg/m ³
Viscosidade	0,4599	cP
Condutividade térmica	0,2349	W/m.°C
Calor específico	3,454	kJ/kg.°C
Tensão superficial	30,74	dinas/cm
PROPRIEDADES DA FASE VAPOR/GÁS		
Vazão volumétrica @ P e T de operação	-	m ³ /h
Peso molecular	-	kg/kmol
Densidade	-	kg/m ³
Viscosidade	-	cP

Condutividade térmica	-	W/m.°C
Calor específico	-	kJ/kg.°C
Fator de compressibilidade	-	
COMPOSIÇÃO		
Componente	Fração molar	Fração mássica
2-Propanol	0,6489	0,8399
Acetone	0,0277	0,0346
Hydrogen	0,0000	0,0000
H2O	0,3234	0,1255

APÊNDICE B – BALANÇO MATERIAL

O sistema apresentado, na figura 13, pode ser simplificado a uma caixa preta em que apenas as entradas, correntes 01 e 02, e saídas, correntes 11, 14 e 19, são

evidenciadas. Dessa forma, temos uma maneira de contabilizar toda a matéria prima que entra e todo o produto que é formado para conferir se os dados estão corretos. A Figura 48, a seguir, demonstra como o sistema pode ser representado.

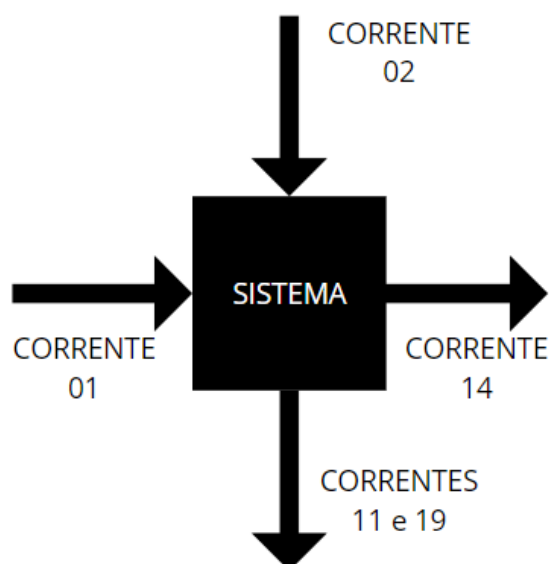


Figura 48. Sistema representado como uma caixa preta com correntes de entrada e saída.

Com isso, realizamos um balanço de massa por componente a partir da composição mássica e da vazão mássica. Iniciando com o IPA, percebemos pelas folhas de especificação que ele está presente nas correntes 01, 11 e 14. Como temos uma reação ocorrendo no sistema, é notável compreender que o sistema não apresentará igualdade entre ambas as correntes, já que o IPA se transforma em acetona e gás hidrogênio, logo, temos que

$$\dot{Q}_{01}x_{01\text{IPA}} - \dot{Q}_{\text{reage}} = \dot{Q}_{11}x_{11\text{IPA}} + \dot{Q}_{14}x_{14\text{IPA}}$$

Em que \dot{Q}_i é a vazão mássica da corrente i , $x_{i\text{IPA}}$ é a fração mássica de IPA na corrente i e \dot{Q}_{reage} é a vazão mássica de IPA que se transformou em produto da reação. Ao isolar \dot{Q}_{reage} , obtemos:

$$\dot{Q}_{\text{reage}} = \dot{Q}_{01}x_{01\text{IPA}} - (\dot{Q}_{11}x_{11\text{IPA}} + \dot{Q}_{14}x_{14\text{IPA}})$$

$$\dot{Q}_{\text{reage}} = 2084,8281 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$$

Com isso, podemos comparar a quantidade de gás hidrogênio ou acetona formados apresentados nas folhas de especificação e a quantidade que teoricamente

seria formada a partir de Q_{reage} . Assim, temos que a reação de IPA produzindo acetona e gás hidrogênio tem razão 1:1:1 molar, sabendo ainda a massa molar de cada componente como $MM_{IPA} = 60,1 \text{ kg.kmol}^{-1}$, $MM_{Acetona} = 58,08 \text{ kg.kmol}^{-1}$ e $MM_{H_2} = 2,02 \text{ kg.kmol}^{-1}$, temos para o hidrogênio presente na corrente 11. Logo:

$$\dot{Q}_{H_2} = Q_{reage} \times \frac{2,02}{60,1} = \dot{Q}_{11} x_{11 H_2}$$

$$\dot{Q}_{H_2} = 70,07 \text{ kg.h}^{-1} \approx 70,05 \text{ kg.h}^{-1}$$

Para a acetona presente nas correntes 11 e 14, temos:

$$\dot{Q}_{acetona} = Q_{reage} \times \frac{58,08}{60,1} = \dot{Q}_{11} x_{11 acetona} + \dot{Q}_{14} x_{14 acetona}$$

$$\dot{Q}_{acetona} = 2014,75 \text{ kg.h}^{-1} \approx 2015,05 \text{ kg.h}^{-1}$$

Por fim, realizamos o balanço para a água presente nas correntes 01, 02, 11 e 19, logo, temos:

$$\dot{Q}_{01} x_{01 H_2O} + \dot{Q}_{02} x_{02 H_2O} = \dot{Q}_{11} x_{11 H_2O} + \dot{Q}_{19} x_{19 H_2O}$$

$$669,0686 \text{ kg.h}^{-1} \approx 668,9961 \text{ kg.h}^{-1}$$

A partir dessas informações, percebemos que o processo respeita o balanço material.