



Universidade de Brasília
Instituto de Química
Curso de Engenharia Química

PROJETO DE ENGENHARIA QUÍMICA

Otimização de Torre de Destilação para produção de Etilbenzeno

Francisco Wytorhugo Teixeira de Aguiar

Sofia Lima Ribeiro

Thayná Sousa Pereira

Wellington Paula da Silva Junior

Brasília, 13 de fevereiro de 2023.

AGRADECIMENTOS

É com grande satisfação que apresentamos este trabalho de conclusão de curso, fruto de muito esforço e dedicação.

Gostaríamos de agradecer primeiramente aos nossos pais, que sempre acreditaram e deram suporte incondicional durante toda a nossa jornada acadêmica. Obrigado por todo amor e carinho.

Agradecemos também ao nosso orientador Prof. Dr. Jose Joaquin Linares Leon, que com seu conhecimento e paciência nos guiou e orientou durante todo o processo de elaboração deste trabalho. Sua dedicação e disponibilidade foram fundamentais para a conclusão deste projeto.

Não poderíamos deixar de mencionar os familiares e amigos, que sempre estiveram presentes, compreendendo as dificuldades e comemorando as conquistas. Aos colegas de curso, que compartilharam conhecimentos e experiências valiosas, tornando a nossa jornada ainda mais enriquecedora. Além disso, agradecemos à Universidade de Brasília (UnB) e a todos os profissionais que de alguma forma contribuíram para nossa graduação.

Por fim, agradecemos a Deus, por ter nos dado saúde, sabedoria e forças para concretizar mais esse sonho. Obrigado por todas as bênçãos e oportunidades que a vida tem nos proporcionado.

RESUMO

O presente trabalho apresenta o projeto e otimização de uma refinaria para produção de etilbenzeno, um importante insumo para fabricação de estireno e poliestireno, a partir da reação entre o benzeno e o etileno. O enfoque está na projeção da torre de destilação fracionada para obtenção de etilbenzeno com grau de recuperação de 99%, instalação de três bombas que permitem o fluxo de matéria, um vaso pulmão e três trocadores de calor com funções de pré-aquecer e vaporizar o alimento da torre, e resfriar o destilado. A instalação descrita possui capacidade produtiva de 80.000 toneladas/ano com conversão de 99,8 mol% e para simular sua operação utilizou-se o *software* Aspen HYSYS® além da estruturação de um diagrama P&ID no qual descrevem-se todos os elementos de instrumentação, controle e segurança necessários, além de um diagrama PFD para melhor visualização das correntes no processo. Todo o dimensionamento da planta foi realizado com base na otimização econômica de cada equipamento, considerando a melhor relação entre número de pratos da torre e taxa de refluxo com uma estimativa para 10 anos com taxa de desconto à 15%. Finalmente realizou-se a análise de impacto ambiental da instalação propondo maior eficiência da planta e redução de desperdícios.

Palavras-chave: etilbenzeno, dietilbenzeno, torre de destilação, simulação, otimização.

ABSTRACT

The present work presents the design and optimization of a refinery for the production of ethylbenzene, an important raw material for the manufacture of styrene and polystyrene, from the reaction between benzene and ethylene. The focus is on the projection of the fractional distillation tower for the obtaining of ethylbenzene with a recovery rate of 99%, the installation of three pumps that allow the flow of matter, a reflux vessel, and three heat exchangers with functions to preheat and vaporize the tower's feed, cool the distillate. The described installation has a productive capacity of 80,000 tons/year with a conversion rate of 99.8 mol% and to simulate its operation, the Aspen HYSYS® software was used, along with the creation of a P&ID diagram, which describes all the necessary instrumentation, control, and safety elements, as well as a PFD diagram for better visualization of the currents in the process. The entire plant sizing was based on the economic optimization of each equipment, considering the best relationship between the number of tower plates and reflux rate with an estimate for 10 years with a discount rate of 15%. Finally, the environmental impact analysis of the installation was carried out, proposing greater efficiency of the plant and reduction of waste.

Keywords: ethylbenzene, di-ethylbenzene, distillation tower, simulation, optimization.

Lista de Figuras

Figura 1. Fluxograma do processo de produção do etilbenzeno.	18
Figura 2. Diagrama de processos da torre de destilação T-1.	21
Figura 3. Representação genérica do balanço de massa sobre as principais correntes do processo.	23
Figura 4. Representação esquemática das principais regiões me uma torre de destilação.	24
Figura 5. Volume de controle na região de retificação.	25
Figura 6. Volume de controle na região de esgotamento.	26
Figura 7. Estrutura de uma bomba centrífuga.	33
Figura 8. Modelo usado para projeto de bomba P-1	36
Figura 9. Modelo usado para projeto de bomba P-2.	36
Figura 10. Modelo usado para projeto de bomba P-3.	37
Figura 11. Esquema de um trocador de calor casco e tubo de cabeçote flutuante ²⁴	39
Figura 12. Esquema do projeto do trocador E-1.	41
Figura 13. Esquema do projeto do trocador E-2.	42
Figura 14. Esquema do projeto do trocador E-3.	43
Figura 15. Esquema do vaso pulmão V-1.	44
Figura 16. Princípios de torres de destilação.	47
Figura 17. Esquema da torre T-1.	48
Figura 18. Torre de destilação T-1.	50
Figura 19. Diagrama mecânico (P&ID) da torre para destilação de EB (T-1).	56

Lista de Tabelas

Tabela 1. Cinética da reação de formação do etilbenzeno .	20
Tabela 2. Dados referentes à corrente 1.	28
Tabela 3. Dados referentes à corrente 11.	29
Tabela 4. Dados referentes à corrente 13.	30
Tabela 5. Parâmetros característicos da bomba P-1.	36
Tabela 6. Parâmetros característicos da bomba P-2.	37
Tabela 7. Parâmetros característicos da bomba P-3.	37
Tabela 8. Parâmetros característicos do trocador de calor E-1.	41
Tabela 9. Parâmetros característicos do trocador de calor E-2.	42
Tabela 10. Parâmetros característicos do trocador de calor E-3.	43
Tabela 11. Parâmetros característicos do vaso V-1.	46
Tabela 12. Otimização econômica do vaso V-1.	46
Tabela 13. Otimização econômica para determinação do n° de pratos de Torre T-1.	51
Tabela 14. Parâmetro característicos da torre de 46 pratos.	52
Tabela 15. Otimização econômica da torre T-1 com 46 pratos.	52
Tabela 16. Custos de cada equipamento.	52
Tabela 17. Listagem de indicadores.	53
Tabela 18. Listagem de controladores.	54
Tabela 19. Listagem de alarmes.	54
Tabela 20. Listagem de intertravamentos.	55
Tabela 21. Listagem das válvulas de segurança.	55

Lista de Siglas

ACCR	<i>Annual Capital Charge Ratio</i> (Taxa Anual de Desconto de Capital)
BTEX	Benzeno, Tolueno, Etilbenzeno e Xileno
CETESB	Companhia Ambiental do Estado de São Paulo
COV	Compostos Orgânicos Voláteis
DEB	Dietilbenzeno
EB	Etilbenzeno
EPI	Equipamentos de Proteção Individual
HLL	<i>High Liquid Level</i> (Nível Máximo de Líquido)
IARC	Agência Internacional de Pesquisa em Câncer
LLL	<i>Low Liquid Level</i> (Nível Mínimo de Líquido)
LOI	Linha de Operação Inferior ou de Esgotamento
LOS	Linha de Operação de Retificação
MPS	Vapor de Média Pressão
NLL	<i>Normal Liquid Level</i> (Nível Normal de Líquido)
NPSH	<i>Net Positive Suction Head</i> (Carga Positiva de Sucção)
PFD	<i>Process Flow Diagram</i> (Fluxograma de Processos)
P&ID	<i>Piping and Instrumentation Diagram</i> (Diagrama de Processos e Instrumentação)
SPME	<i>Solid Phase Microextraction</i> (Microextração em Fase Sólida)

Lista de Símbolos

r_i	Velocidade da Reação
$k_{o,i}$	Constante de Velocidade da Reação
E_i	Energia de Ativação da Reação
R	Constante Universal dos Gases
T	Temperatura
C	Concentração
a'	Ordem da Reação para o Etileno
b'	Ordem da Reação para o Etilbenzeno
c'	Ordem da Reação para o Tolueno
d'	Ordem da Reação para o Benzeno
e'	Ordem da Reação para o Dietilbenzeno
F	Vazão Mássica de Alimentação
X_f	Fração Mássica da Alimentação
X_d	Fração Mássica do Destilado
X_b	Fração Mássica do Produto de Fundo
V	Corrente de Vapor (estágio n)
\bar{V}	Corrente de Vapor no Estágio (estágio n-1)
L	Corrente de Líquido (estágio n)
\bar{L}	Corrente de Líquido (estágio n-1)
Q_r	Calor Introduzido Pelo Refervedor
D	Vazão Mássica do Destilado
q_D	Calor Contido no Destilado
B	Vazão Mássica do Produto de Fundo
q_B	Calor Contido no Produto de Fundo
Q_C	Calor Retirado Pelo Condensador
V	Vazão Mássica do Vapor de Topo
q_V	Calor Contido no Vapor de Topo
L	Vazão Mássica do Refluxo Externo
q_L	Calor Contido no Refluxo Externo.

W_{bomba}	Potência Consumida Pela Bomba
\dot{Q}	Vazão Volumétrica
ΔP	Diferença entre a Pressão de Admissão e a Pressão de Impulsão
η_e	Eficiência Elétrica
η_h	Eficiência Hidráulica
C_{bomba}	Custo Total da Bomba
C_c	Custo da Carcaça
C_m	Custo do Motor
f	Fator de Hand
P_v	Pressão de Vapor do Líquido
ρ	Densidade do Líquido
g	Aceleração da Gravidade
h_f	Perdas por Fricção na Linha de Admissão
H	Altura Geométrica da Admissão
P_{imp}	Pressão na Impulsão
P_{adm}	Pressão na Admissão
Δt_{ml}	Diferença de Temperatura Média Logarítmica
T_1'	Temperatura de Entrada do Fluido Quente
T_2'	Temperatura de Saída do Fluido Quente
T_1''	Temperatura de Entrada do Fluido Frio
T_2''	Temperatura de Saída do Fluido Frio
F_t	Fator de Correção
Q	Calor Transferido por Unidade de Tempo
U	Coefficiente Global de Transferência de Calor
A_{tubo}	Área de Cada Tubo do Trocador
D_t	Diâmetro do Tubo
L_t	Comprimento do Tubo
N_{tubos}	Número de Tubos
C_{cc}	Custos dos Trocadores
a	Parâmetro Tabelado Para Estimativa do Custo do Equipamento

b	Parâmetro Tabelado Para Estimativa do Custo do Equipamento
n	Parâmetro Tabelado Para Estimativa do Custo do Equipamento
S	Área Calculada do Trocador
C_i	Custo de Instalação
f_{Lang}	Fator de Lang
V_L	Volume de Líquido
r	Tempo de Retenção
Q_L	Vazão Volumétrica de Líquido
V_V	Volume do Vaso
D_V	Diâmetro do Vaso
L_V	Comprimento do Vaso
t	Espessura dos Equipamentos
S_s	Eficiência da Solda
E	Tensão Máxima de Resistência do Material
W_v	Peso do Vaso
C_w	Fator de Peso
C_e	Custo do Vaso
Q_{vap}	Máxima Vazão Volumétrica de Vapor
ρ_G	Densidade do Gás
ρ_L	Densidade do Líquido Em Contracorrente
v_{lim}	Velocidade Limite
$S_{mín}$	Seção Transversal Mínima
D_t	Diâmetro da Torre
$H_{último estágio}$	Distância até o Último Estágio
H_{torre}	Altura da Torre
P_i	Pressão Relativa Mínima de Projeto
D_n	Diâmetro Nominal
C_{prato}	Custo do Prato
C_T	Custo do Da Torre

ÍNDICE

1. INTRODUÇÃO E OBJETIVOS.....	13
2. REFERENCIAL TEÓRICO	14
2.1 Etilbenzeno	14
2.2 Processo produtivo do etilbenzeno.....	16
2.3 Benzeno	18
2.4 Etileno.....	19
3. DESCRIÇÃO DO CENÁRIO.....	20
3.1 Balanço de Massa e Energia.....	22
4. PROJETO DA PLANTA.....	28
4.1. Correntes de processo.....	31
4.2. Bombas	32
4.2.1. Projeto da bomba P-1.....	35
4.2.2. Projeto da bomba P-2.....	36
4.2.3. Projeto da bomba P-3.....	37
4.3. Trocadores de calor	38
4.3.1 Projeto do trocador de calor E-1.....	40
4.3.2 Projeto do trocador de calor E-2.....	41
4.3.3 Projeto do trocador de calor E-3.....	42

4.4. Vasos pulmões	43
4.5. Torres de separação	46
4.6. Listagem de indicadores	53
4.7. Listagem de controladores	53
4.8. Listagem de alarmes	54
4.9. Listagem de intertravamentos	54
4.10. Listagem de válvulas de segurança	55
4.11. Diagrama mecânico de processo	55
4.12. Avaliação de impacto ambiental	57
5. CONCLUSÕES	60
6. BIBLIOGRAFIA	62
7. ANEXOS	66

1. INTRODUÇÃO E OBJETIVOS

O Etilbenzeno (EB) é uma das commodities mais importantes em volume da indústria petroquímica e sua demanda apresenta uma taxa de crescimento crescente nos últimos anos¹. Até o início da pandemia de COVID-19 a previsão era que a produção de etilbenzeno deveria atingir um valor de mercado próximo a US\$ 19.320 milhões em 2023, hoje, devido ao aumento do consumo de seus derivados durante a pandemia somado a influência da Guerra Rússia-Ucrânia, a previsão revisada é que o mercado global de etilbenzeno alcance US\$ 23.620 milhões em 2028².

A grande importância do EB se deve ao fato de, através da desidrogenação catalisada por óxido de ferro, este alquilado derivado de benzeno se torna responsável por grande parte da rota mundial de produção de estireno³. Este monômero produzido possui inúmeros usos que vão desde acrilonitrila, poliésteres insaturados, estirenobutadieno borracha, e ainda é a matéria prima principal da produção de poliestireno que é o composto mais utilizado na produção de plásticos atualmente⁴.

Outra importante saída comercial do etilbenzeno é a produção de xilenos mistos, muito utilizados na indústria como solvente para borrachas, diluente de tintas, vernizes e inseticidas, além de estar presente no petróleo, com uma presença típica de 4% (v/v) em combustíveis⁵. Entretanto, é válido citar que compostos orgânicos voláteis (COV) são um dos principais redutores da qualidade do ar em ambientes internos, em especial aqueles emitidos por veículos urbanos como o benzeno, tolueno, etilbenzeno e os isômeros de xileno, conhecidos pela sigla BTEX, dos quais os isômeros de xilenos e o etilbenzeno são os mais reativos⁶.

Com base nas premissas descritas anteriormente, o objetivo do presente trabalho é projetar e otimizar uma torre de destilação para produção de etilbenzeno com pureza de 99,8 mol% com uma capacidade 80.000 toneladas anuais para atender à demanda de 48 Mt do mercado, sendo o etilbenzeno obtido totalmente utilizado para produção de estireno^{7,8}. Para alcançar este objetivo final, são necessários cumprir os seguintes objetivos parciais:

- Realização dos balanços de massa e energia da unidade.
- Projetar os vasos e torres que integram a unidade, sendo definidos o tamanho dos vasos, seu peso, dimensionados os elementos internos de torres e reatores.

- Projetar os sistemas de impulsionamento de fluídos.
- Projetar os sistemas de troca de calor, com atenção aos processos de integração energética.
- Indicação dos sistemas de instrumentação, controle, bem como os elementos de segurança da planta.
- Realização do diagrama P&ID da unidade T-1 (T-302) de destilação fracionada.
- Análise de viabilidade econômica do processo.

2. REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 Etilbenzeno

O etilbenzeno (C_8H_{10}) é um hidrocarboneto aromático líquido, incolor, inflamável e com ponto de ebulição de $136^\circ C$. Esse composto químico é utilizado na produção de produtos intermediários como acetofenona – usada na produção de perfumes, sabões, resinas e farmacêuticos - e, principalmente, estireno. O estireno é um precursor de vários polímeros industriais, incluindo acrilonitrila-butadieno-estireno, poliestireno, elastômeros de estireno-butadieno e látex, resinas de estireno-acrilonitrila e poliéster insaturado. Esses compostos encontram uma ampla gama de aplicações em diversas indústrias de usuários finais, como eletrônica, embalagens, agricultura, petroquímica e construção.

Mais da metade do etilbenzeno mundial é produzido e consumido pelos Estados Unidos, Japão, Coreia do Sul, China, Taiwan e China Continental, sendo que sua produção e consumo vêm crescendo continuamente com o desenvolvimento da economia. Pensando na concorrência, as principais empresas detentoras desse mercado são LyondellBasell Industries Holdings BV, Chevron Phillips Chemical Company LLC, INEOS, Honeywell International Inc e Dow, sendo considerado um mercado parcialmente fragmentado.

Ao longo dos anos, a produção de etilbenzeno foi estudada por diferentes rotas, contendo catalisadores e fases distintas. As rotas de produção mais comuns são a alquilação do benzeno com propileno ou etileno, a alquilação do tolueno com metanol, a transalquilação do dietilbenzeno com benzeno, o desproporcionamento e transalquilação do tolueno e a transalquilação de trietilbenzeno com benzeno ⁹. Industrialmente, as

alquilações são os processos mais utilizados, sendo que cerca de 40% das plantas industriais de etilbenzeno mundiais empregam o processo de alquilação de Friedel-Crafts. Esse método se baseia na utilização de catalisadores à base de cloreto de alumínio ($\text{AlCl}_3\text{-HCl}$) e começou a ser utilizado na década de 1930, a partir dos primeiros estudos e do desenvolvimento comercial desse processo de alquilação. Apesar disso, a utilização desse catalisador causa problemas de corrosão, manuseio e descarte, o que acabou acarretando maiores custos operacionais para os fabricantes e a necessidade de desenvolvimento de processos alternativos¹⁰.

Com isso, passou-se a empregar catalisadores ácidos sólidos, que apresentam diversas vantagens em relação aos catalisadores ácidos líquidos, como o menor risco de corrosão e a eliminação de problemas ambientais, pauta que tem crescido exponencialmente nas últimas décadas¹¹. Entre 1960 e 1970, UOP e Mobil-Badger desenvolveram suportes de catalisador e catalisadores a base de zeólitas. A partir de 1980, catalisadores modificados ZSM-5, também desenvolvidos por Mobil-Badger, passaram a ser utilizados. Dessa forma, as zeólitas se consolidaram como os catalisadores mais promissores industrialmente devido ao fato de serem mais seguros e amigáveis ao meio ambiente.

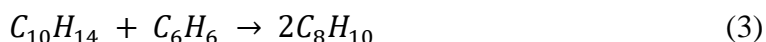
A produção de etilbenzeno (EB) envolve a reação em fase líquida do etileno (C_2H_4) com o benzeno (C_6H_6)



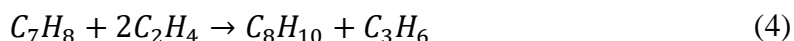
Além disso, ocorrem algumas reações indesejadas, como a responsável pela formação do dietilbenzeno (DEB) a partir do etilbenzeno formado e o etileno



A partir da formação do DEB, ainda é possível que esse composto passe por uma reação de transalquilação com o benzeno para formar o EB desejado



Ademais, o benzeno que entra apresenta certa quantidade de tolueno como impureza que reage como o etileno para formar etilbenzeno e propileno.



Dessa forma, é possível aumentar a eficiência do processo de produção de EB ao reciclar o DEB gerado à bateria de reatores, para que haja uma maior conversão final do

produto desejado. Ademais, como forma de seletividade, é recomendável utilizar temperaturas mais baixas, uma vez que a energia de ativação da reação desejada é menor, além de manter baixas concentrações de etileno e EB no reator para evitar que reações indesejadas ocorram¹².

2.2 Processo produtivo do etilbenzeno

O etilbenzeno é produzido pela alquilação do benzeno na presença de catalisadores, sendo o etileno o agente de etilação mais frequentemente utilizado. Como mostrado anteriormente, o etilbenzeno pode posteriormente reagir com etileno para formar os polietilbenzenos. Os processos antigos se utilizavam de catálise homogênea pelo uso de uma suspensão de cloreto de alumínio como catalisador, já os mais recentes utilizam reatores de leito fixo com catálise heterogênea em zeólitas.

Em sua maioria, os processos de geração de etilbenzeno produzem esse componente para consumo interno, apresentando um processo acoplado para produção de estireno. Em geral, essas instalações acopladas apresentam energia integrada entre as plantas, em que ocorre a geração de vapor pela reação exotérmica de formação de EB e consumo desse vapor pela reação endotérmica responsável por produzir o estireno.

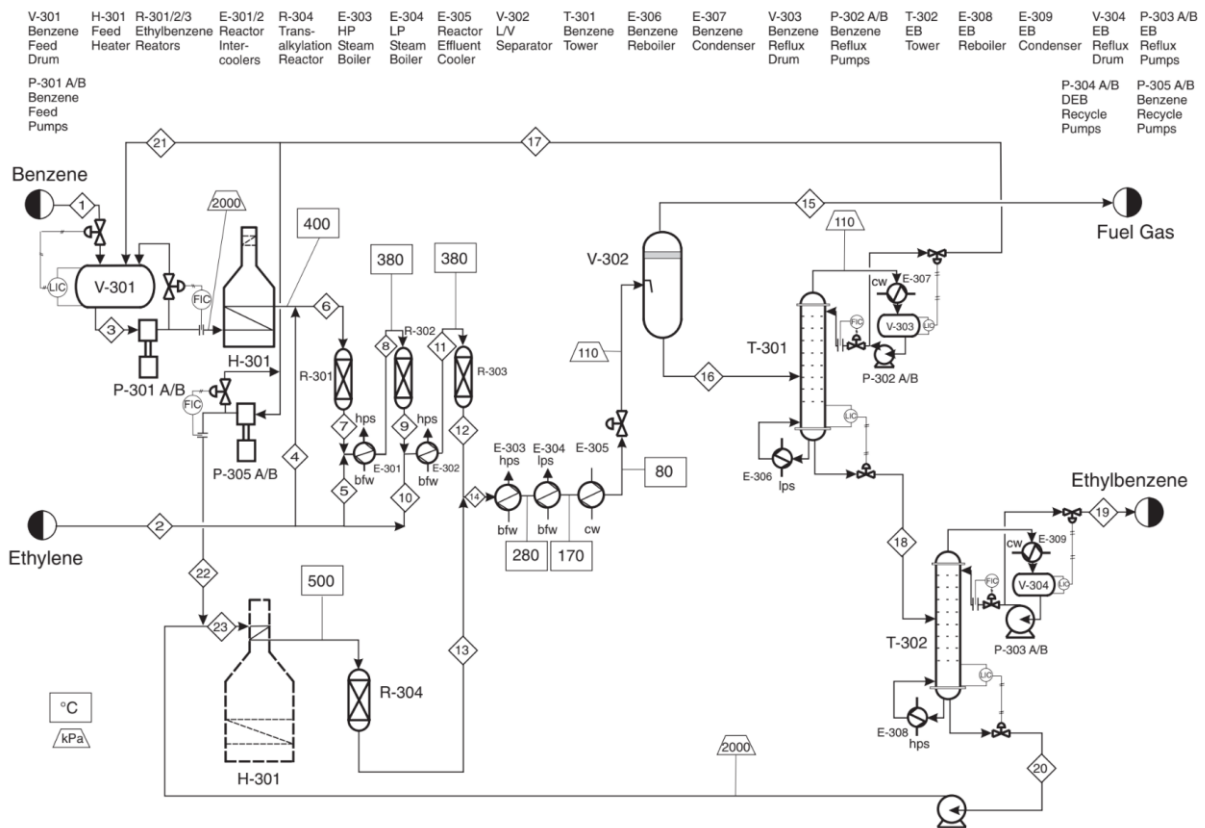
Pensando nas operações unitárias envolvidas no processo, a produção do etilbenzeno envolve as seguintes etapas⁸

- Mistura do benzeno: nessa etapa, o benzeno vindo da refinaria se mistura com o benzeno reciclado em um vaso *on-site* (V-301) e é bombeado até uma pressão de 2000 kPa (20 atm) necessária para a reação. Em seguida, é enviado para um aquecedor (H-301).
- Aquecimento do benzeno: em um aquecedor ou forno (H-301), o benzeno é aquecido até a temperatura de reação de aproximadamente 400°C, sendo posteriormente misturado ao etileno antes de entrar no sistema de reatores;
- Reação: o sistema de reatores consiste em três reatores adiabáticos de leito empacotado (R-301, R-302 e R-303) com adição de alimentação e resfriamento entre os estágios, sendo que a reação ocorre na fase gasosa e é exotérmica. O efluente quente e parcialmente convertido sai do primeiro reator (R-301) e se mistura com mais etileno de alimentação para então ser alimentado a um trocador de calor (E-301). Com isso, a corrente é resfriada até 380°C antes de seguir para

o reator subsequente (R-302). Além disso, vapor de alta pressão é produzido no E-301 e é posteriormente utilizado pela unidade de produção de estireno. De forma similar, o efluente do segundo reator (R-302) é misturado com etileno de alimentação e resfriado no trocador de calor (E-302), que também gera vapor de alta pressão, antes de entrar no terceiro e último reator (R-303). A corrente de efluente que deixa o R-303 contém produtos, subprodutos, benzeno que não reagiu e pequenas quantidades de etileno e gases não condensáveis;

- Resfriamento do efluente do sistema de reatores: Esse efluente é resfriado em duas caldeiras de calor de resíduos (E-303 e E-304), responsáveis por gerar, respectivamente, vapor de alta e baixa pressão, que também serão usados pela unidade de produção de estireno. A mistura bifásica que deixa a caldeira E-304 é enviada a um trocador de calor refrigerado a água (E-305) para ser resfriada até 80°C
- Separação do efluente: Após resfriamento, a mistura é enviada a um separador bifásico (V-302), onde os gases leves são separados e enviados pela parte superior como gás combustível para ser consumido pelo aquecedor. O líquido condensado é enviado à torre de benzeno (T-301), onde o benzeno sem reagir é separado como produto de topo e retorna ao início do processo. Os produtos de fundo da torre T-301 são enviados à segunda torre de destilação (T-302) onde o etilbenzeno, em 99,8 mol%, sai como produto de topo e é enviado diretamente à unidade de estireno. A corrente de fundo da torre contém todo o DEB e etilbenzenos maiores. Esse produto se mistura ao benzeno reciclado e vai em direção ao aquecedor (H-301) antes de ser enviado a um quarto reator de leito empacotado (R-304), onde o excesso de benzeno reage com o DEB para formar EB pela chamada transalquilação. Por fim, o efluente desse reator é misturado à corrente líquida que entra na caldeira de calor de resíduos (E-303).

Figura 1. Fluxograma do processo de produção do etilbenzeno.⁸



2.3 Benzeno

O benzeno (C_6H_6) é um hidrocarboneto aromático líquido, altamente inflamável e volátil muito utilizado nas indústrias, em processos laboratoriais, em companhias siderúrgicas e em indústrias petroquímicas para o refino do petróleo. É utilizado como matéria-prima de diversos compostos orgânicos (estirenos, plásticos e polímeros), como aditivo em combustíveis automotivos e como parte da formulação de refrigerantes. Antigamente, era bastante utilizado como solvente orgânico de tintas e de diversos tipos de cola, entretanto foi substituído por outros solventes devido a sua alta toxicidade.

Esse composto se configura como uma das principais commodities químicas mundiais, sendo que 95% de sua produção é destinada para uso como intermediário na produção de outros compostos, predominantemente etilbenzeno, cumeno e ciclohexano.¹³ Apesar da sua ampla gama de aplicações, o benzeno é considerado um composto cancerígeno, estando ligado ao surgimento de várias doenças nos seres humanos, principalmente leucemia mieloide aguda que está relacionada à má formação de glóbulos vermelhos na medula óssea¹⁴.

As principais vias de exposição para a população geral são as vias respiratória e oral, enquanto que, para os trabalhadores, a absorção pela pele também merece atenção. Dessa forma, segundo a Organização Internacional do Trabalho, medidas de prevenção técnica e de higiene de trabalho devem ser adotadas a fim de assegurar proteção eficaz dos trabalhadores, como uso de equipamentos de proteção individual (EPI's). Além disso, locais que fabricam, manipulam e utilizam benzeno devem adotar medidas que impeçam o escapamento de vapores na atmosfera.

2.4 Etileno

O etileno ou eteno (C_2H_4) é um hidrocarboneto alceno gasoso e incolor considerado o mais simples da família das olefinas e produzido de forma natural na maioria dos tecidos das plantas. Industrialmente, o etileno é produzido principalmente através do craqueamento a vapor do etano e da nafta, derivada do petróleo. Além disso, é um composto chave na indústria química pela larga utilização na produção de diversos intermediários e polímeros. Mundialmente, seu consumo atingiu a marca de mais de 150 milhões de toneladas por ano em 2017¹⁵.

A maior parte da produção do etileno passa por uma reação de polimerização de adição que leva à formação do polietileno, polímero plástico utilizado na fabricação de objetos domésticos, garrafas, brinquedos, sacolas, revestimentos de fios, tubos, embalagens de produtos farmacêuticos, entre outros. Além disso, é o agente de etilação mais comumente utilizado na produção de etilbenzeno.

3. DESCRIÇÃO DO CENÁRIO

Para o presente projeto, optou-se por projetar parte de uma planta de produção de etilbenzeno que segue a rota de alquilação do benzeno, tendo como agente de etilação o etileno. Pensando na parte que envolve a reação em si, as matérias-primas utilizadas são benzeno e etileno, responsáveis pela formação do etilbenzeno a partir de uma reação de alquilação.

As reações envolvidas estão na seção do referencial teórico e a sua cinética pode ser representada pela equação abaixo (Equação 5) e pelas seguintes energias de ativação (Tabela 1).

$$-r_i = k_{o,i} e^{-\frac{E_i}{RT}} C_{\text{etileno}}^{a'} C_{EB}^{b'} C_{\text{tolueno}}^{c'} C_{\text{benzeno}}^{d'} C_{DEB}^{e'} \quad (5)$$

Em que r_i representa a velocidade da reação, $k_{o,i}$ a constante de velocidade da reação, E_i a energia de ativação da reação, R a constante universal dos gases, T a temperatura, C a concentração e a , b , c , d e e a ordem da reação para cada composto.

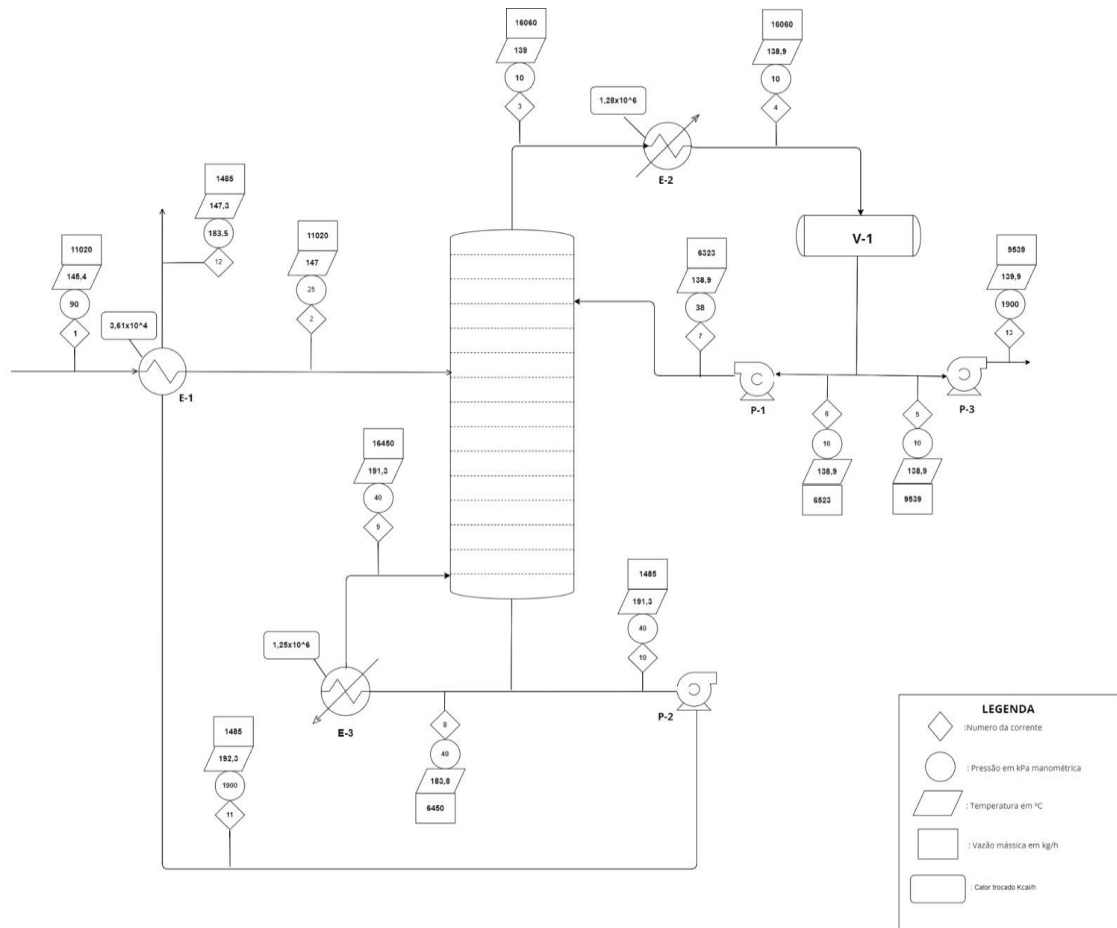
Tabela 1. Cinética da reação de formação do etilbenzeno ²³.

<i>i</i>	<i>E_i</i> kcal/kmol	<i>k_{o,i}</i>	<i>a'</i>	<i>b'</i>	<i>c'</i>	<i>d'</i>	<i>e'</i>
1	22,5	1 × 10 ⁶	1	0	0	1	0
2	22,5	6 × 10 ⁵	1	1	0	0	0
3	25	7,8 × 10 ⁶	0	0	0	1	1
4	20	3,8 × 10 ⁸	2	0	1	0	0

Tendo isso em mente, sabe-se que ocorrem diversas reações simultâneas e há a necessidade de separação dos compostos presentes no processo para obtenção do etilbenzeno isolado. A partir da apresentação do fluxograma do processo de forma completa (Figura 1), é possível observar a presença de duas torres de destilação (T-301 e T-302), tendo sido escolhida a segunda torre, responsável pela última etapa de separação e consequente obtenção do etilbenzeno, para projeto dos equipamentos envolvidos.

Como forma de simplificação, apresenta-se o diagrama de fluxo de processos abaixo (Figura 2), tendo como foco a torre de destilação escolhida, aqui denominada T-1.

Figura 2. Diagrama de processos da torre de destilação T-1.



Como apresentado brevemente no referencial teórico, essa torre de destilação apresenta uma corrente de entrada (2) pré-aquecida pelo trocador de calor E-1, que utiliza parte da corrente de produto de fundo (11) como corrente de aquecimento. Após entrada na torre de destilação, essa corrente sofre o processo de fracionamento, dando origem à corrente de produto de topo (3) e à corrente de produto de fundo (10). O produto de topo sofre processo de condensação (4) pelo trocador de calor E-2, que utiliza água de refrigeração como corrente auxiliar, e parte em direção ao vaso acumulador V-1. Com isso, parte desse produto (5) é bombeado pela bomba P-3 para fora da planta (13) e parte (6) é bombeado pela bomba P-1 de volta para a torre de destilação (7). Já o produto de fundo (10) é bombeado pela bomba P-2 em direção ao trocador de calor E-1 e parte dele

(8) sofre o processo de evaporação (9) pelo trocador de calor E-3, que utiliza vapor de média pressão como corrente auxiliar, e retorna para a torre de destilação.

Ao final, a partir da separação da corrente de entrada formada por 0,168% benzeno, 89,600% etilbenzeno e 10,232% dietilbenzeno, objetiva-se ter como resultado uma corrente de destilado rica em etilbenzeno com grau de recuperação de 99% e uma corrente de fundo rica em dietilbenzeno com grau de recuperação de 99,999%.

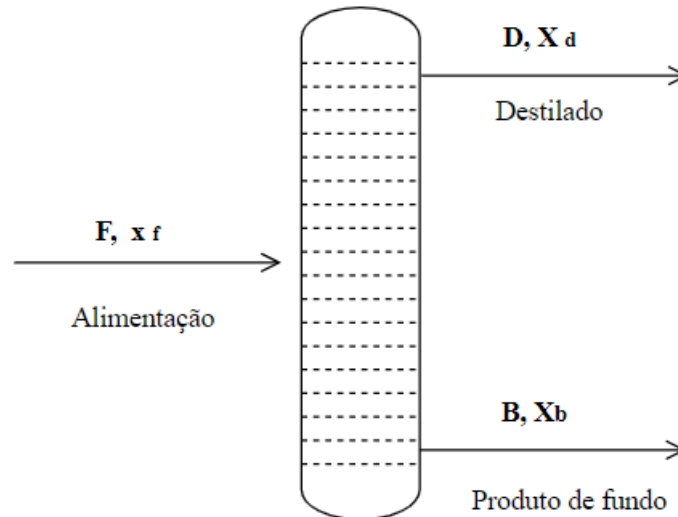
Pensando na parte econômica do projeto envolvendo apenas a torre T-1, esse projeto focará no cálculo dos gastos relacionados aos três trocadores de calor (E-1, E-2 e E-3), às três bombas (P-1, P-2 e P-3), ao vaso acumulador (V-1) e à torre de destilação em si. Além disso, deve-se levar em conta gastos de operação relacionados à parte elétrica e à utilização das correntes auxiliares de troca de calor, sempre levando em conta a operação de 8000h/ano. Por fim, todos os custos de instalação dos equipamentos serão anualizados multiplicando o valor obtido por 0,333.

A seguir, serão apresentadas as características das correntes materiais necessárias para o projeto dos equipamentos supracitados, assim como os cálculos de custos desses equipamentos.

3.1 Balanço de Massa e Energia

Considera-se a coluna abaixo, o balanço de massa será realizado sobre o componente mais volátil, que no caso é o produto de topo, etilbenzeno (EB). Sabe-se que o destilado tem que haver 99% de etilbenzeno, então 99% que entra na corrente de alimentação de EB tem que sair na corrente de destilado.

Figura 3. Representação genérica do balanço de massa sobre as principais correntes do processo.



A corrente de entrada F é 11020kg/h representa a vazão mássica total de entrada e a fração correspondente de EB é de $87,27\%$, a quantidade de EB que passa é dado pelo produto da fração molar pela corrente de entrada e sua fração mássica. Realizando o balanço global, considerando que a coluna já esteja em estado estacionário e que não haja acúmulo, se tem

$$F = D + B$$

Realizando o balanço por componente:

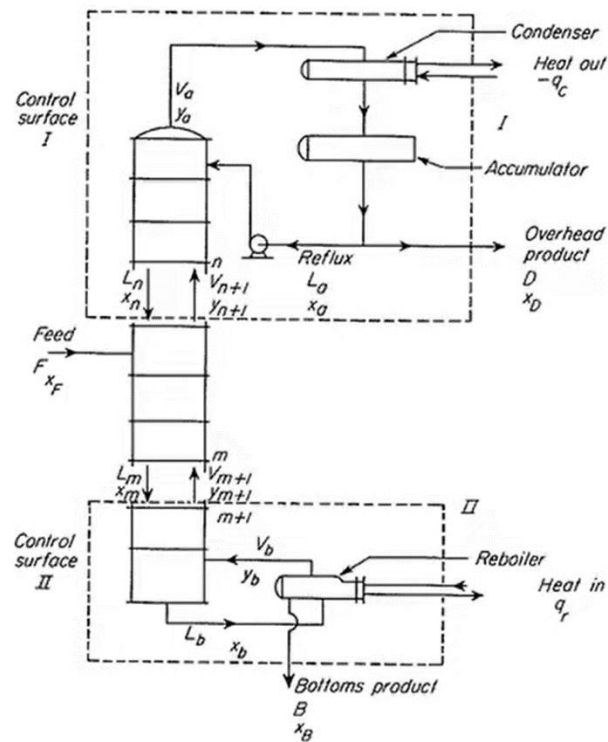
$$F \times X_f = D \times X_d + B \times X_B$$

Pela ação do fracionamento, é possível formar uma corrente de destilado rica em EB com grau de recuperação de $99,26\%$ que representa a fração mássica de destilado e $0,74\%$ que representa o valor da fração do fundo. Assim com as equações de balanço global e componente é possível determinar as principais correntes.

Outro fator importante que deve se levar em consideração no balanço de massa, são as linhas de operação. A alimentação é feita no meio dos pratos, pode-se dividir em duas grandes regiões. A primeira delas é a região de topo, também conhecida como região de retificação, em que o vapor vai ficando cada vez mais rico no componente

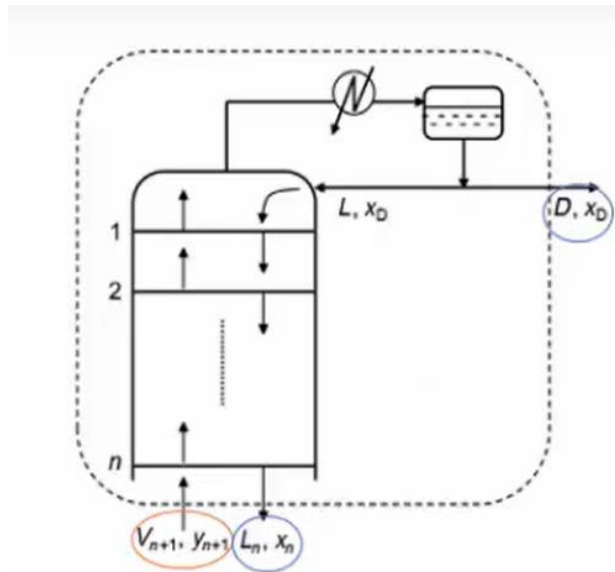
mais volátil, já a segunda região chamada de região de fundo ou região de esgotamento a fase líquida vai ficando mais rica no componente menos volátil.

Figura 4. Representação esquemática das principais regiões de uma torre de destilação.¹⁶



Para a análise da Linha de Operação Superior ou de Retificação (LOS) é necessário saber que, tomando determinado volume de controle, considera-se o balanço de massa a partir do esquema abaixo.

Figura 5. Volume de controle na região de retificação.



Considera-se a seguinte igualdade para o balanço de massa no topo da coluna que permite a análise global e por componente do sistema

$$\text{Entrada} = \text{saída}$$

$$V_{n+1} = L_n + D$$

$$V_{n+1}y_{n+1} = L_nx_n + Dx_d$$

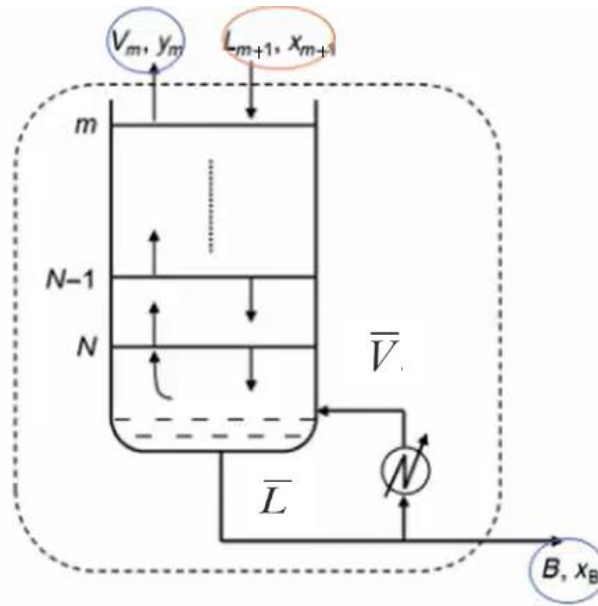
Como as vazões em todos os estágios apresentam valores muito próximos, é possível fazer a seguinte aproximação $V_n \cong V$, assim como para o caso das correntes de líquido, em que $L_n \cong L$. Isso ocorre devido ao contato entre as fases, que faz com que cada quantidade de matéria de vapor condensado libere energia suficiente para a vaporização de uma mesma quantidade de matéria da mistura de líquido, mantendo as vazões constantes ao longo da coluna. ¹⁷Com isso, a linha de operação de retificação ou LOS pode ser descrita como sendo

$$y_{n+1} = \frac{L}{V}x_n + \frac{D}{V}x_D$$

A equação acima se assemelha a equação da reta, com isso é possível determinar o comportamento da composição de vapor ao longo dos estágios.

Para a análise da Linha de Operação Inferior ou de Esgotamento (LOI) é realizada uma análise similar à anterior, considerando-se o balanço de massa a partir do esquema abaixo.

Figura 6. Volume de controle na região de esgotamento.



Paralelamente, realiza-se os seguintes balanços de massa global e por componente para a base da coluna, região de esgotamento se tem:

$$\text{Entrada} = \text{saída}$$

$$L_{m+1} = V_m + B$$

$$L_{m+1}x_{m+1} = V_my_m + Bx_b$$

Realizando a mesma aproximação $L_m = \bar{L}$ e $V_m = \bar{V}$ e portanto, a equação para a parte inferior da coluna é

$$y = \frac{\bar{L}}{\bar{V}}x - \frac{B}{\bar{V}}x_B$$

Assim, como realizado anteriormente a equação acima mostra como a composição de vapor varia com a região de fundo dessa seção.

Parâmetros do processo:

- F representa a corrente de alimentação e x_f representa a fração mássica de alimentação;
- V, \bar{V}, L e \bar{L} representam respectivamente a corrente de vapor (estágio n), a corrente de vapor no estágio (estágio $n-1$), a corrente de líquido (estágio n) e a corrente de líquido (estágio $n-1$);
- D e x_D representam a corrente de destilado e a fração mássica de destilado;
- B e x_B representam a corrente de fundo e a fração mássica de fundo

Outra medida importante para se levar em consideração no balanço de massa é a razão de refluxo. A razão de refluxo é uma medida importante na indústria química, pois permite controlar a qualidade de uma reação química. Como afirma o químico Peter Atkins, "A razão de refluxo é uma medida da eficiência de uma reação. Quanto maior a razão de refluxo, mais eficiente é a reação."¹⁸

A razão de refluxo é calculada dividindo o número de mols de material condensado retornados ao reator pela quantidade de mols consumidos na reação. Quando a razão de refluxo é alta, significa que a maior parte do material condensado está sendo retornado ao reator, o que aumenta a eficiência da reação. Além disso, a razão de refluxo também é importante porque permite controlar a temperatura da reação. Quando a razão de refluxo é ajustada corretamente, a temperatura do reator pode ser mantida constante, o que é fundamental para o sucesso da reação química. Em resumo, a razão de refluxo é uma medida crucial na indústria química, pois permite controlar a qualidade e a eficiência da reação química. É importante entender a importância da razão de refluxo e como ajustá-la corretamente para garantir resultados ótimos.

Existem diversos tipos de energia, como, por exemplo, Calor, Trabalho, Energia Cinética, Energia Potencial, Energia elétrica, entre outras. Da mesma forma que a matéria, a energia de um sistema não pode ser destruída, mas pode ser transformada em outros tipos de energia. Com isso, é sempre necessário realizar o balanço energético de um sistema para analisar como a energia está sendo transformada e de que forma ela deve e pode ser aproveitada.

Para o caso de uma torre de destilação, os principais balanços materiais do processo são o balanço térmico global (Equação 6) e o balanço térmico no condensador (Equação 7).

$$Fq_F + Q_r = Dq_D + Bq_B + Q_C \quad (6)$$

$$Vq_V = Lq_L + Dq_D + Q_C \quad (7)$$

No balanço térmico global, F é a vazão mássica de alimentação, Q_r o calor introduzido pelo refeedor, D a vazão mássica do destilado, q_D o calor contido no destilado, B a vazão mássica do produto de fundo, q_B o calor contido no produto de fundo e Q_C o calor retirado pelo condensador. Já para o balanço do condensador, V é a vazão mássica do vapor de topo, q_V o calor contido no vapor de topo, L a vazão mássica do refluxo externo e q_L o calor contido no refluxo externo.¹⁹

4. PROJETO DA PLANTA

O projeto da planta visa promover a construção de uma unidade de produção de etilbenzeno eficiente, segura e de qualidade. Para isso, serão apresentadas as tabelas que caracterizam as correntes do processo, seguindo o modelo das folhas de especificação. Nos tópicos a seguir, serão descritos os equipamentos que fazem parte da planta em questão.

Tabela 2. Dados referentes à corrente 1.

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	1	
Descrição	Corrente de entrada da torre T-1	
Pressão	1,9375	kg/cm ² g
Temperatura	145,4	°C
Vazão mássica	11024,5	Kg/h
Vazão molar	101,15	Kmol/h
Entalpia total	-	Mkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	16,16	m ³ /h

Peso molecular	103,8	Kg/kmol
Densidade	763,4	Kg/m ³
Viscosidade	0,2131	cP
Condutividade térmica	0,1119	W/m.°C
Calor específico	1,999	kJ/kg.°C
Tensão superficial	16,87	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
Etileno	0	0
Etano	0	0
Propileno	0	0
Benzeno	0,00168	0,0012
Tolueno	0	0
Etilbenzeno	0,896	0,8727
1,4-Dietilbenzeno	0,10232	0,1260

Tabela 3. Dados referentes à corrente 11.

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	11	
Descrição	Corrente de saída da torre T-1	
Pressão	1,4276	kg/cm ² g
Temperatura	191,1	°C
Vazão mássica	1485,9	Kg/h
Vazão molar	11,3	Kmol/h
Entalpia total	-	Mkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	

PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	0,3021	m ³ /h
Peso molecular	115	Kg/kmol
Densidade	738,7	Kg/m ³
Viscosidade	0,2086	cP
Condutividade térmica	0,1085	W/m.°C
Calor específico	2,136	kJ/kg.°C
Tensão superficial	15,05	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
Etileno	0	0
Etano	0	0
Propileno	0	0
Benzeno	0	
Tolueno	0	0
Etilbenzeno	0,0808	0,0650
1,4-Dietilbenzeno	0,9192	0,9350

Tabela 4. Dados referentes à corrente 13.

CORRENTES MATERIAIS		
Número de corrente	13	
Descrição	Corrente de saída de etilbenzeno	
Pressão	1,1217	kg/cm ² g
Temperatura	139	°C
Vazão mássica	9538,6	Kg/h
Vazão molar	89,9	Kmol/h

Entalpia total	-	Mkcal/h
Fração de sólidos	0	
Fração de vapor	0	
PROPRIEDADES DA FASE LÍQUIDA		
Vazão volumétrica @P e T de operação	15,79	m ³ /h
Peso molecular	103,6	Kg/kmol
Densidade	767,1	Kg/m ³
Viscosidade	0,2182	cP
Condutividade térmica	0,1128	W/m.°C
Calor específico	1,584	kJ/kg.°C
Tensão superficial	17,23	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
Etileno	0	0
Etano	0	0
Propileno	0	0
Benzeno	0,0019	0,0014
Tolueno	0	0
Etilbenzeno	0,9981	0,9986
1,4-Dietilbenzeno	0,0000	0,0000

4.1. Correntes de processo

Após a apresentação das principais características das correntes do processo, é necessário descrever cada uma delas a partir da sua atuação dentro da planta. Para isso, utiliza-se como base o diagrama de fluxo de processos apresentado na figura 2 que tem

como foco a torre de destilação (T-1), responsável pela obtenção final do etilbenzeno puro.

A corrente 1, formada por benzeno, etilbenzeno e dietilbenzeno, entra no trocador de calor (E-1), que é responsável por promover o pré-aquecimento da corrente 2 ou corrente de alimento da torre T-1. Após o fracionamento na torre de destilação, a corrente 3 sai como produto de topo rico em etilbenzeno e passa pelo condensador E-2 para então deixá-lo na forma de destilado (corrente 4). Com isso, a corrente 4 se destina ao vaso pulmão (V-1), responsável por armazenar o destilado. A partir desse ponto, parte do destilado (corrente 6) é bombeado pela bomba P-1 e retorna à coluna de destilação (corrente 7) com maior pressão, visando uma melhor separação dos componentes. Enquanto isso, a corrente 5 é bombeada pela bomba P-3 até 200 kPa, gerando a corrente 13 que deixa o processo com destino à planta de estireno.

Já o produto de fundo, rico em dietilbenzeno e resíduos de etilbenzeno superiores, é dividido em duas correntes. A corrente 8 passa pela caldeira do tipo Reboiler e retorna à torre de destilação na forma de vapor (corrente 9), a fim de melhorar a separação e introduzir mais calor ao sistema. A corrente 10 passa pela bomba P-2, tem sua pressão elevada até 2000 kPa e se destina ao trocador de calor E-1 como corrente 11. Por fim, a corrente 11 deixa o trocador de calor como corrente 12. Essa integração tem como objetivo reduzir o consumo de energia da torre pelo reaproveitamento do calor para aquecimento da corrente de entrada do sistema.

4.2. Bombas

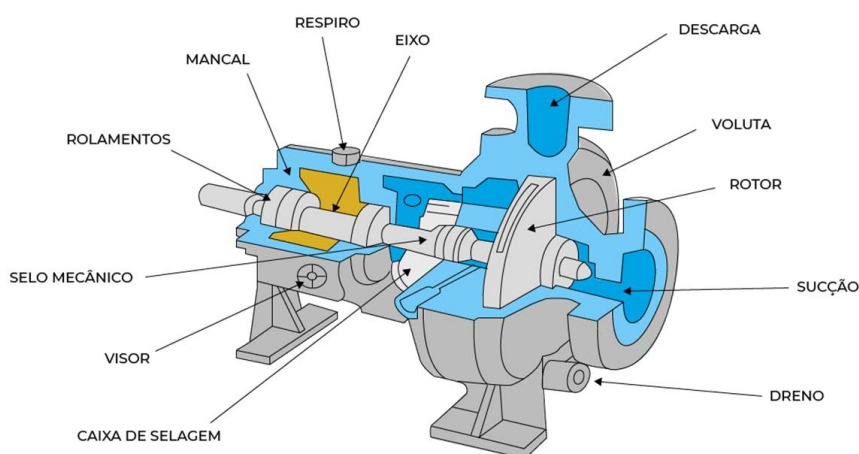
As bombas são máquinas que transferem energia ao fluido com a finalidade de transportá-lo de um ponto a outro. Elas recebem energia de uma fonte motora e cedem parte dela ao fluido, na forma de energia de pressão e/ou energia cinética, aumentando sua pressão e velocidade²⁰. Com isso, torna-se de suma importância a relação entre a energia cedida pela bomba ao fluido e a energia que esta recebeu da fonte motora, uma vez que esse dado determina o rendimento da bomba. Sendo assim, utiliza-se dessa relação no momento de escolha da bomba ideal para determinado processo.

As bombas são classificadas, basicamente, em volumétricas, ou de deslocamento positivo, e turbobombas, também chamadas de cinéticas ou bombas de fluxo. Bombas

volumétricas possuem uma ou mais câmaras que contêm um elemento móvel responsável por aumentar a pressão e provocar o movimento. Dessa forma, o fluido ocupa e desocupa, de forma sucessiva, espaços dentro da bomba, sendo que o movimento do fluido se dá na mesma direção das forças aplicadas sobre ele e por isso a bomba também é classificada como de deslocamento positivo. Por fim, essas bombas se dividem em alternativas, como as de pistão, diafragma e membrana, e em rotativas, como as de engrenagem, peristálticas, helicoidais, entre outras.

No caso das turbobombas, a energia é fornecida ao líquido por meio de um rotor (impulsor ou impelidor) responsável por aumentar sua energia cinética, que será convertida em energia de pressão²¹. O líquido entra na carcaça da bomba de forma axial e sai do equipamento em movimento radial devido à ação da força centrífuga. Por conta disso, essas bombas são usualmente chamadas de bombas centrífugas (Figura 4).

Figura 7. Estrutura de uma bomba centrífuga²².



Para o projeto das três bombas (P-1, P-2 e P-3) presentes na planta de produção do etilbenzeno, optou-se por desenvolver bombas centrífugas devido a sua alta eficiência, baixo custo, fácil operação e por serem as mais utilizadas em indústrias químicas. A seguir, serão apresentadas as bases de cálculo de projeto das bombas que envolvem a determinação das correntes de impulsão e de admissão, a potência consumida e o custo associado a cada uma delas.

Primeiramente, é necessário calcular a potência consumida pela bomba (W_{bomba}), a partir dos dados de vazão volumétrica (\dot{Q}), diferença entre a pressão de admissão e a pressão de impulsão (ΔP) e as eficiências elétrica (η_e) e hidráulica (η_h). A fórmula é dada pela equação abaixo.

$$W_{bomba} = \frac{\dot{Q} \Delta P}{\eta_e \eta_h}$$

Em geral, as eficiências elétrica e hidráulica variam na faixa de 85 a 95% e 30 a 60%, respectivamente. Nesse caso, utilizam-se os valores médios de 90% e 45%.

O custo total da bomba (C_{bomba}) é obtido pela soma do custo da carcaça (C_c) e do custo do motor (C_m) e deve ser multiplicado por dois. Isso se deve ao fato de que as bombas devem ser instaladas de forma duplicada para casos de falha em um dos equipamentos, assim evitando que o processo seja interrompido. Tendo isso em mente, seguem abaixo as equações de custo das bombas.

$$C_c = 8000 + 240 \times S^{0,9}$$

$$C_m = -1100 + 2100 \times S^{0,6}$$

$$C_{bomba} = (C_c + C_m) \times 2$$

Em que S representa a vazão volumétrica do fluido que entra no equipamento em L/s e a potência da bomba em kW, respectivamente.

Por fim, adicionando-se o fator de Hand (f) igual a 4 para contabilizar custos de instalação, obtém-se o custo total da bomba, incluindo o equipamento em si e a sua instalação.

$$C_{bomba,t} = C_{bomba} \times 4$$

Já para o custo anual da parte elétrica, ou seja, o gasto com energia para o funcionamento das bombas, considerou-se um tempo de operação de 8000h/ano e um custo de USD 0,06 por kWh, segundo a equação abaixo.

$$C_{energia} = W_{bomba} \times 8000 \times 0,06$$

Além de toda essa análise de custo, é importante se atentar ao valor de NPSH (Net Positive Suction Head) requerido e disponível na hora de escolher a bomba ideal para uma planta específica. Essa característica é definida como a diferença entre a pressão de sucção e a pressão de vapor do líquido com a bomba em funcionamento normal, sendo de extrema importância para evitar que ocorra a cavitação do equipamento. Esse fenômeno ocorre quando a pressão de um líquido a uma temperatura constante desce abaixo do ponto de pressão de vapor saturado, o que acaba gerando bolhas de ar no líquido²³.

Sendo assim, o NPSH disponível, referente à pressão absoluta exercida pelo sistema na entrada da bomba, deve ser maior que o NPSH requerido fornecido pelo fabricante, referente à pressão mínima exigida na entrada da bomba para evitar cavitação. Portanto, cabe ao projetista calcular o NPSH disponível através da fórmula abaixo.

$$NPSH_{disponível} = \frac{P_{adm} - P_v}{\rho g} - h_f \pm H$$

Em que P_v representa a pressão de vapor do líquido, ρ representa a densidade do líquido, g a aceleração da gravidade, h_f as perdas por fricção na linha de admissão e H a altura geométrica da admissão.

4.2.1. Projeto da bomba P-1

A bomba P-1 é responsável por realizar o bombeamento de parte do destilado advindo do vaso pulmão (corrente 6) de volta para a torre de destilação, sendo, portanto, conhecida como bomba de refluxo. Essa ação tem como objetivo melhorar a eficiência da torre, ou seja, aumentar a separação dos componentes. A seguir, é possível observar o modelo representativo da bomba (Figura 4) e os seus parâmetros característicos utilizados para o cálculo de custo (equipamento + instalação).

Figura 8. Modelo usado para projeto de bomba P-1

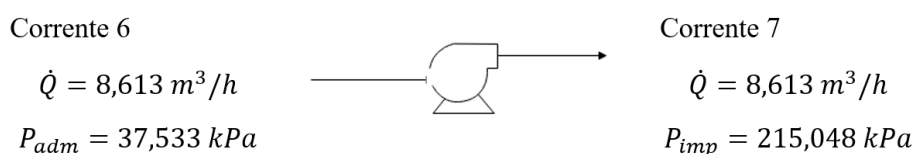


Tabela 5. Parâmetros característicos da bomba P-1.

Parâmetro característicos	Valor
Pressão na admissão (kPa)	37,5331
Pressão na impulsão (kPa)	215,048
Diferença de pressão (kPa)	177,5149
Pressão de <i>shut-off</i> (kPa)	213,0179
Vazão volumétrica (m ³ /h)	8,6130
Potência consumida pela bomba (kW)	1,0487
Custo (\$)	47147,8083
Custo anual de eletricidade (\$)	503,3533
Custo anualizado total (\$)	16203,5735

4.2.2. Projeto da bomba P-2

A bomba P-2 é responsável por fazer o bombeamento da corrente de produto de fundo que sai da torre T-1 até a entrada do trocador de calor E-1. A seguir, é possível observar o modelo representativo da bomba (Figura 5) e os seus parâmetros característicos utilizados para o cálculo de custo (equipamento + instalação).

Figura 9. Modelo usado para projeto de bomba P-2.

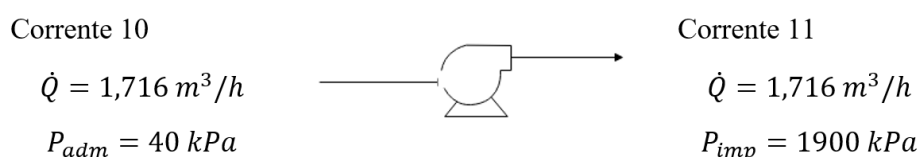


Tabela 6. Parâmetros característicos da bomba P-2.

Parâmetro característicos	Valor
Pressão na admissão (kPa)	10
Pressão na impulsão (kPa)	1900
Diferença de pressão (kPa)	1890
Pressão de <i>shut-off</i> (kPa)	2268
Vazão volumétrica (m ³ /h)	1,7165
Potência consumida pela bomba (kW)	2,1898
Custo (\$)	41536,55
Custo anual de eletricidade (\$)	1051,082
Custo anualizado total (\$)	14882,752

4.2.3. Projeto da bomba P-3

A bomba P-3 é responsável por fazer o bombeamento de parte da corrente de destilado, rica em etilbenzeno, que deixa o vaso acumulador em direção à saída da planta. A seguir, é possível observar o modelo representativo da bomba (Figura 6) e os seus parâmetros característicos utilizados para o cálculo de custo (equipamento + instalação).

Figura 10. Modelo usado para projeto de bomba P-3.

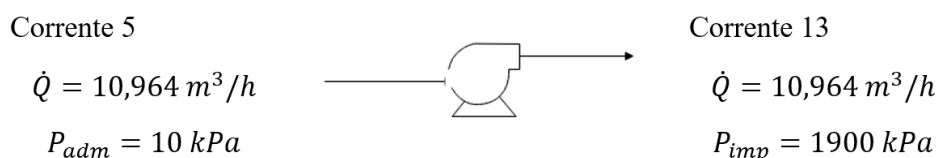


Tabela 7. Parâmetros característicos da bomba P-3.

Parâmetro característicos	Valor
Pressão na admissão (kPa)	10
Pressão na impulsão (kPa)	1900
Diferença de pressão (kPa)	1890

Pressão de <i>shut-off</i> (kPa)	2268
Vazão volumétrica (m ³ /h)	10,9642
Potência consumida pela bomba (kW)	14,2128
Custo (\$)	71509,67
Custo anual de eletricidade (\$)	6822,15
Custo anualizado total (\$)	30634,87

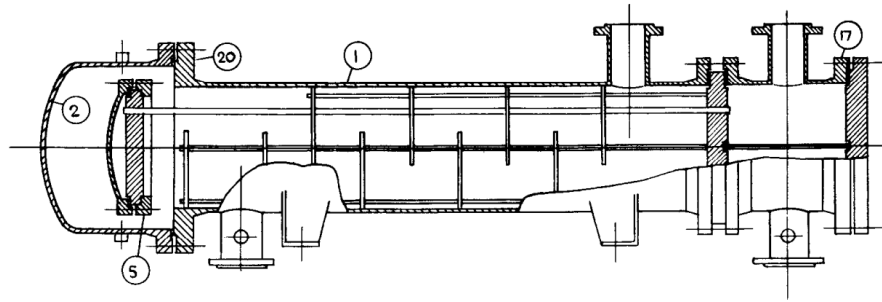
4.3. Trocadores de calor

Em um sistema industrial os trocadores de calor são de extrema importância, esses dispositivos permitem a troca de calor de dois fluidos que estão em diferentes temperaturas sem que haja um contato entre eles. Geralmente, a transferência de calor em um trocador de calor acontece por meio da convecção em cada fluido e a condução entre a parede que separa os dois fluidos ¹⁶.

Existem vários tipos de trocadores de calor, onde a escolha desses dispositivos dependerá das variáveis características do processo, tais como: a pressão e temperatura de operação, características dos fluidos de trabalho e área de troca térmica. Logo, para a planta de produção do etilbenzeno faz-se necessário a utilização de três trocadores de calor, o E-1 para a corrente de entrada, o E-2 e E-3 para as correntes de saída do processo.

No processo de produção de etilbenzeno foram utilizados trocadores de calor de casco e tubo de cabeçote flutuante, que são largamente utilizados em refinarias de petróleo e apresentam alta confiabilidade e eficiência. Estes são trocadores que contém um vasto número de tubos inseridos em um casco com seus respectivos eixos paralelos ao do casco. Logo, a transferência de calor ocorre com um fluido de escoamento no interior dos tubos, ao mesmo tempo que, o outro fluido escoava fora dos tubos, por meio do casco. Normalmente, coloca-se *chicanas* no casco para fazer com que o fluido percorra toda a sua superfície, logo assim aumentando a transferência de calor e conservando a uniformidade do espaçamento entre os tubos ¹⁶.

Figura 11. Esquema de um trocador de calor casco e tubo de cabeçote flutuante ²⁴.



Levando em consideração as condições do sistema, foi feito primeiramente o dimensionamento dos três trocadores de calor calculando-se a diferença de temperatura média logarítmica (ΔT_{ml}):

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

No qual, T_1' é a temperatura de entrada do fluido quente, T_2' é a temperatura de saída do fluido quente, já nas variáveis T_1'' e T_2'' temos a temperatura de entrada do fluido frio e a temperatura de saída do fluido frio, respectivamente. Assim, determinada a diferença de média logarítmica foi possível fazer o cálculo da estimativa do fator de correção F_t da diferença de temperatura:

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

Em que, para vaporizadores e condensadores F_t é igual a 1. Então, foi feito o cálculo da área de troca térmica A , um dos principais parâmetros de projeto de um trocador de calor do tipo casco e tubo:

$$A = \frac{Q}{U \times \Delta T_{ml} \times F_t}$$

Onde, Q é o calor transferido por unidade de tempo e U é o coeficiente global de transferência de calor. Isto posto, calculou-se a área de cada tubo do trocador (A_{tubo}):

$$A_{tubo} = \pi \times D_t \times L_t$$

No qual, D_t é o diâmetro do tubo e L_t é o comprimento do tubo. Então, com o valor da área dos tubos foi calculado o número de tubos por meio da razão da área térmica e da área do tubo:

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

Com os valores da área de troca térmica, foi estimado os custos dos trocadores (C_{cc}), em dólar, fundamentado nas correlações disponibilizadas na Tabela 6.6 do livro Chemical Engineering Design. Logo, para os trocadores de calor de casco e tubo utilizou-se os valores de $a = 32000$, $b = 70$ e $n' = 1,2$ conforme a fórmula abaixo:

$$C_{cc} = a + b \times S^n$$

Em que a , b e n são parâmetros que dependem do tipo de trocador de calor e S é a área calculada do trocador.

Em suma, com os valores dos custos de compras dos trocadores, foi possível calcular o custo de instalação (C_i) do mesmo, conforme a expressão abaixo:

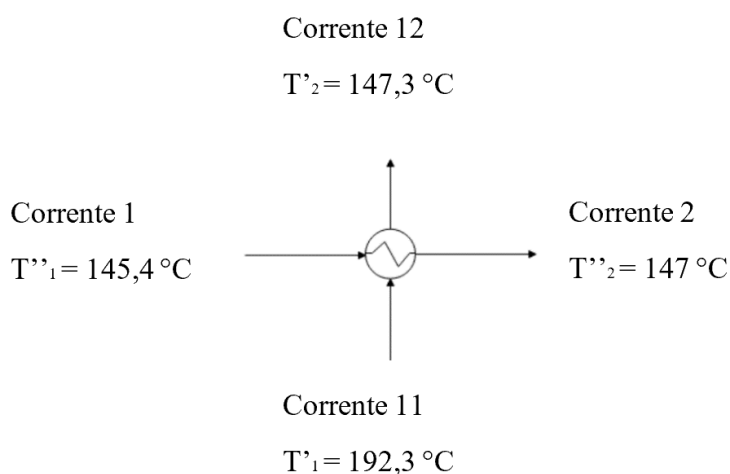
$$C_i = f C_{cc}$$

Na qual f_{Lang} é o Fator de Lang, parâmetro utilizado para todos os trocadores de calor no valor de 3,5. Então, diante do exposto, os próximos subtópicos abordarão circunstanciadamente o dimensionamento de cada trocador de calor.

4.3.1 Projeto do trocador de calor E-1

Como explicitado anteriormente, esse trocador de calor (Figura 8) tem como objetivo aquecer a corrente de alimentação, formada por benzeno, etilbenzeno e dietilbenzeno, antes da sua entrada na torre de destilação T-301. Como forma de reduzir o consumo de energia da planta, parte do produto de fundo (corrente 11) é bombeado e integrado a esse trocador para atuar como fluido auxiliar de aquecimento.

Figura 12. Esquema do projeto do trocador E-1.



Os parâmetros característicos do equipamento utilizados para o projeto se encontram na Tabela 8 abaixo, assim como o resultado de custo anualizado do equipamento. Nesse caso, o fator de correção F_t de diferença de temperatura é diferente de 1 e foi calculado utilizando a fórmula explicitada no tópico anterior.

Tabela 8. Parâmetros característicos do trocador de calor E-1.

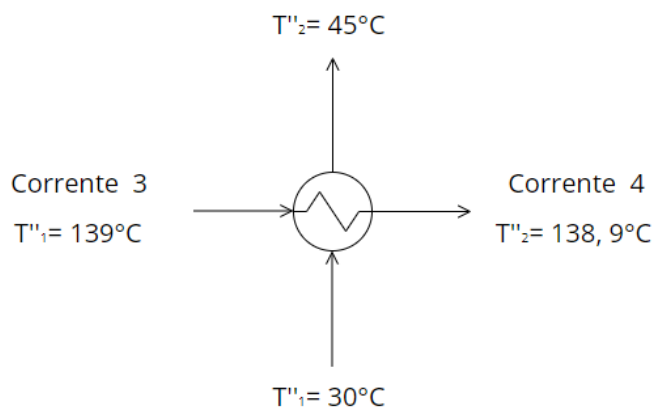
Parâmetro característicos	Valor
Temperatura de entrada do fluído de processo (°C)	145,4
Temperatura de saída do fluído de processo (°C)	147
Temperatura de entrada de fluído de processo 2 (°C)	192,3
Temperatura de saída de fluído de processo 2 (°C)	147,3
Calor trocado (kcal/h)	36100
Área de troca (m ²)	17,4738
Número de tubos	48
Custo (\$)	119586,3
Custo anualizado total (\$)	39822,24

4.3.2 Projeto do trocador de calor E-2

O condensador E-2 (Figura 9) é um trocador de calor cuja função é condensar a corrente que sai pelo topo da coluna (corrente 3). A corrente sai da coluna na forma de vapor entra em E-2, onde ocorre a mudança de fase. A corrente que sai do condensador segue na forma líquida (corrente 4) e passa para o vaso pulmão (V-1), de onde uma parte

desse líquido é direcionado para outra unidade da planta como produto de topo (correntes 5 e 13) e a outra parte retorna para a coluna em forma de refluxo (correntes 6 e 7).

Figura 13. Esquema do projeto do trocador E-2.



Da mesma maneira que o trocador do tópico anterior, os parâmetros característicos desse equipamento utilizados para o projeto se encontram na Tabela 9 abaixo, assim como o resultado de custo anualizado do equipamento.

Tabela 9. Parâmetros característicos do trocador de calor E-2.

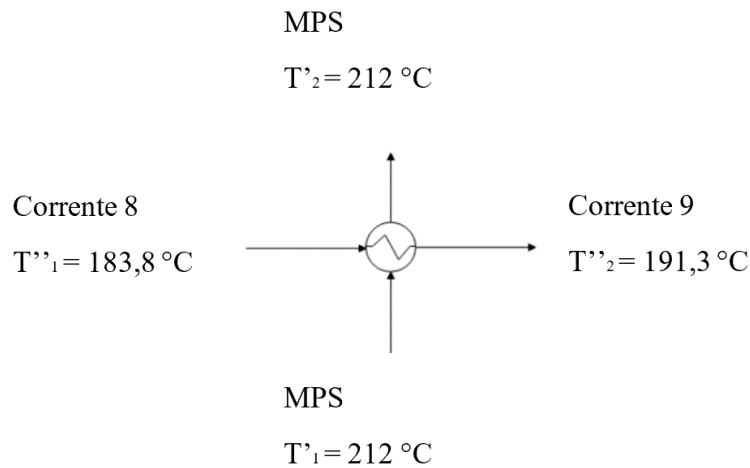
Parâmetro característicos	Valor
Temperatura de entrada do fluído de processo (°C)	139
Temperatura de saída do fluído de processo (°C)	138,9
Temperatura de entrada da água de refrigeração (°C)	30
Temperatura de saída da água de refrigeração (°C)	45
Calor trocado (kcal/h)	1283232,96
Área de troca (m ²)	17,3347
Número de tubos	48
Custo (\$)	119513,9515
Custo anual água de refrigeração (\$)	18079,69163
Custo anualizado total (\$)	57877,8375

4.3.3 Projeto do trocador de calor E-3

O trocador de calor E-3 (Figura 10) é um refervedor tipo caldeira responsável por aquecer e vaporizar o produto de fundo da torre de destilação (corrente 8). As caldeiras são equipamentos destinados a produzir e acumular vapor sob pressão superior à

atmosférica, utilizando qualquer fonte de energia. Nesse caso, a fonte de calor é advinda de um vapor de média pressão (MPS) que atua como corrente de serviço e promove o retorno à torre do produto de fundo na fase gasosa (corrente 9).

Figura 14. Esquema do projeto do trocador E-3.



Os parâmetros característicos do equipamento utilizados para o projeto se encontram na Tabela 10 abaixo, assim como o resultado de custo anualizado do equipamento.

Tabela 10. Parâmetros característicos do trocador de calor E-3.

Parâmetro característicos	Valor
Temperatura de entrada do fluido de processo (°C)	183,8
Temperatura de saída do fluido de processo (°C)	191,3
Temperatura de entrada do vapor de média pressão (°C)	212
Temperatura de saída do vapor de média pressão (°C)	212
Calor trocado (kcal/h)	1250000
Área de troca (m ²)	57,1510
Número de tubos	157
Custo (\$)	143448,1466
Custo anual operativo do vapor (\$)	261732,3004
Custo anualizado total (\$)	309500,5332

4.4. Vasos pulmões

Em plantas de separação de destilados um componente muito importante são os vasos pulmão, eles atuam como acumuladores de fluidos capazes de manter o ritmo da

produção garantindo fluxo de material para a unidade quando a demanda aumenta ou reservando para situações de falta de insumo.

A configuração mais comum dos vasos pulmão é horizontal pelo fato de possuírem uma relação gás/líquido mais baixa e seu projeto é definido a partir da velocidade linear máxima ascendente permissível para o gás não arrastar gotículas de líquido.

Para a planta de produção de etilbenzeno o vaso V-1 atua como vaso de refluxo da torre T-1, retornando uma fração líquida e liberando uma fração de destilado para a bomba P-3.⁸ Inicialmente para projetar o vaso é necessário calcular o volume de líquido (V_L) necessário para atender a demanda operacional, considerando-se um tempo de retenção (r) de 15 minutos para garantir a segurança do processo:

$$V_L = Q_L \times r$$

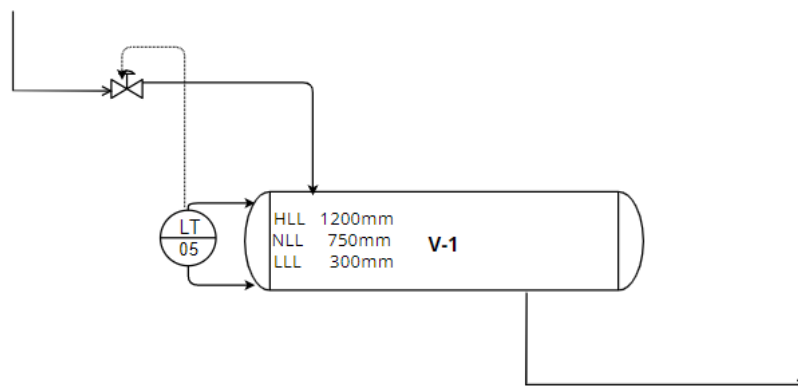
Em que, Q_L é a vazão volumétrica de líquido para uma torre de 46 pratos.

$$V_L = 21,2 \frac{m^3}{h} \times \frac{15 \text{ min}}{60 \text{ min/h}} = 5,3 \text{ m}^3$$

Sabendo o volume de líquido que a o vaso receberá e considerando que seu nível normal seja de 50% do volume total, por questões de segurança, sendo o nível superior HLL correspondente a 80% do diâmetro e o LLL correspondente a 20% da altura. então tem-se que o volume do vaso (V_V) dado pelo dobro do volume de líquido:

$$V_V = 2 \times 5,3 \text{ m}^3 = 10,6 \text{ m}^3 \sim 11 \text{ m}^3$$

Figura 15. Esquema do vaso pulmão V-1.



Assim, é possível trabalhar a otimização do diâmetro do vaso (D_V) a partir da razão com o comprimento (L_V) considerando um valor típico entre 2 e 5:

$$D_V = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot V_V}{\pi \cdot (L_V/D_V)}}$$

A partir desses valores determinar a espessura (t) do vaso utilizando a seguinte fórmula empírica:

$$t = \frac{P_i D_i}{2SE - 1,2P_i}$$

Onde, D_i é o diâmetro interno do vaso calculado, P_i é a pressão de projeto interna, considerando que o perfil de pressão de 1,4 bar no fundo que em valor relativo seria 0,4 bar. Como é um valor bem baixo utiliza-se o limite mínimo de projeto que é 3,5kg/cm².

O próximo parâmetro da equação é o S_s que é a eficiência da solda que para extremidades duplamente soldadas tem o valor típico de 0,85. Por fim, o parâmetro E é a tensão máxima de resistência do material, como a faixa de operação não ultrapassa 500°F é possível escolher 12,9 ksi (88,94 N/mm²). É adequado ainda considerar um acréscimo de sobre espessura por corrosão de 3mm¹⁵.

Então calcula-se o peso do vaso (W_v) por:

$$W_v = 240C_w D_i (L + 0,8D_i) t$$

Sendo $C_w = 1,08$ para vasos. O valor obtido está na unidade de força (N), então deve-se dividir pela aceleração da gravidade obtendo o peso em quilogramas do equipamento.

Então é possível estimar o custo do vaso (C_e) a partir da seguinte fórmula:

$$C_e = a + bS^n$$

Em que para um vaso horizontal de aço inoxidável $a = 12.800$, $b = 73$ e $n = 0,85$ são parâmetros retirados da Tabela 6.6 do Chemical Engineering Design. O custo de instalação em geral é de 4 vezes o custo de compra do equipamento, e considerando a Tabela 6.11 do Chemical Engineering Design, para uma taxa de desconto de 15% em um

horizonte temporal da unidade de 10 anos a ACCR, do inglês *Annual Capital Charge Ratio* é de 0,199¹⁵.

Desta forma, utilizando a ferramenta de otimização do software Excel (Solver) e dados os parâmetros característicos do vaso obteve-se os seguintes resultados:

Tabela 11. Parâmetros característicos do vaso V-1.

Parâmetro característicos	Valor
Comprimento do vaso (m)	6,3
Diâmetro do vaso (m)	1,5
Espessura do vaso (mm)	6,3
Nível máximo de líquido (m)	1,2
Nível normal de líquido (m)	0,75
Nível mínimo de líquido (m)	0,3
Pressão de projeto (kPa)	344
Temperatura de projeto (°C)	260

Tabela 12. Otimização econômica do vaso V-1.

Otimização econômica	Valor
Peso (kg)	1.840
Custo do equipamento (\$)	56.294
Custo total (equipamento + instalação) (\$)	225.176
Custo anualizado 15% por 10 anos (\$)	74.984

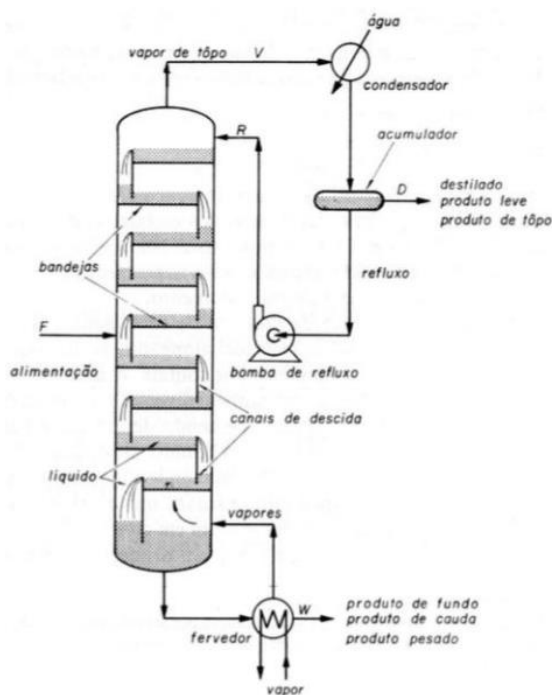
4.5. Torres de separação

A destilação é uma operação extensamente utilizada em indústrias químicas que permite a separação de misturas de componentes líquidos através da evaporação e condensação desde que estes tenham volatilidades distintas, desta forma o agente de separação é o calor. No processo de destilação fracionada a separação das substâncias é bastante vantajosa pelo fato de ocorrer vaporizações e condensações sucessivas que enriquece a fração vaporizada com as substâncias mais voláteis, permitindo obter um destilado muito próximo da pureza¹⁹.

As colunas de destilação funcionam como um grande vaso em que a base é aquecida promovendo a evaporação dos compostos mais voláteis, estes vapores tendem a ascender para o topo da coluna. Durante o percurso, parte dos condensados não

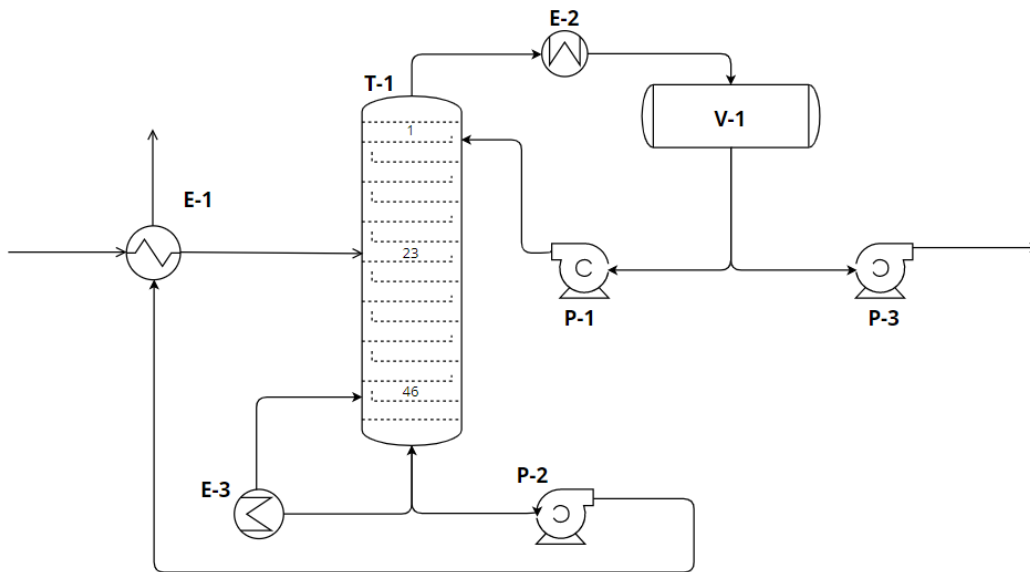
atravessa todos os pratos, condensando e retornando para a fração líquida. Este movimento de vapor ascendente e líquido descendente ocorre durante todo o processo fazendo com que os componentes mais pesados retornem à base da coluna e aumentando a eficiência da separação ¹⁹.

Figura 16. Princípios de torres de destilação²⁵.



A alimentação com a mistura a ser destilada (etilbenzeno + dietilbenzeno) da coluna a ser otimizada neste trabalho ocorre no ponto médio para garantir o equilíbrio líquido/vapor, e a mistura a ser separada desce até atingir sua base, onde está localizado um refulvedor que atua aumentando a temperatura da mistura até que esta atinja o ponto de ebulição emitindo vapores em sentido ascendente, em contracorrente com o fluxo de alimentação ²⁶. O ponto de ebulição do etilbenzeno (EB) é 136 °C e o do dietilbenzeno (DEB) é 180°C fazendo com que o fracionamento seja de EB pelo topo da coluna onde o vapor encontra um condensador, retornando à fase líquida como produto, e de DEB pelo fundo como subproduto, ambos com graus de recuperação de pelo menos 99% ²⁷.

Figura 17. Esquema da torre T-1.



Inicialmente para projetar a torre de destilação T-1 considera-se sua estrutura como um vaso. Utilizando o Software Aspen HYSYS é possível realizar simulações do projeto da torre e obter dados das condições internas de operação. Assim sabe-se que a maior vazão volumétrica de gás foi obtida no topo da torre, onde há maior fluxo de destilado, no primeiro prato. A máxima vazão volumétrica de vapor (Q_{vap}) obtida foi de 4.533 kg/m^3 , com uma densidade do gás (ρ_G) de $3,54 \text{ kg/m}^3$ e uma densidade do líquido em contracorrente (ρ_L) de $757,15 \text{ kg/m}^3$.

Assim pela equação de York determina-se a velocidade limite (v_{lim}):

$$v_{lim} = \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_G}{\rho_G}} = 1,022 \text{ m/s}$$

E através da velocidade limite, que possui uma relação direta com a seção transversal mínima ($S_{mín}$) e a vazão de vapor:

$$S_{mín} = \frac{Q_{vap}}{v_{lim}} = 1,23 \text{ m}^2$$

Sabendo a seção transversal da torre é possível encontrar seu diâmetro (D_t). É prudente sempre em plantas químicas utilizar um sobre dimensionamento de 20% no projeto de torres:

$$D_t = \sqrt{\frac{4 \cdot S_{\min}}{\pi}} + 20\% = 1,5 \text{ m}$$

Para os demais cálculos utiliza-se o diâmetro em unidade de pés, $D_t = 4,93 \text{ ft}$, o qual sugere-se um nível inferior de líquido (*LLL*) de 6 polegadas. Pela operação da coluna de separação estar alimentando uma bomba ou tanque seguinte no processo, os tempos de residência de *Holdup time* e de *Surge time* são de 5 e 2 minutos, respectivamente¹⁵. Estes tempos garantem que em emergências a torre funcione com um acumulador, evitando maiores acidentes e determinam os níveis de líquido da torre. Sendo o nível normal de líquido (*NLL*) dado por:

$$NLL = LLL + \frac{Q_{vap} \cdot 5 \text{ min}/60}{S_{\min}}$$

E o nível máximo de líquido (*HLL*) dado por:

$$HLL = NLL + \frac{Q_{vap} \cdot 2 \text{ min}/60}{S_{\min}}$$

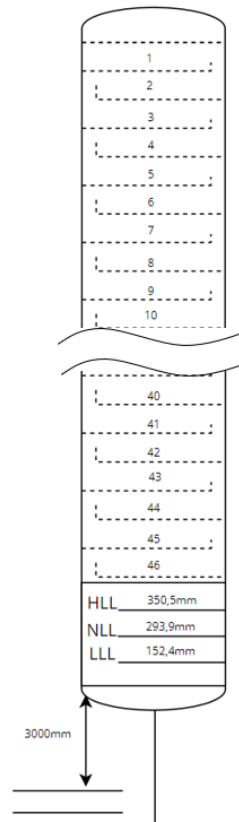
A altura total do fundo se dá pela soma nos níveis estabelecidos com uma distância de 0,91 m até o último estágio:

$$H_{\text{último estágio}} = 0,91 + HLL$$

Por se tratar de uma operação com uma mistura de produtos de fácil manejo, é possível considerar uma separação entre os pratos comuns de 0,46 m. Considera-se ainda 0,91m de espaçamento extra no topo e no fundo da coluna, e também no prato de alimentação, então a altura da coluna (H_{torre}) é determinada por:

$$H_{\text{torre}} = (n^{\circ} \text{ pratos} - 2) \cdot 0,46 + 3 \cdot 0,91$$

Figura 18. Torre de destilação T-1.



Para a estimação do ótimo econômico, como a torre geometricamente pode ser considerada como um vaso, as especificações são as mesmas utilizadas no item 4.4 do presente trabalho para o vaso pulmão. Logo a pressão relativa mínima de projeto (P_i) é $3,5 \text{ kg/cm}^2$, a máxima tensão para o material (E) são 12 ksi, a eficiência da solda (S_s) é de 85% e uma sobre espessura por corrosão de 3mm . Utilizando a equação de espessura total (t):

$$t = \frac{P_i D_i}{2S_s E - 1,2P_i} + 3\text{mm}$$

Então, calcula-se o peso da torre (W_{Torre}) por:

$$W_{Torre} = 240C_w D_n (H_{torre} + 0,8D_n)t$$

Sendo $C_w = 1,15$ para torres ou reatores e D_n o diâmetro nominal dado por:

$$D_n = D_t + t \times 10^{-3}$$

O valor obtido está na unidade de força (N), então deve-se dividir pela aceleração da gravidade obtendo o peso em quilogramas do equipamento.

Agora estima-se o custo unitário de cada prato por:

$$C_{prato} = n^{\circ} pratos \cdot (a + bS^n)$$

Onde para os pratos $a = 110$, $b = 380$ e $n = 1,8$. E finalmente, o custo do da torre (C_T) a partir da seguinte fórmula:

$$C_T = a + bS^n$$

Em que para uma torre vertical de aço inoxidável $a = 17.400$, $b = 79$ e $n = 0,85$. O custo de instalação em geral é de 4 vezes o custo de compra do equipamento, e considerando a uma taxa de desconto de 15% em um horizonte temporal da unidade de 10 anos com ACCR, do inglês *Annual Capital Charge Ratio* é de 0,199¹⁵.

Estes cálculos foram realizados para diversos números de pratos utilizando o Software Aspen HYSYS para comparação dos resultados e otimização econômica, e os dados obtidos foram:

Tabela 13. Otimização econômica para determinação do n° de pratos de Torre T-1.

N° de Pratos	Diâmetro (m)	Altura (m)	Espessura (mm)	Peso (kg)	Custo Total (\$)
10	54,9	6,56	127,9	10.014.454,99	574.015.905,11
12	4,6	7,50	13,53	19.827,36	4.647.520,63
16	2,39	7,56	8,45	5.429,81	1.199.539,62
26	1,69	14,07	6,86	5.078,67	762.940,24
46	1,5	23,3	6,42	6.686,01	724.649,44
56	1,4	27,93	6,35	7.7725	747.481,84
76	1,5	37,13	6,32	9.988,29	724.779,04

Assim determinou-se que a melhor estrutura para a torre com as condições operacionais exigidas pela planta de separação de etilbenzeno e dietilbenzeno seria com 46 pratos.

Tabela 14. Parâmetro característicos da torre de 46 pratos.

Parâmetro característicos	Valor
Diâmetro da torre (m)	1,5
Altura da torre (m)	23,3
Espessura da torre (mm)	6,42
Número de pratos	46
Espaçamento entre pratos	0,46
Prato de alimentação	23
Nível máximo de líquido (mm)	351
Nível normal de líquido (mm)	294
Nível mínimo de líquido (mm)	152
Altura total do fundo (m)	1,26
Pressão de projeto (kPa)	33,7
Temperatura de projeto (°C)	260

Tabela 15. Otimização econômica da torre T-1 com 46 pratos.

Otimização econômica	Valor
Peso (kg)	6.686
Custo do equipamento (\$)	199.762,62
Custo total (equipamento + instalação) (\$)	799.050,47
Custo anualizado 15% por 10 anos (\$)	266.083,81

A partir dos custos calculados para cada um dos equipamentos é possível estimar o custo total da planta (Tabela 15).

Tabela 16. Custos de cada equipamento.

Equipamento	Custo (\$)	Custo Anualizado (\$)
Torre	799.050,47	266.083,81
Vaso Pulmão	225.176,23	74.983,68
Condensador	119.513,95	39.798,15
Reboiler	143.448,15	47.768,23
Bomba de Refluxo	47.147,81	15.700,22
Sub Total (equipamentos)		444.334,09
Vapor	261.732,30	261.732,30
Refrigeração	18.079,69	18.079,69
Eletricidade	503,35	503,35
Sub Total (operação)		280.315,35
TOTAL		724.649,4357

4.6. Listagem de indicadores

Os indicadores são instrumentos de suma importância em uma planta industrial, tais instrumentos servem para medição das variáveis de processo mostrando para o operador seu valor numérico, tanto no próprio equipamento quanto na sala de controle. Na produção do etilbenzeno foram escolhidos os principais indicadores para o processo, sendo eles: temperatura, pressão, nível e vazão. Com isso, foram listados todos os indicadores necessários para a planta conforme a Tabela 17.

Tabela 17. Listagem de indicadores.

INSTRUMENTOS DE VAZÃO		INSTRUMENTOS DE NÍVEL	
Identificação	Localização (núm. da tubulação)	Identificação	Localização (do vaso)
FI	01,12,16	LI	V-1
FC	03	LI	T-1
FIC	18	LIC	05,17
FCV	03,06,17	-	-
FT	03,18	-	-
INSTRUMENTOS DE PRESSÃO		INSTRUMENTOS DE TEMPERATURA	
Identificação	Localização (núm. da tubulação ou vaso)	Identificação	Localização (núm. da tubulação ou vaso)
PI	01,02,12,16,19	TI	Todos os trocadores
PI	Todas as bombas	TI	01,02,09,12,14,16,19
PIC	15	-	-
PT	15	-	-

4.7. Listagem de controladores

Os controladores são instrumentos que possuem a finalidade de garantir que as variáveis do processo permaneçam no valor de interesse, podendo esses garantirem a otimização do processo produtivo por meio da eficiência na qualidade do produto e no seu rendimento. Esses instrumentos podem operar de forma automática ou manual, prezando pela segurança da planta, dado que os mesmos regulam as principais variáveis do processo. Logo, foram listados por meio da Tabela 18 todos os controladores do sistema.

Tabela 18. Listagem de controladores.

Identificação	Localização (núm. da tubulação ou vaso)
PIC	15
FIC	18
FC	03
LCV	06
FCV	17,03,06
LIC	05,17

4.8. Listagem de alarmes

Os sistemas de alarme, são sinais sonoros e luminosos que tem como objetivo de garantir a segurança da planta, quando alguma variável de processo como pressão, temperatura, nível e vazão não estão nos parâmetros pré-estabelecidos, o valor pode estar muito baixo ou alto do valor de referência (set point). Esses sistemas não tem ação imediata na ação de controle, logo tem a necessidade de um operador que identifique o sinal dos alarmes no painel de controle e tome a decisão para a ação de controle que será determinada. Abaixo segue a lista de alarmes empregados

Tabela 19. Listagem de alarmes.

Identificação	Localização (número do instrumento ou laço de controle com alarme)	Descrição
PAHH	15	Pressão muito alta
PAH	15	Pressão alta
FALL	03	fluxo muito alto
FAL	03	Fluxo alto
LAH	17,05	Nível alto
LAL	17,05	Nível baixo

4.9. Listagem de intertravamentos

Os sistemas de intertravamentos funcionam como medida de segurança. É um dispositivo que impede de se fazer manobra inadequada ou ajusta o sistema para um estado seguro se for feita qualquer manobra que não foi premeditada. São utilizados em último caso, quando as demais medidas falham ou se mostram ineficientes, esses dispositivos atuam de forma a parar o processo de produção da planta. São acionados de

forma digital a partir de alarmes de segundo nível. A tabela abaixo mostra a lista de intertravamentos:

Tabela 20. Listagem de intertravamentos.

Identificação	Localização (número do instrumento ou laço de controle com intertravamento)	Ação sobre
SI-1	15-PSHH	Para o aporte de pressão da torre
SI-1	03-FSLL	Para o aporte de fluxo no condensador
SI-1	Laço de válvula 18	Para o aporte de vapor a caldeira

4.10. Listagem de válvulas de segurança

As válvulas de segurança são instrumentos que atuam automaticamente como à prova de falhas, garantindo a segurança operacional da planta. Tais válvulas funcionam quando a planta chega à valores críticos, como o aumento excessivo de pressão, temperatura, volume ou fogo externo. Dessa forma, foram listados conforme a Tabela 21 as válvulas de segurança.

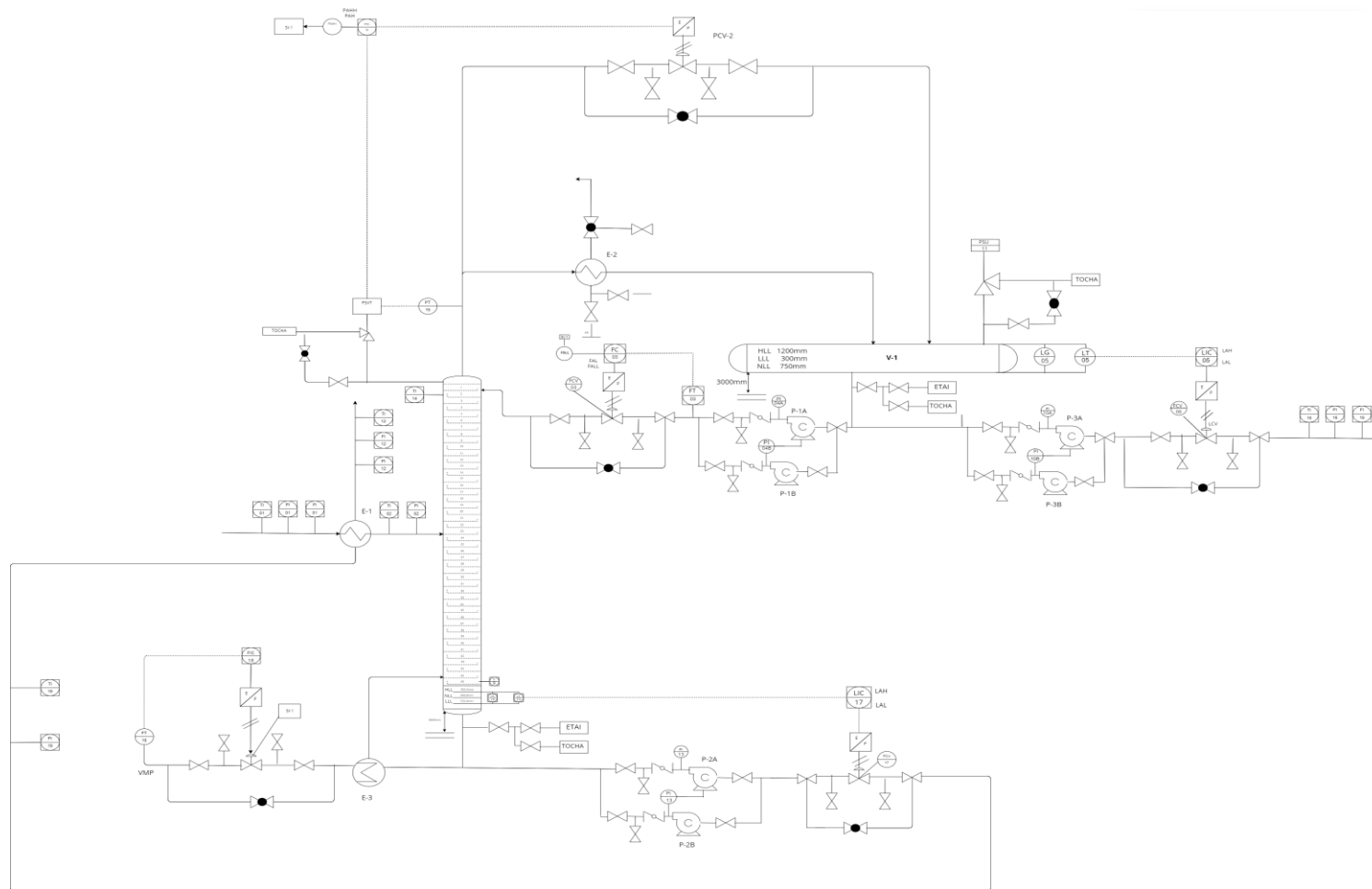
Tabela 21. Listagem das válvulas de segurança.

Identificação	Localização (número do vaso)
PSVT	14
PSU-11	11

4.11. Diagrama mecânico de processo

A imagem abaixo descreve o diagrama mecânico de processo (P&ID):

Figura 19. Diagrama mecânico (P&ID) da torre para destilação de EB (T-1).



EQUIPAMENTO	T-1	EQUIPAMENTO	V-1	EQUIPAMENTO	E1		E2		E3		EQUIPAMENTO	P1	P2	P3
Descrição	Separador	descrição	Pulmão	Descrição	Trocador de calor		condensador		caldeira		Descrição	Bomba 1	Bomba 2	Bomba 3
P topo(kpa)	110	pressão(kPa)	344	tipo	casco	tubo	casco	tubo	casco	tubo	vazão op(m3/h)	8,613	1,71649	10,9642
P fundo(kpa)	140	Temperatura(°C)	260	P entrada/ saída(kPa)	90/25	1900/1835	-	-	-	-	P impulsão(kPa)	215,048	1900	1900
T topo(°C)	139	Altura(m)	1,5	T entrada/ saída (°C)	145,4/147	192,3/147,3	30/45	139/138,9	183,8/191,3	212/212	P aspiração(kPa)	37,5331	40	10
Altura(M)	23,3	comprimento	6,3	Área (m2)	17,4738	0,36482939	17,3347901	0,36482939	57,1510407	0,36482939	Potência(kW)	1,04865	2,18975	14,2128
Diâmetro(m)	1,5	HLL (m)	1,2								NPSH(m)	3,2939	3,2939	3,3
Nº pratos	46	LLL (m)	0,3											
		NLL (m)	0,75											

4.12. Avaliação de impacto ambiental

A planta apresentada neste trabalho trabalha com uma corrente recebida composta por benzeno, etilbenzeno e dietilbenzeno, que alimenta a torre de destilação. O etilbenzeno é um dos componentes do grupo BTEX (sigla para benzeno, tolueno, etilbenzeno e xileno) que são compostos orgânicos voláteis (COVs) presentes em muitos produtos químicos, como gasolina, óleo diesel, solventes e produtos de petróleo. A exposição a estes compostos gera efeitos negativos na saúde humana e no meio ambiente, incluindo a contaminação do solo, da água e do ar.

Neste processo eventuais falhas podem ocasionar vazamentos, e sabendo que o etilbenzeno é um COV que contribui ainda com a formação de ozônio troposférico – poluente secundário resultante de reações fotoquímicas com dióxido de nitrogênio, que possui um potencial maior que o CO₂ no agravamento do efeito estufa – é de extrema importância a avaliação e controle das emissões causadas pela instalação, apesar de hoje não existirem limites legais para concentração de BTEX no ar.^{28,29}

As emissões de etilbenzeno podem ocorrer durante a produção industrial de diferentes derivados, seja a partir dos reatores, da destilação e/ou da cristalização. Tanto os produtos finais, quanto as matérias primas podem ser emitidas a partir do armazenamento inadequado, das perdas de carregamento e manuseio e ainda a partir das chamadas emissões fugitivas, que resultam de vazamentos dos equipamentos das plantas. Em geral, o etilbenzeno é emitido principalmente para a atmosfera e em menor quantidade para a água e para a terra³⁰.

Segundo a Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB), a principal via de exposição humana ao etilbenzeno é a inalação, sendo também possível a contaminação por contato dérmico e ingestão. A curto prazo, a exposição pode causar

irritação nos olhos, no nariz e na via aérea superior, podendo ainda gerar vermelhidão e bolhas na pele, fadiga, tontura e perda de coordenação. Em relação ao contato dérmico, o etilbenzeno pode causar ressecamento e dermatite. Além disso, a Agência Internacional de Pesquisa em Câncer (IARC) classifica esse composto como potencial cancerígeno humano (Grupo 2B) a partir de estudos que mostraram maior incidência de adenomas em animais expostos por vias aéreas³¹.

Devido a isso, as plantas produtoras de etilbenzeno devem implementar medidas que minimizem os riscos causados pela liberação destes insumos seja por falhas ou como produtos residuais. Medidas para controlar as emissões de etilbenzeno na atmosfera, incluindo o uso de tecnologias de captura de gases e o monitoramento contínuo das emissões estão cada vez mais sendo estudadas. Kieling, A. G. em seu trabalho relata grande potencial do uso de cinzas de casca de arroz e carvão ativado como adsorvente alternativo de BTEX com valores de remoção destes gases da atmosfera variando entre 78,8% e 100% ³².

Outra medida eficaz para o controle de emissões é a incineração de resíduos, que é uma maneira eficaz de destruir gases poluentes, incluindo o etilbenzeno, ainda mais tenho em consideração que seu potencial de interferência no efeito estufa é maior que o do CO₂. O processo de queima ocorre em uma câmara de combustão especialmente projetada para controlar as emissões de gases poluentes. Além disso o armazenamento seguro destes compostos deve ser um fator de atenção, principalmente por se tratar de um gás altamente inflamável.

Considerando o produto de fundo da torre de destilação de dietilbenzeno, ou um possível vazamento de etilbenzeno em fase líquida, o trabalho de Gimenez, N. L. demonstrou grande efetividade na extração de compostos voláteis por meio da técnica de microextração em fase sólida por meio da fibra SPME, que consiste basicamente em dois estágios no qual a fibra é mergulhada diretamente no resíduo em fase aquosa atuando como um adsorvente, e o segundo estágio em que se aplica um processo de dessorção térmica dos analitos retidos. O estudo apresenta que a alta seletividade da fibra é capaz de detectar compostos do grupo BTEX com concentrações de 1µg/L, revelando alta eficiência no tratamento de efluentes³³.

A maneira mais segura de evitar que produtos indesejáveis entrem em contato com o ambiente é pelo monitoramento contínuo, a fim de garantir que as tecnologias de

controle de emissões estejam funcionando corretamente e para detectar qualquer aumento nas emissões, utilizando sensores e válvulas de segurança.

5. CONCLUSÕES

Em resumo, ao longo deste trabalho, foi possível encontrar uma configuração ideal para a torre de destilação para produção de etilbenzeno com pureza de 99,8 mol% com uma capacidade 80.000 toneladas anuais. Para isto realizou-se um balanço de massa e energia seguindo o princípio geral de conservação em que a soma do resíduo e do destilado devem ser iguais à soma da carga inicial da torre.

Em seguida foi apresentado o projeto de cada um dos equipamentos que compõem a instalação de produção de etilbenzeno. Para projetar a torre de destilação T-1 foram levados em conta dois pontos principais: a avaliação de viabilidade econômica e a relação com a taxa de refluxo. A partir desta análise determinou-se que o ótimo para este equipamento seria a disposição com 46 pratos, obtendo assim uma altura de 23,3 metros e um diâmetro de 1,5 metros, e seu custo anualizado considerando a uma taxa de desconto de 15% em um horizonte temporal da unidade de 10 anos foi de \$266.083,81. O vaso pulmão da torre também foi dimensionado seguindo o ótimo econômico e apresentou um comprimento de 6,3 metros com altura de 1,5 metros, custando \$74.983,68.

Igualmente, o impulsionamento de fluidos foi otimizado, neste projeto foram consideradas 3 bombas centrífugas dimensionadas por potência consumida e custo anualizado considerando o consumo de eletricidade. Obtiveram-se os seguintes resultados para cada uma das bombas, respectivamente: potência requerida de 1,049 kW, 2,190 kW e 14,213 kW, e custo total anualizado de \$16.203,57, \$14.882,75 e \$30.634,87.

Ainda, os trocadores de calor que desempenham papel fundamental no processo de destilação foram dimensionados pelo número de tubos e seu custo anualizado. O trocador de calor E-1 tem função de pré-aquecimento da corrente que entra na torre e atingiu o ótimo econômico com 48 tubos e um custo de \$39.822,24. O trocador E-2 tem função de condensar a corrente que sai pelo topo da coluna, e apresentou também 48 tubos e custo de \$57.877,84. Por fim, o trocador E-3 que é o refeedor da torre, possui 157 tubos e custo de \$309.500,53.

Analisadas as dimensões do projeto foi desenvolvido um fluxograma de processos (PFD) onde são indicados os sistemas de instrumentação, controle, e os elementos de segurança da planta. Descreveu-se ainda o funcionamento, a disposição e as principais

interconexões dos equipamentos por meio de um diagrama P&ID da unidade T-1 composta pela torre de destilação e os demais equipamentos anteriormente otimizados.

Finalmente, demonstrou-se a importância de uma avaliação do impacto ambiental de uma instalação como esta, em que os produtos gerados possuem alto potencial de impactos negativos na saúde humana e no meio ambiente, incluindo a contaminação do solo, da água e do ar, e foram apresentadas algumas possibilidades para a destinação e tratamento dos principais efluentes gerados.

Para futuros trabalhos ou execução prática deste projeto, sugerem-se atualizações dos preços cotados, como de equipamentos, eletricidade e instalação, devido à alta volatilidade, pois todo o escopo do projeto foi pensado levando em consideração a análise financeira considerando uma taxa de desconto de 15% ao ano, o que quando colocado em prática pode diferir bastante.

6. BIBLIOGRAFIA

- (1) Gerzeliev, I. M.; Khadzhiev, S. N.; Sakharova, I. E. Ethylbenzene Synthesis and Benzene Transalkylation with Diethylbenzenes on Zeolite Catalysts. *Petroleum Chemistry* **2011**, *51* (1), 39–48. <https://doi.org/10.1134/S0965544111010038>.
- (2) Market Growth Reports. *Ethylbenzene Market 2023 New Technological Trends & Statistical data by Top Players 2028 [NEW REPORT] - MarketWatch*. <https://www.marketwatch.com/press-release/ethylbenzene-market-2023-new-technological-trends-statistical-data-by-top-players-2028-new-report-2023-01-19> (accessed 2023-01-21).
- (3) Junqueira, P. G.; Caxiano, I. N.; Mangili, P. v.; Prata, D. M. Environ-Economic Analysis of Conceptual Intensification Alternatives Applied to the Ethylbenzene Production. *Comput Chem Eng* **2020**, *136*. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2020.106783>.
- (4) Hussain, A.; Minh, L. Q.; Lee, M. Intensification of the Ethylbenzene Production Process Using a Column Configured with a Side Reactor. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* **2017**, *122*, 204–212. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2017.10.003>.
- (5) CETESB. *Avaliação de Benzeno; Tolueno; o-Xileno; m, p-Xileno e Etilbenzeno Na Atmosfera Da Estação de Monitoramento de Pinheiros*; São Paulo, 2016.
- (6) Piceli, P. C.; Lisboa, H. de M. Quantification of Benzene, Toluene, Ethylbenzene and Xylenes in the Air of Indoor Environments. *Engenharia Sanitaria e Ambiental* **2018**, *23* (3), 527–534. <https://doi.org/10.1590/s1413-41522018119310>.
- (7) Fernández, L. *Ethylbenzene annual production capacity globally 2023 / Statista*. <https://www.statista.com/statistics/1063696/global-ethylbenzene-production-capacity/> (accessed 2023-01-21).

- (8) Richard Turton; Richard C. Bailie; Wallace B. Whiting; Joseph A. Shaeiwitz. *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes Third Edition*; 2009.
- (9) Lancia, A.; Musmarra, D.; Prisciandaro, M. Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, Fifth Edition; 2012.
- (10) Oliveira, A.; Rangel, M.; Fierro, J.; Reyes, P.; Oportus, M. *Efeito Do Cromo Nas Propriedades Catalíticas Da MCM-41*; **2005**; Vol. 28.
- (11) Tsai, T. C.; Liu, S. bin; Wang, I. Disproportionation and Transalkylation of Alkylbenzenes over Zeolite Catalysts. *Appl Catal A Gen* **1999**, *181* (2), 355–398. [https://doi.org/10.1016/S0926-860X\(98\)00396-2](https://doi.org/10.1016/S0926-860X(98)00396-2).
- (12) Luyben, W. L. Design and Control of the Ethyl Benzene Process. *AIChE Journal* **2011**, *57* (3), 655–670. <https://doi.org/10.1002/aic.12289>.
- (13) Gist, G. L.; Burg, J. R. *Benzene&Mdash;A Review Of The Literature From A Health Effects Perspective*, **1997**.
- (14) Galbraith, D.; Gross, S. A.; Paustenbach, D. Benzene and Human Health: A Historical Review and Appraisal of Associations with Various Diseases. *Critical Reviews in Toxicology*. November **2010**, pp 1–46. <https://doi.org/10.3109/10408444.2010.508162>.
- (15) Gavin Towler; Ray Sinnott. *Chemical Engineering Desing*; **2008**.
- (16) (27) *Destilação - parte 4: linhas de operação - YouTube*. <https://www.youtube.com/watch?v=JNzFlMPG6lo> (accessed 2023-02-12).
- (17) McCabe, W.L., Smith, J.C. and Harriott, P. (1993) *Unit Operations of Chemical Engineering*. McGraw-Hill, New York. - *References - Scientific Research Publishing*. [https://www.scirp.org/\(S\(351jmbntvnsjt1aadkozje\)\)/reference/referencespapers.aspx?referenceid=1517539](https://www.scirp.org/(S(351jmbntvnsjt1aadkozje))/reference/referencespapers.aspx?referenceid=1517539) (accessed 2023-02-12).
- (18) Atkins, P. W. (Peter W.; de Paula, J.; Keeler, J. *Atkins' Physical Chemistry*; **2017**.

- (19) Roitman, V. *Curso De Formação De Operadores De Refinaria - Operações Unitárias*, Equipe Petrobras.; Curitiba, **2002**.
- (20) Confederação Nacional da Indústria; IEL – Núcleo Central; ELETROBRÁS – Centrais Elétricas Brasileiras S.A. *Bombas: Guia Básico*; **2009**.
- (21) Cremasco, M. A. *Operações Unitárias Em Sistemas Particulados E Fluidomecânicos*, 2º ed.; Editora Edgard Blücher Ltda.: São Paulo: Blucher, **2014**.
- (22) *Bomba Centrífuga: quais pontos de análise de vibração - TRACTIAN*. <https://traction.com/blog/bomba-centrifuga> (accessed 2023-02-03).
- (23) Gomide, R. *Operações Unitárias - Volume 2 - Operações Com Fluidos*. *ABDR* **1997**.
- (24) Schlünder, E. U.; International Centre for Heat and Mass Transfer. *Heat Exchanger Design Handbook*; Hemisphere, **1983**.
- (25) Gomide, R. *Operações Unitárias – Vol. 4: Operações de Transferência de Massa*; **1988**; Vol. 4.
- (26) Tourton, R.; Bailie, R. C.; Whiting, W. B.; Shaeiwitz, J. A. *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes Third Edition*; **2009**.
- (27) Çengel, Y. A.; Ghajar, A. J. *Transferência de Calor e Massa: Uma Abordagem Prática*; adaptado por Mehmet Kanoglu ; tradução: Fátima A. M. Lino ; revisão técnica: Kamal A. R. Ismail.: Porto Alegre, **2012**; Vol. 4ª ed.
- (28) Rodrigues, G. S.; Martins, R. A. *Ambiental Potential Tropospheric Ozone Effects on Crops and Environmental Biomonitoring. Mudanças climáticas globais e a agropecuária brasileira*. **2001**, Cap. 6, 143–165.
- (29) CETESB. *Avaliação de Benzeno; Tolueno; o-Xileno; m, p-Xileno e Etilbenzeno Na Atmosfera Da Estação de Monitoramento de Pinheiros*; São Paulo, **2016**.
- (30) Fishbein, L. *An Overview Of Environmental And Toxicological Aspects Of Aromatic Hydrocarbons Iv. Ethylbenzene*; **1985**; Vol. 44.

- (31) CETESB. *Ficha de Informação Toxicológica*.
<https://cetesb.sp.gov.br/laboratorios/wp-content/uploads/sites/24/2022/02/Etilbenzeno.pdf> (accessed 2023-02-07).
- (32) Kieling, A. G. Adsorção De BTEX-Benzeno, Tolueno, Etilbenzeno E Xileno-Em Cinza De Casca De Arroz E Carvão Ativado. *Universidade Federal Do Rio Grande Do Sul –Ufrgsescola De Engenharia - Programa De Pós-Graduação Em Engenharia De Minas, Metalúrgica E De Materiais* **2016**.
- (33) Luiz Gimenez, N.; Lichtig, J. Avaliação Do Sistema de Tratamento de Efluentes Industriais Através Da Determinação Do Grupo BTEX, via Cromatografia a Gás/SPME (Micro Extração Em Fase Sólida). *Faculdade de Saúde Pública da Universidade de São Paulo*. **2021**. <https://doi.org/10.11606/T.6.2004.TDE-11022021-000629>.

7. ANEXOS

Tabela 13.2 – Chemical Engineering Design

Table 13.2. Typical Maximum Allowable Stresses for Plates Under ASME BPV Code Sec. VIII D.1 (The Appropriate Material Standards Should be Consulted for Particular Grades and Plate Thicknesses)

Material	Grade	Min Tensile Strength (ksi)	Min Yield Strength (ksi)	Maximum Temperature (°F)	Maximum Allowable Stress at Temperature °F (ksi = 1000 psi)				
					100	300	500	700	900
Carbon steel	A285 Gr A	45	24	900	12.9	12.9	12.9	11.5	5.9
Killed carbon steel	A515 Gr 60	60	32	1000	17.1	17.1	17.1	14.3	5.9
Low alloy steel	A387 Gr 22	60	30	1200	17.1	16.6	16.6	16.6	13.6
1/4 Cr, 1/2 Mo, Si	410	65	30	1200	18.6	17.8	17.2	16.2	12.3
Stainless steel 13 Cr	304	75	30	1500	20.0	15.0	12.9	11.7	10.8
Stainless steel 18 Cr, 8 Ni	347	75	30	1500	20.0	17.1	15.0	13.8	13.4
Stainless steel 18 Cr, 10 Ni, Cb	321	75	30	1500	20.0	16.5	14.3	13.0	12.3
Stainless steel 18 Cr, 10 Ni, Ti	316	75	30	1500	20.0	15.6	13.3	12.1	11.5
Stainless steel 16 Cr, 12 Ni, 2 Mo									

Note:

1. The stress values for type 304 stainless steel are not the same as those given for stainless steel 304L in Table 7.8 of this book.


2. 1 ksi = 1000 psi = 6.8948 N/mm²


Tabela 6.11 – Chemical Engineering Design

Interest rate, <i>i</i>	ACCR: 10 year life	ACCR: 20 year life
0.1	0.163	0.117
0.12	0.177	0.134
0.15	0.199	0.16
0.2	0.239	0.205
0.25	0.280	0.253
0.3	0.323	0.302

Tabela 7.2 – Chemical Engineering Design

Equipment	Units for Size, <i>S</i>	<i>S_{lower}</i>	<i>S_{upper}</i>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>n</i>	Note
Vertical, 304 ss	shell mass, kg	120	250,000	17,400	79	0.85	4
Horizontal, 304 ss	shell mass, kg	120	50,000	12,800	73	0.85	4

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA		Case Name:	simulacao46pratos_TCC.hsc				
2			Unit Set:	SI				
3			Date/Time:	Mon Feb 13 19:26:44 2023				
4			Material Stream: 1				Fluid Package:	Basis-1
5							Property Package:	Peng-Robinson
6	CONDITIONS							
7		Overall	Liquid Phase					
8	Vapour / Phase Fraction	0.0000	1.0000					
9	Temperature: (C)	145.4 *	145.4					
10	Pressure: (kPa)	190.0 *	190.0					
11	Molar Flow (kgmole/h)	101.2 *	101.2					
12	Mass Flow (kg/h)	1.102e+004	1.102e+004					
13	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	12.68	12.68					
14	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	7432	7432					
15	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	-3.651	-3.651					
16	Heat Flow (kJ/h)	7.518e+005	7.518e+005					
17	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	12.65 *	12.65					
18	PROPERTIES							
19		Overall	Liquid Phase					
20	Molecular Weight	109.0	109.0					
21	Molar Density (kgmole/m3)	6.894	6.894					
22	Mass Density (kg/m3)	751.4	751.4					
23	Act. Volume Flow (m3/h)	14.67	14.67					
24	Mass Enthalpy (kJ/kg)	68.19	68.19					
25	Mass Entropy (kJ/kg-C)	-3.350e-002	-3.350e-002					
26	Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	233.3	233.3					
27	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	2.140	2.140					
28	LHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---					
29	HHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---					
30	HHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---					
31	CO2 Loading	---	---					
32	CO2 Apparent Mole Conc. (kgmole/m3)	---	---					
33	CO2 Apparent Wt. Conc. (kgmol/kg)	---	---					
34	LHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---					
35	Phase Fraction [Vol. Basis]	0.0000	1.000					
36	Phase Fraction [Mass Basis]	0.0000	1.000					
37	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0.0000	1.000					
38	Mass Exergy (kJ/kg)	37.80	---					
39	Partial Pressure of CO2 (kPa)	0.0000	---					
40	Cost Based on Flow (Cost/s)	0.0000	0.0000					
41	Act. Gas Flow (ACT_m3/h)	---	---					
42	Avg. Liq. Density (kgmole/m3)	7.977	7.977					
43	Specific Heat (kJ/kgmole-C)	233.3	233.3					
44	Std. Gas Flow (STD_m3/h)	2392	2392					
45	Std. Ideal Liq. Mass Density (kg/m3)	869.4	869.4					
46	Act. Liq. Flow (m3/s)	4.075e-003	4.075e-003					
47	Z Factor	7.919e-003	7.919e-003					
48	Watson K	10.41	10.41					
49	User Property	---	---					
50	Partial Pressure of H2S (kPa)	0.0000	---					
51	Cp/(Cp - R)	1.037	1.037					
52	Cp/Cv	1.272	1.272					
53	Ideal Gas Cp/Cv	1.047	1.047					
54	Ideal Gas Cp (kJ/kgmole-C)	183.6	183.6					
55	Mass Ideal Gas Cp (kJ/kg-C)	1.684	1.684					
56	Heat of Vap. (kJ/kgmole)	3.576e+004	---					
57	Kinematic Viscosity (cSt)	0.2757	0.2757					
58	Liq. Mass Density (Std. Cond) (kg/m3)	871.6	871.6					
59	Liq. Vol. Flow (Std. Cond) (m3/h)	12.65	12.65					
60	Liquid Fraction	1.000	1.000					
61	Molar Volume (m3/kgmole)	0.1450	0.1450					
62	Mass Heat of Vap. (kJ/kg)	328.1	---					
63	Phase Fraction [Molar Basis]	0.0000	1.0000					

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: simulacao46pratos_TCC.hsc
2		Unit Set: SI
3		Date/Time: Mon Feb 13 19:26:44 2023
4		
5		

Material Stream: 1 (continued)

Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

PROPERTIES

		Overall	Liquid Phase		
12	Surface Tension (dyne/cm)	16.03	16.03		
13	Thermal Conductivity (W/m-K)	0.1105	0.1105		
14	Bubble Point Pressure (kPa)	120.4	---		
15	Viscosity (cP)	0.2071	0.2071		
16	Cv (Semi-Ideal) (kJ/kgmole-C)	225.0	225.0		
17	Mass Cv (Semi-Ideal) (kJ/kg-C)	2.064	2.064		
18	Cv (kJ/kgmole-C)	183.4	183.4		
19	Mass Cv (kJ/kg-C)	1.683	1.683		
20	Cv (Ent. Method) (kJ/kgmole-C)	183.0	183.0		
21	Mass Cv (Ent. Method) (kJ/kg-C)	1.679	1.679		
22	Cp/Cv (Ent. Method)	1.275	1.275		
23	Reid VP at 37.8 C (kPa)	2.545	2.545		
24	True VP at 37.8 C (kPa)	2.545	2.545		
25	Liq. Vol. Flow - Sum(Std. Cond) (m3/h)	12.65	12.65		
26	Viscosity Index	-27.08	---		

COMPOSITION

Overall Phase Vapour Fraction 0.0000

COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
33	Benzene 0.1699 *	0.0017 *	13.2734 *	0.0012 *	0.0150 *	0.0012 *
34	E-Benzene 90.6304 *	0.8960 *	9621.8671 *	0.8728 *	11.0592 *	0.8721 *
35	14-EBenzene 10.3497 *	0.1023 *	1389.1531 *	0.1260 *	1.6064 *	0.1267 *
36	Total 101.1500	1.0000	11024.2936	1.0000	12.6807	1.0000

Liquid Phase Phase Fraction 1.000

COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
41	Benzene 0.1699	0.0017	13.2734	0.0012	0.0150	0.0012
42	E-Benzene 90.6304	0.8960	9621.8671	0.8728	11.0592	0.8721
43	14-EBenzene 10.3497	0.1023	1389.1531	0.1260	1.6064	0.1267
44	Total 101.1500	1.0000	11024.2936	1.0000	12.6807	1.0000

Material Stream: 2


Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

CONDITIONS

		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	
51	Vapour / Phase Fraction	0.0320 *	0.0320	0.9680	
52	Temperature: (C)	147.0	147.0	147.0	
53	Pressure: (kPa)	125.0 *	125.0	125.0	
54	Molar Flow (kgmole/h)	101.2	3.237	97.91	
55	Mass Flow (kg/h)	1.102e+004	346.1	1.068e+004	
56	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	12.68	0.3979	12.28	
57	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	8925	4.697e+004	7668	
58	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	-7.228e-002	73.90	-2.518	
59	Heat Flow (kJ/h)	9.028e+005	1.520e+005	7.508e+005	
60	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	12.65 *	0.3969	12.25	

PROPERTIES

		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	
64	Molecular Weight	109.0	106.9	109.1	
65	Molar Density (kgmole/m3)	1.003	3.738e-002	6.874	
66	Mass Density (kg/m3)	109.3	3.997	749.7	
67	Act. Volume Flow (m3/h)	100.8	86.59	14.24	
68	Mass Enthalpy (kJ/kg)	81.89	439.2	70.31	

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name:	simulacao46pratos_TCC.hsc
2		Unit Set:	SI
3		Date/Time:	Mon Feb 13 19:26:44 2023
4			
5			


Material Stream: 2 (continued)

Fluid Package: Basis-1

Property Package: Peng-Robinson

PROPERTIES

		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	
12	Mass Entropy (kJ/kg-C)	-6.631e-004	0.6911	-2.308e-002	
13	Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	232.6	181.5	234.3	
14	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	2.134	1.698	2.148	
15	LHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---	---	
16	HHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---	---	
17	HHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---	---	
18	CO2 Loading	---	---	---	
19	CO2 Apparent Mole Conc. (kgmole/m3)	---	---	---	
20	CO2 Apparent Wt. Conc. (kgmol/kg)	---	---	---	
21	LHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---	---	
22	Phase Fraction [Vol. Basis]	3.138e-002	3.138e-002	0.9686	
23	Phase Fraction [Mass Basis]	3.139e-002	3.139e-002	0.9686	
24	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0.8587	0.8587	0.1413	
25	Mass Exergy (kJ/kg)	41.72	---	---	
26	Partial Pressure of CO2 (kPa)	0.0000	---	---	
27	Cost Based on Flow (Cost/s)	0.0000	0.0000	0.0000	
28	Act. Gas Flow (ACT_m3/h)	86.59	86.59	---	
29	Avg. Liq. Density (kgmole/m3)	7.977	8.135	7.972	
30	Specific Heat (kJ/kgmole-C)	232.6	181.5	234.3	
31	Std. Gas Flow (STD_m3/h)	2392	76.53	2315	
32	Std. Ideal Liq. Mass Density (kg/m3)	869.4	869.9	869.4	
33	Act. Liq. Flow (m3/s)	3.956e-003	---	3.956e-003	
34	Z Factor	---	0.9573	5.206e-003	
35	Watson K	10.41	10.37	10.41	
36	User Property	---	---	---	
37	Partial Pressure of H2S (kPa)	0.0000	---	---	
38	Cp/(Cp - R)	1.037	1.048	1.037	
39	Cp/Cv	1.002	1.056	1.037	
40	Ideal Gas Cp/Cv	1.047	1.048	1.047	
41	Ideal Gas Cp (kJ/kgmole-C)	184.2	180.0	184.3	
42	Mass Ideal Gas Cp (kJ/kg-C)	1.690	1.683	1.690	
43	Heat of Vap. (kJ/kgmole)	3.686e+004	---	---	
44	Kinematic Viscosity (cSt)	---	2.066	0.2735	
45	Liq. Mass Density (Std. Cond) (kg/m3)	871.6	872.1	871.5	
46	Liq. Vol. Flow (Std. Cond) (m3/h)	12.65	0.3969	12.25	
47	Liquid Fraction	0.9680	0.0000	1.000	
48	Molar Volume (m3/kgmole)	0.9969	26.75	0.1455	
49	Mass Heat of Vap. (kJ/kg)	338.2	---	---	
50	Phase Fraction [Molar Basis]	0.0320	0.0320	0.9680	
51	Surface Tension (dyne/cm)	15.88	---	15.88	
52	Thermal Conductivity (W/m-K)	---	1.982e-002	0.1101	
53	Bubble Point Pressure (kPa)	125.3	---	---	
54	Viscosity (cP)	---	8.259e-003	0.2050	
55	Cv (Semi-Ideal) (kJ/kgmole-C)	224.2	173.2	225.9	
56	Mass Cv (Semi-Ideal) (kJ/kg-C)	2.058	1.620	2.072	
57	Cv (kJ/kgmole-C)	232.2	171.9	225.9	
58	Mass Cv (kJ/kg-C)	2.130	1.607	2.072	
59	Cv (Ent. Method) (kJ/kgmole-C)	---	---	---	
60	Mass Cv (Ent. Method) (kJ/kg-C)	---	---	---	
61	Cp/Cv (Ent. Method)	---	---	---	
62	Reid VP at 37.8 C (kPa)	2.545	2.806	2.536	
63	True VP at 37.8 C (kPa)	2.545	2.806	2.536	
64	Liq. Vol. Flow - Sum(Std. Cond) (m3/h)	12.65	0.3969	12.25	
65	Viscosity Index	-27.56	---	---	

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: simulacao46pratos_TCC.hsc
2		Unit Set: SI
3		Date/Time: Mon Feb 13 19:26:44 2023
4		
5		

Material Stream: 2 (continued)

Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

COMPOSITION

Overall Phase Vapour Fraction 0.0320 *

13	COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
15	Benzene	0.1699	0.0017	13.2734	0.0012	0.0150	0.0012
16	E-Benzene	90.6304	0.8960	9621.8671	0.8728	11.0592	0.8721
17	14-EBenzene	10.3497	0.1023	1389.1531	0.1260	1.6064	0.1267
18	Total	101.1500	1.0000	11024.2936	1.0000	12.6807	1.0000

Vapour Phase Phase Fraction 3.200e-002

21	COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
23	Benzene	0.0202	0.0062	1.5744	0.0045	0.0018	0.0045
24	E-Benzene	3.1086	0.9604	330.0226	0.9535	0.3793	0.9533
25	14-EBenzene	0.1081	0.0334	14.5083	0.0419	0.0168	0.0422
26	Total	3.2368	1.0000	346.1052	1.0000	0.3979	1.0000

Liquid Phase Phase Fraction 0.9680

29	COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
31	Benzene	0.1498	0.0015	11.6990	0.0011	0.0133	0.0011
32	E-Benzene	87.5218	0.8939	9291.8445	0.8702	10.6799	0.8695
33	14-EBenzene	10.2416	0.1046	1374.6449	0.1287	1.5896	0.1294
34	Total	97.9132	1.0000	10678.1884	1.0000	12.2828	1.0000

Material Stream: 10


Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

CONDITIONS

40		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	
41	Vapour / Phase Fraction	0.0000	0.0000	1.0000	
42	Temperature: (C)	191.3	191.3	191.3	
43	Pressure: (kPa)	140.0	140.0	140.0	
44	Molar Flow (kgmole/h)	11.25	2.609e-005	11.25	
45	Mass Flow (kg/h)	1485	3.357e-003	1485	
46	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	1.716	3.878e-006	1.716	
47	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-2.327e+004	2.128e+004	-2.327e+004	
48	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	95.11	169.9	95.11	
49	Heat Flow (kJ/h)	-2.618e+005	0.5551	-2.618e+005	
50	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	1.715 *	3.873e-006	1.715	

PROPERTIES

53		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	
54	Molecular Weight	132.0	128.7	132.0	
55	Molar Density (kgmole/m3)	5.383	3.829e-002	5.384	
56	Mass Density (kg/m3)	710.3	4.927	710.6	
57	Act. Volume Flow (m3/h)	2.090	6.813e-004	2.090	
58	Mass Enthalpy (kJ/kg)	-176.3	165.4	-176.3	
59	Mass Entropy (kJ/kg-C)	0.7207	1.321	0.7207	
60	Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	312.6	247.7	312.6	
61	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	2.369	1.925	2.369	
62	LHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---	---	
63	HHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---	---	
64	HHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---	---	
65	CO2 Loading	---	---	---	
66	CO2 Apparent Mole Conc. (kgmole/m3)	---	---	---	
67	CO2 Apparent Wt. Conc. (kgmol/kg)	---	---	---	
68	LHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---	---	

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: simulacao46pratos_TCC.hsc
2		Unit Set: SI
3		Date/Time: Mon Feb 13 19:26:44 2023
4		
5		

Material Stream: 10 (continued)

Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

PROPERTIES


	Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	
12	Phase Fraction [Vol. Basis]	2.259e-006	2.259e-006	1.000
13	Phase Fraction [Mass Basis]	2.261e-006	2.261e-006	1.000
14	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	3.259e-004	3.259e-004	0.9997
15	Mass Exergy (kJ/kg)	71.78	---	---
16	Partial Pressure of CO2 (kPa)	0.0000	---	---
17	Cost Based on Flow (Cost/s)	0.0000	0.0000	0.0000
18	Act. Gas Flow (ACT_m3/h)	6.813e-004	6.813e-004	---
19	Avg. Liq. Density (kgmole/m3)	6.555	6.727	6.555
20	Specific Heat (kJ/kgmole-C)	312.6	247.7	312.6
21	Std. Gas Flow (STD_m3/h)	266.0	6.168e-004	266.0
22	Std. Ideal Liq. Mass Density (kg/m3)	865.1	865.6	865.1
23	Act. Liq. Flow (m3/s)	5.805e-004	---	5.805e-004
24	Z Factor	---	0.9470	6.734e-003
25	Watson K	10.78	10.73	10.78
26	User Property	---	---	---
27	Partial Pressure of H2S (kPa)	0.0000	---	---
28	Cp/(Cp - R)	1.027	1.035	1.027
29	Cp/Cv	1.288	1.043	1.027
30	Ideal Gas Cp/Cv	1.034	1.035	1.034
31	Ideal Gas Cp (kJ/kgmole-C)	253.0	245.6	253.0
32	Mass Ideal Gas Cp (kJ/kg-C)	1.917	1.908	1.917
33	Heat of Vap. (kJ/kgmole)	4.037e+004	---	---
34	Kinematic Viscosity (cSt)	---	1.649	0.2945
35	Liq. Mass Density (Std. Cond) (kg/m3)	865.8	866.7	865.8
36	Liq. Vol. Flow (Std. Cond) (m3/h)	1.715	3.873e-006	1.715
37	Liquid Fraction	1.000	0.0000	1.000
38	Molar Volume (m3/kgmole)	0.1858	26.12	0.1857
39	Mass Heat of Vap. (kJ/kg)	305.9	---	---
40	Phase Fraction [Molar Basis]	0.0000	0.0000	1.0000
41	Surface Tension (dyne/cm)	13.23	---	13.23
42	Thermal Conductivity (W/m-K)	0.1052	2.270e-002	0.1052
43	Bubble Point Pressure (kPa)	140.0	---	---
44	Viscosity (cP)	0.2093	8.123e-003	0.2093
45	Cv (Semi-Ideal) (kJ/kgmole-C)	304.3	239.4	304.3
46	Mass Cv (Semi-Ideal) (kJ/kg-C)	2.306	1.860	2.306
47	Cv (kJ/kgmole-C)	242.7	237.5	304.3
48	Mass Cv (kJ/kg-C)	1.839	1.846	2.306
49	Cv (Ent. Method) (kJ/kgmole-C)	---	---	---
50	Mass Cv (Ent. Method) (kJ/kg-C)	---	---	---
51	Cp/Cv (Ent. Method)	---	---	---
52	Reid VP at 37.8 C (kPa)	0.5429	0.8334	0.5429
53	True VP at 37.8 C (kPa)	0.5429	0.8336	0.5429
54	Liq. Vol. Flow - Sum(Std. Cond) (m3/h)	1.715	3.873e-006	1.715
55	Viscosity Index	-23.97	---	---

COMPOSITION

Overall Phase

Vapour Fraction 0.0000

COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
62	Benzene	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
63	E-Benzene	0.9036	0.0803	95.9279	0.0646	0.1103
64	14-E-Benzene	10.3485	0.9197	1388.9961	0.9354	1.6062
65	Total	11.2521	1.0000	1484.9240	1.0000	1.7165

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: simulacao46pratos_TCC.hsc
2		Unit Set: SI
3		Date/Time: Mon Feb 13 19:26:44 2023
4		
5		

Material Stream: 10 (continued)

Fluid Package: Basis-1

Property Package: Peng-Robinson

COMPOSITION

Vapour Phase

Phase Fraction 2.318e-006

13	COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
15	Benzene	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
16	E-Benzene	0.0000	0.1973	0.0005	0.1628	0.0000	0.1620
17	14-EBenzene	0.0000	0.8027	0.0028	0.8372	0.0000	0.8380
18	Total	0.0000	1.0000	0.0034	1.0000	0.0000	1.0000

Liquid Phase

Phase Fraction 1.000

21	COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
23	Benzene	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
24	E-Benzene	0.9036	0.0803	95.9274	0.0646	0.1103	0.0642
25	14-EBenzene	10.3485	0.9197	1388.9933	0.9354	1.6062	0.9358
26	Total	11.2520	1.0000	1484.9207	1.0000	1.7165	1.0000

Material Stream: 11

Fluid Package: Basis-1


Property Package: Peng-Robinson

CONDITIONS

32		Overall	Liquid Phase
33	Vapour / Phase Fraction	0.0000	1.0000
34	Temperature: (C)	192.3	192.3
35	Pressure: (kPa)	2000 *	2000
36	Molar Flow (kgmole/h)	11.25	11.25
37	Mass Flow (kg/h)	1485	1485
38	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	1.716	1.716
39	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-2.280e+004	-2.280e+004
40	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	95.33	95.33
41	Heat Flow (kJ/h)	-2.566e+005	-2.566e+005
42	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	1.715 *	1.715

PROPERTIES

45		Overall	Liquid Phase
46	Molecular Weight	132.0	132.0
47	Molar Density (kgmole/m3)	5.405	5.405
48	Mass Density (kg/m3)	713.3	713.3
49	Act. Volume Flow (m3/h)	2.082	2.082
50	Mass Enthalpy (kJ/kg)	-172.8	-172.8
51	Mass Entropy (kJ/kg-C)	0.7223	0.7223
52	Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	311.5	311.5
53	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	2.360	2.360
54	LHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---
55	HHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---
56	HHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---
57	CO2 Loading	---	---
58	CO2 Apparent Mole Conc. (kgmole/m3)	---	---
59	CO2 Apparent Wt. Conc. (kgmol/kg)	---	---
60	LHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---
61	Phase Fraction [Vol. Basis]	0.0000	1.000
62	Phase Fraction [Mass Basis]	0.0000	1.000
63	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0.0000	1.000
64	Mass Exergy (kJ/kg)	74.78	---
65	Partial Pressure of CO2 (kPa)	0.0000	---
66	Cost Based on Flow (Cost/s)	0.0000	0.0000
67	Act. Gas Flow (ACT_m3/h)	---	---
68	Avg. Liq. Density (kgmole/m3)	6.555	6.555

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: simulacao46pratos_TCC.hsc
2		Unit Set: SI
3		Date/Time: Mon Feb 13 19:26:44 2023
4		
5		

Material Stream: 11 (continued)

Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

PROPERTIES

	Overall	Liquid Phase		
12	Specific Heat (kJ/kgmole-C)	311.5	311.5	
13	Std. Gas Flow (STD_m3/h)	266.0	266.0	
14	Std. Ideal Liq. Mass Density (kg/m3)	865.1	865.1	
15	Act. Liq. Flow (m3/s)	5.783e-004	5.783e-004	
16	Z Factor	9.561e-002	9.561e-002	
17	Watson K	10.78	10.78	
18	User Property	---	---	
19	Partial Pressure of H2S (kPa)	0.0000	---	
20	Cp/(Cp - R)	1.027	1.027	
21	Cp/Cv	1.231	1.231	
22	Ideal Gas Cp/Cv	1.034	1.034	
23	Ideal Gas Cp (kJ/kgmole-C)	253.6	253.6	
24	Mass Ideal Gas Cp (kJ/kg-C)	1.921	1.921	
25	Heat of Vap. (kJ/kgmole)	1.877e+004	---	
26	Kinematic Viscosity (cSt)	0.2922	0.2922	
27	Liq. Mass Density (Std. Cond) (kg/m3)	865.8	865.8	
28	Liq. Vol. Flow (Std. Cond) (m3/h)	1.715	1.715	
29	Liquid Fraction	1.000	1.000	
30	Molar Volume (m3/kgmole)	0.1850	0.1850	
31	Mass Heat of Vap. (kJ/kg)	142.3	---	
32	Phase Fraction [Molar Basis]	0.0000	1.0000	
33	Surface Tension (dyne/cm)	13.14	13.14	
34	Thermal Conductivity (W/m-K)	0.1049	0.1049	
35	Bubble Point Pressure (kPa)	143.5	---	
36	Viscosity (cP)	0.2084	0.2084	
37	Cv (Semi-Ideal) (kJ/kgmole-C)	303.2	303.2	
38	Mass Cv (Semi-Ideal) (kJ/kg-C)	2.297	2.297	
39	Cv (kJ/kgmole-C)	253.1	253.1	
40	Mass Cv (kJ/kg-C)	1.918	1.918	
41	Cv (Ent. Method) (kJ/kgmole-C)	251.7	251.7	
42	Mass Cv (Ent. Method) (kJ/kg-C)	1.907	1.907	
43	Cp/Cv (Ent. Method)	1.238	1.238	
44	Reid VP at 37.8 C (kPa)	0.5429	0.5429	
45	True VP at 37.8 C (kPa)	0.5429	0.5429	
46	Liq. Vol. Flow - Sum(Std. Cond) (m3/h)	1.715	1.715	
47	Viscosity Index	-24.31	---	

COMPOSITION


Overall Phase Vapour Fraction 0.0000


COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
54	Benzene	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
55	E-Benzene	0.9036	0.0803	95.9279	0.0646	0.0642
56	14-EBenzene	10.3485	0.9197	1388.9961	0.9354	0.9358
57	Total	11.2521	1.0000	1484.9240	1.0000	1.7165

Liquid Phase

Phase Fraction 1.000

COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
62	Benzene	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
63	E-Benzene	0.9036	0.0803	95.9279	0.0646	0.0642
64	14-EBenzene	10.3485	0.9197	1388.9961	0.9354	0.9358
65	Total	11.2521	1.0000	1484.9240	1.0000	1.7165

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA		Case Name:	simulacao46pratos_TCC.hsc			
2			Unit Set:	SI			
3			Date/Time:	Mon Feb 13 19:26:44 2023			
4			Material Stream: 12		Fluid Package:	Basis-1	
5					Property Package:	Peng-Robinson	
6	CONDITIONS						
7		Overall	Liquid Phase				
8	Vapour / Phase Fraction	0.0000	1.0000				
9	Temperature: (C)	147.3	147.3				
10	Pressure: (kPa)	1935	1935				
11	Molar Flow (kgmole/h)	11.25	11.25				
12	Mass Flow (kg/h)	1485	1485				
13	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	1.716	1.716				
14	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-3.623e+004	-3.623e+004				
15	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	65.05	65.05				
16	Heat Flow (kJ/h)	-4.077e+005	-4.077e+005				
17	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	1.715 *	1.715				
18	PROPERTIES						
19		Overall	Liquid Phase				
20	Molecular Weight	132.0	132.0				
21	Molar Density (kgmole/m3)	5.726	5.726				
22	Mass Density (kg/m3)	755.6	755.6				
23	Act. Volume Flow (m3/h)	1.965	1.965				
24	Mass Enthalpy (kJ/kg)	-274.5	-274.5				
25	Mass Entropy (kJ/kg-C)	0.4929	0.4929				
26	Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	285.2	285.2				
27	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	2.161	2.161				
28	LHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---				
29	HHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---				
30	HHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---				
31	CO2 Loading	---	---				
32	CO2 Apparent Mole Conc. (kgmole/m3)	---	---				
33	CO2 Apparent Wt. Conc. (kgmol/kg)	---	---				
34	LHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---				
35	Phase Fraction [Vol. Basis]	0.0000	1.000				
36	Phase Fraction [Mass Basis]	0.0000	1.000				
37	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0.0000	1.000				
38	Mass Exergy (kJ/kg)	41.46	---				
39	Partial Pressure of CO2 (kPa)	0.0000	---				
40	Cost Based on Flow (Cost/s)	0.0000	0.0000				
41	Act. Gas Flow (ACT_m3/h)	---	---				
42	Avg. Liq. Density (kgmole/m3)	6.555	6.555				
43	Specific Heat (kJ/kgmole-C)	285.2	285.2				
44	Std. Gas Flow (STD_m3/h)	266.0	266.0				
45	Std. Ideal Liq. Mass Density (kg/m3)	865.1	865.1				
46	Act. Liq. Flow (m3/s)	5.459e-004	5.459e-004				
47	Z Factor	9.666e-002	9.666e-002				
48	Watson K	10.78	10.78				
49	User Property	---	---				
50	Partial Pressure of H2S (kPa)	0.0000	---				
51	Cp/(Cp - R)	1.030	1.030				
52	Cp/Cv	1.238	1.238				
53	Ideal Gas Cp/Cv	1.037	1.037				
54	Ideal Gas Cp (kJ/kgmole-C)	231.0	231.0				
55	Mass Ideal Gas Cp (kJ/kg-C)	1.750	1.750				
56	Heat of Vap. (kJ/kgmole)	1.952e+004	---				
57	Kinematic Viscosity (cSt)	0.3843	0.3843				
58	Liq. Mass Density (Std. Cond) (kg/m3)	865.8	865.8				
59	Liq. Vol. Flow (Std. Cond) (m3/h)	1.715	1.715				
60	Liquid Fraction	1.000	1.000				
61	Molar Volume (m3/kgmole)	0.1747	0.1747				
62	Mass Heat of Vap. (kJ/kg)	147.9	---				
63	Phase Fraction [Molar Basis]	0.0000	1.0000				
64	Aspen Technology Inc. Aspen HYSYS Version 11 Page 8 of 18						

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: simulacao46pratos_TCC.hsc
2		Unit Set: SI
3		Date/Time: Mon Feb 13 19:26:44 2023
4		
5		

Material Stream: 12 (continued)

Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

PROPERTIES

		Overall	Liquid Phase		
12	Surface Tension (dyne/cm)	17.06	17.06		
13	Thermal Conductivity (W/m-K)	0.1157	0.1157		
14	Bubble Point Pressure (kPa)	45.52	---		
15	Viscosity (cP)	0.2904	0.2904		
16	Cv (Semi-Ideal) (kJ/kgmole-C)	276.9	276.9		
17	Mass Cv (Semi-Ideal) (kJ/kg-C)	2.098	2.098		
18	Cv (kJ/kgmole-C)	230.4	230.4		
19	Mass Cv (kJ/kg-C)	1.746	1.746		
20	Cv (Ent. Method) (kJ/kgmole-C)	234.9	234.9		
21	Mass Cv (Ent. Method) (kJ/kg-C)	1.780	1.780		
22	Cp/Cv (Ent. Method)	1.214	1.214		
23	Reid VP at 37.8 C (kPa)	0.5429	0.5429		
24	True VP at 37.8 C (kPa)	0.5429	0.5429		
25	Liq. Vol. Flow - Sum(Std. Cond) (m3/h)	1.715	1.715		
26	Viscosity Index	-14.85	---		

COMPOSITION

Overall Phase Vapour Fraction 0.0000

COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
33	Benzene	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
34	E-Benzene	0.9036	0.0803	95.9279	0.0646	0.0642
35	14-EBenzene	10.3485	0.9197	1388.9961	0.9354	0.9358
36	Total	11.2521	1.0000	1484.9240	1.0000	1.7165

Liquid Phase Phase Fraction 1.000

COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
41	Benzene	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
42	E-Benzene	0.9036	0.0803	95.9279	0.0646	0.0642
43	14-EBenzene	10.3485	0.9197	1388.9961	0.9354	0.9358
44	Total	11.2521	1.0000	1484.9240	1.0000	1.7165

Material Stream: 13


Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

CONDITIONS

		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	
51	Vapour / Phase Fraction	0.0000	0.0000	1.0000	
52	Temperature: (C)	138.9	138.9	138.9	
53	Pressure: (kPa)	110.0	110.0	110.0	
54	Molar Flow (kgmole/h)	89.90	2.354e-004	89.90	
55	Mass Flow (kg/h)	9539	2.494e-002	9539	
56	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	10.96	2.867e-005	10.96	
57	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	1.148e+004	4.718e+004	1.148e+004	
58	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	-18.51	67.24	-18.51	
59	Heat Flow (kJ/h)	1.032e+006	11.11	1.032e+006	
60	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	10.94 *	2.859e-005	10.94	

PROPERTIES

		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	
64	Molecular Weight	106.1	106.0	106.1	
65	Molar Density (kgmole/m3)	7.133	3.341e-002	7.137	
66	Mass Density (kg/m3)	756.9	3.540	757.3	
67	Act. Volume Flow (m3/h)	12.60	7.047e-003	12.60	
68	Mass Enthalpy (kJ/kg)	108.2	445.3	108.2	

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name:	simulacao46pratos_TCC.hsc
2		Unit Set:	SI
3		Date/Time:	Mon Feb 13 19:26:44 2023
4			
5			


Material Stream: 13 (continued)

Fluid Package: Basis-1

Property Package: Peng-Robinson

PROPERTIES

		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	
12	Mass Entropy (kJ/kg-C)	-0.1744	0.6346	-0.1744	
13	Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	223.8	176.4	223.8	
14	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	2.109	1.665	2.109	
15	LHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---	---	
16	HHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---	---	
17	HHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---	---	
18	CO2 Loading	---	---	---	
19	CO2 Apparent Mole Conc. (kgmole/m3)	---	---	---	
20	CO2 Apparent Wt. Conc. (kgmol/kg)	---	---	---	
21	LHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---	---	
22	Phase Fraction [Vol. Basis]	2.615e-006	2.615e-006	1.000	
23	Phase Fraction [Mass Basis]	2.615e-006	2.615e-006	1.000	
24	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	5.591e-004	5.591e-004	0.9994	
25	Mass Exergy (kJ/kg)	33.74	---	---	
26	Partial Pressure of CO2 (kPa)	0.0000	---	---	
27	Cost Based on Flow (Cost/s)	0.0000	0.0000	0.0000	
28	Act. Gas Flow (ACT_m3/h)	7.047e-003	7.047e-003	---	
29	Avg. Liq. Density (kgmole/m3)	8.199	8.212	8.199	
30	Specific Heat (kJ/kgmole-C)	223.8	176.4	223.8	
31	Std. Gas Flow (STD_m3/h)	2126	5.566e-003	2126	
32	Std. Ideal Liq. Mass Density (kg/m3)	870.0	870.1	870.0	
33	Act. Liq. Flow (m3/s)	3.499e-003	---	3.499e-003	
34	Z Factor	---	0.9612	4.499e-003	
35	Watson K	10.36	10.36	10.36	
36	User Property	---	---	---	
37	Partial Pressure of H2S (kPa)	0.0000	---	---	
38	Cp/(Cp - R)	1.039	1.049	1.039	
39	Cp/Cv	1.067	1.057	1.278	
40	Ideal Gas Cp/Cv	1.050	1.050	1.050	
41	Ideal Gas Cp (kJ/kgmole-C)	175.3	175.0	175.3	
42	Mass Ideal Gas Cp (kJ/kg-C)	1.652	1.652	1.652	
43	Heat of Vap. (kJ/kgmole)	3.547e+004	---	---	
44	Kinematic Viscosity (cSt)	---	2.293	0.2711	
45	Liq. Mass Density (Std. Cond) (kg/m3)	872.2	872.3	872.2	
46	Liq. Vol. Flow (Std. Cond) (m3/h)	10.94	2.859e-005	10.94	
47	Liquid Fraction	1.000	0.0000	1.000	
48	Molar Volume (m3/kgmole)	0.1402	29.93	0.1401	
49	Mass Heat of Vap. (kJ/kg)	334.3	---	---	
50	Phase Fraction [Molar Basis]	0.0000	0.0000	1.0000	
51	Surface Tension (dyne/cm)	16.52	---	16.52	
52	Thermal Conductivity (W/m-K)	0.1114	1.911e-002	0.1114	
53	Bubble Point Pressure (kPa)	110.0	---	---	
54	Viscosity (cP)	0.2053	8.117e-003	0.2053	
55	Cv (Semi-Ideal) (kJ/kgmole-C)	215.5	168.1	215.5	
56	Mass Cv (Semi-Ideal) (kJ/kg-C)	2.031	1.586	2.031	
57	Cv (kJ/kgmole-C)	209.7	166.9	175.1	
58	Mass Cv (kJ/kg-C)	1.976	1.575	1.650	
59	Cv (Ent. Method) (kJ/kgmole-C)	---	---	---	
60	Mass Cv (Ent. Method) (kJ/kg-C)	---	---	---	
61	Cp/Cv (Ent. Method)	---	---	---	
62	Reid VP at 37.8 C (kPa)	2.790	2.909	2.790	
63	True VP at 37.8 C (kPa)	2.793	2.911	2.793	
64	Liq. Vol. Flow - Sum(Std. Cond) (m3/h)	10.94	2.859e-005	10.94	
65	Viscosity Index	-27.96	---	---	

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: simulacao46pratos_TCC.hsc
2		Unit Set: SI
3		Date/Time: Mon Feb 13 19:26:44 2023
4		
5		

6	Material Stream: 13 (continued)	Fluid Package: Basis-1
7		Property Package: Peng-Robinson

COMPOSITION

9	Overall Phase						Vapour Fraction	0.0000
10								
11								
12								
13	COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION	
14								
15	Benzene	0.1699	0.0019	13.2734	0.0014	0.0150	0.0014	
16	E-Benzene	89.7268	0.9981	9525.9392	0.9986	10.9489	0.9986	
17	14-EBenzene	0.0012	0.0000	0.1570	0.0000	0.0002	0.0000	
18	Total	89.8979	1.0000	9539.3696	1.0000	10.9642	1.0000	

Vapour Phase Phase Fraction 2.619e-006

21	COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
22							
23	Benzene	0.0000	0.0074	0.0001	0.0055	0.0000	0.0054
24	E-Benzene	0.0002	0.9926	0.0248	0.9945	0.0000	0.9946
25	14-EBenzene	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
26	Total	0.0002	1.0000	0.0249	1.0000	0.0000	1.0000

Liquid Phase Phase Fraction 1.000

29	COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
30							
31	Benzene	0.1699	0.0019	13.2733	0.0014	0.0150	0.0014
32	E-Benzene	89.7266	0.9981	9525.9144	0.9986	10.9489	0.9986
33	14-EBenzene	0.0012	0.0000	0.1570	0.0000	0.0002	0.0000
34	Total	89.8977	1.0000	9539.3446	1.0000	10.9641	1.0000

35	Energy Stream: E condenser	Fluid Package: Basis-1
36		Property Package: Peng-Robinson

CONDITIONS

40	Duty Type: Direct Q	Duty Calculation Operation: Condenser @COL1	
41	Duty SP: 5.369e+006 kJ/h	Minimum Available Duty: ---	Maximum Available Duty: ---

42	Energy Stream: E P-2	Fluid Package: Basis-1
43		Property Package: Peng-Robinson

CONDITIONS

47	Duty Type: Direct Q	Duty Calculation Operation: P-100	
48	Duty SP: 5184 kJ/h	Minimum Available Duty: 0.0000 kJ/h	Maximum Available Duty: ---

49	Energy Stream: E reboiler	Fluid Package: Basis-1
50		Property Package: Peng-Robinson


CONDITIONS


54	Duty Type: Direct Q	Duty Calculation Operation: Reboiler @COL1	
55	Duty SP: 5.238e+006 kJ/h	Minimum Available Duty: 0.0000 kJ/h	Maximum Available Duty: ---

56	Material Stream: Boilup @COL1	Fluid Package: Basis-1
57		Property Package: Peng-Robinson

CONDITIONS

61		Overall	Vapour Phase		
62	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000		
63	Temperature: (C)	191.3	191.3		
64	Pressure: (kPa)	140.0	140.0		
65	Molar Flow (kgmole/h)	127.8	127.8		
66	Mass Flow (kg/h)	1.645e+004	1.645e+004		
67	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	19.00	19.00		
68	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	2.128e+004	2.128e+004		

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA		Case Name:	simulacao46pratos_TCC.hsc			
2			Unit Set:	SI			
3			Date/Time:	Mon Feb 13 19:26:44 2023			
4			Material Stream: Boilup @COL1 (continued)				
5							
6	Property Package: Peng-Robinson						
7	CONDITIONS						
8		Overall	Vapour Phase				
9	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	169.9	169.9				
10	Heat Flow (kJ/h)	2.719e+006	2.719e+006				
11	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	18.98 *	18.98				
12	PROPERTIES						
13		Overall	Vapour Phase				
14	Molecular Weight	128.7	128.7				
15	Molar Density (kgmole/m3)	3.829e-002	3.829e-002				
16	Mass Density (kg/m3)	4.927	4.927				
17	Act. Volume Flow (m3/h)	3338	3338				
18	Mass Enthalpy (kJ/kg)	165.4	165.4				
19	Mass Entropy (kJ/kg-C)	1.321	1.321				
20	Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	247.7	247.7				
21	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	1.925	1.925				
22	LHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---				
23	HHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---				
24	HHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---				
25	CO2 Loading	---	---				
26	CO2 Apparent Mole Conc. (kgmole/m3)	---	---				
27	CO2 Apparent Wt. Conc. (kgmol/kg)	---	---				
28	LHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---				
29	Phase Fraction [Vol. Basis]	1.000	1.000				
30	Phase Fraction [Mass Basis]	1.000	1.000				
31	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	1.000	1.000				
32	Mass Exergy (kJ/kg)	177.6	---				
33	Partial Pressure of CO2 (kPa)	0.0000	---				
34	Cost Based on Flow (Cost/s)	0.0000	0.0000				
35	Act. Gas Flow (ACT_m3/h)	3338	3338				
36	Avg. Liq. Density (kgmole/m3)	6.727	6.727				
37	Specific Heat (kJ/kgmole-C)	247.7	247.7				
38	Std. Gas Flow (STD_m3/h)	3022	3022				
39	Std. Ideal Liq. Mass Density (kg/m3)	865.6	865.6				
40	Act. Liq. Flow (m3/s)	---	---				
41	Z Factor	0.9470	0.9470				
42	Watson K	10.73	10.73				
43	User Property	---	---				
44	Partial Pressure of H2S (kPa)	0.0000	---				
45	Cp/(Cp - R)	1.035	1.035				
46	Cp/Cv	1.043	1.043				
47	Ideal Gas Cp/Cv	1.035	1.035				
48	Ideal Gas Cp (kJ/kgmole-C)	245.6	245.6				
49	Mass Ideal Gas Cp (kJ/kg-C)	1.908	1.908				
50	Heat of Vap. (kJ/kgmole)	4.097e+004	---				
51	Kinematic Viscosity (cSt)	1.649	1.649				
52	Liq. Mass Density (Std. Cond) (kg/m3)	866.7	866.7				
53	Liq. Vol. Flow (Std. Cond) (m3/h)	18.98	18.98				
54	Liquid Fraction	0.0000	0.0000				
55	Molar Volume (m3/kgmole)	26.12	26.12				
56	Mass Heat of Vap. (kJ/kg)	318.3	---				
57	Phase Fraction [Molar Basis]	1.0000	1.0000				
58	Surface Tension (dyne/cm)	---	---				
59	Thermal Conductivity (W/m-K)	2.270e-002	2.270e-002				
60	Bubble Point Pressure (kPa)	167.7	---				
61	Viscosity (cP)	8.123e-003	8.123e-003				
62	Cv (Semi-Ideal) (kJ/kgmole-C)	239.4	239.4				
63	Mass Cv (Semi-Ideal) (kJ/kg-C)	1.860	1.860				
64	Cv (kJ/kgmole-C)	237.5	237.5				
65	Aspen Technology Inc.						
66	Aspen HYSYS Version 11			Page 12 of 18			
67	Licensed to: Company Name Not Available						
68	* Specified by user.						

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: simulacao46pratos_TCC.hsc
2		Unit Set: SI
3		Date/Time: Mon Feb 13 19:26:44 2023
4		
5		

Material Stream: Boilup @COL1 (continued)

Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

PROPERTIES

		Overall	Vapour Phase		
12	Mass Cv (kJ/kg-C)	1.846	1.846		
13	Cv (Ent. Method) (kJ/kgmole-C)	---	---		
14	Mass Cv (Ent. Method) (kJ/kg-C)	---	---		
15	Cp/Cv (Ent. Method)	---	---		
16	Reid VP at 37.8 C (kPa)	0.8334	0.8334		
17	True VP at 37.8 C (kPa)	0.8335	0.8335		
18	Liq. Vol. Flow - Sum(Std. Cond) (m3/h)	18.98	18.98		
19	Viscosity Index	-25.65	---		

COMPOSITION

Overall Phase

Vapour Fraction 1.0000

COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
26	Benzene	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
27	E-Benzene	25.2143	0.1973	2676.8979	0.1628	3.0768
28	14-EBenzene	102.5781	0.8027	13768.2388	0.8372	15.9215
29	Total	127.7924	1.0000	16445.1368	1.0000	18.9983

Vapour Phase

Phase Fraction 1.000

COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
34	Benzene	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
35	E-Benzene	25.2143	0.1973	2676.8979	0.1628	3.0768
36	14-EBenzene	102.5781	0.8027	13768.2388	0.8372	15.9215
37	Total	127.7924	1.0000	16445.1368	1.0000	18.9983

Material Stream: Reflux @COL1


Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

CONDITIONS

		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	
44	Vapour / Phase Fraction	0.0000	0.0000	1.0000	
45	Temperature: (C)	138.9	138.9	138.9	
46	Pressure: (kPa)	110.0	110.0	110.0	
47	Molar Flow (kgmole/h)	61.47	0.0000	61.47	
48	Mass Flow (kg/h)	6523	0.0000	6523	
49	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	7.497	0.0000	7.497	
50	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	1.148e+004	4.718e+004	1.148e+004	
51	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	-18.51	67.24	-18.51	
52	Heat Flow (kJ/h)	7.057e+005	0.0000	7.057e+005	
53	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	7.479 *	0.0000	7.479	

PROPERTIES

		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	
57	Molecular Weight	106.1	106.0	106.1	
58	Molar Density (kgmole/m3)	7.137	3.341e-002	7.137	
59	Mass Density (kg/m3)	757.3	3.540	757.3	
60	Act. Volume Flow (m3/h)	8.613	0.0000	8.613	
61	Mass Enthalpy (kJ/kg)	108.2	445.3	108.2	
62	Mass Entropy (kJ/kg-C)	-0.1744	0.6346	-0.1744	
63	Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	223.8	176.4	223.8	
64	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	2.109	1.665	2.109	
65	LHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---	---	
66	HHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---	---	
67	HHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---	---	
68	CO2 Loading	---	---	---	

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: simulacao46pratos_TCC.hsc
2		Unit Set: SI
3		Date/Time: Mon Feb 13 19:26:44 2023
4		
5		

Material Stream: Reflux @COL1 (continued)

Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

PROPERTIES


	Overall	Vapour Phase	Liquid Phase	
12	CO2 Apparent Mole Conc. (kgmole/m3)	---	---	---
13	CO2 Apparent Wt. Conc. (kgmol/kg)	---	---	---
14	LHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---	---
15	Phase Fraction [Vol. Basis]	---	1.000	
16	Phase Fraction [Mass Basis]	0.0000	0.0000	1.000
17	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0.0000	0.0000	1.000
18	Mass Exergy (kJ/kg)	33.74	---	---
19	Partial Pressure of CO2 (kPa)	0.0000	---	---
20	Cost Based on Flow (Cost/s)	0.0000	0.0000	0.0000
21	Act. Gas Flow (ACT_m3/h)	---	---	---
22	Avg. Liq. Density (kgmole/m3)	8.199	8.212	8.199
23	Specific Heat (kJ/kgmole-C)	223.8	176.4	223.8
24	Std. Gas Flow (STD_m3/h)	1453	0.0000	1453
25	Std. Ideal Liq. Mass Density (kg/m3)	870.0	870.1	870.0
26	Act. Liq. Flow (m3/s)	2.393e-003	---	2.393e-003
27	Z Factor	---	0.9612	4.499e-003
28	Watson K	10.36	10.36	10.36
29	User Property	---	---	---
30	Partial Pressure of H2S (kPa)	0.0000	---	---
31	Cp/(Cp - R)	1.039	1.049	1.039
32	Cp/Cv	1.278	1.057	1.278
33	Ideal Gas Cp/Cv	1.050	1.050	1.050
34	Ideal Gas Cp (kJ/kgmole-C)	175.3	175.0	175.3
35	Mass Ideal Gas Cp (kJ/kg-C)	1.652	1.652	1.652
36	Heat of Vap. (kJ/kgmole)	3.547e+004	---	---
37	Kinematic Viscosity (cSt)	0.2711	2.293	0.2711
38	Liq. Mass Density (Std. Cond) (kg/m3)	872.2	872.3	872.2
39	Liq. Vol. Flow (Std. Cond) (m3/h)	7.479	0.0000	7.479
40	Liquid Fraction	1.000	0.0000	1.000
41	Molar Volume (m3/kgmole)	0.1401	29.93	0.1401
42	Mass Heat of Vap. (kJ/kg)	334.3	---	---
43	Phase Fraction [Molar Basis]	0.0000	0.0000	1.0000
44	Surface Tension (dyne/cm)	16.52	---	16.52
45	Thermal Conductivity (W/m-K)	0.1114	1.911e-002	0.1114
46	Bubble Point Pressure (kPa)	110.0	---	---
47	Viscosity (cP)	0.2053	8.117e-003	0.2053
48	Cv (Semi-Ideal) (kJ/kgmole-C)	215.5	168.1	215.5
49	Mass Cv (Semi-Ideal) (kJ/kg-C)	2.031	1.586	2.031
50	Cv (kJ/kgmole-C)	175.1	166.9	175.1
51	Mass Cv (kJ/kg-C)	1.650	1.575	1.650
52	Cv (Ent. Method) (kJ/kgmole-C)	---	---	---
53	Mass Cv (Ent. Method) (kJ/kg-C)	---	---	---
54	Cp/Cv (Ent. Method)	---	---	---
55	Reid VP at 37.8 C (kPa)	2.790	2.909	2.790
56	True VP at 37.8 C (kPa)	2.793	2.911	2.793
57	Liq. Vol. Flow - Sum(Std. Cond) (m3/h)	7.479	0.0000	7.479
58	Viscosity Index	-27.96	---	---

COMPOSITION

Overall Phase

Vapour Fraction 0.0000

COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
65	Benzene	0.1162	9.0763	0.0014	0.0103	0.0014
66	E-Benzene	61.3551	6513.8295	0.9986	7.4869	0.9986
67	14-EBenzene	0.0008	0.1074	0.0000	0.0001	0.0000
68	Total	61.4721	6523.0132	1.0000	7.4973	1.0000

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: simulacao46pratos_TCC.hsc
2		Unit Set: SI
3		Date/Time: Mon Feb 13 19:26:44 2023
4		
5		

Material Stream: Reflux @COL1 (continued)

Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

COMPOSITION

Vapour Phase

Phase Fraction 0.0000

13	COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
15	Benzene	0.0000	0.0074	0.0000	0.0055	0.0000	0.0054
16	E-Benzene	0.0000	0.9926	0.0000	0.9945	0.0000	0.9946
17	14-EBenzene	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
18	Total	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000

Liquid Phase

Phase Fraction 1.000

21	COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION
23	Benzene	0.1162	0.0019	9.0763	0.0014	0.0103	0.0014
24	E-Benzene	61.3551	0.9981	6513.8295	0.9986	7.4869	0.9986
25	14-EBenzene	0.0008	0.0000	0.1074	0.0000	0.0001	0.0000
26	Total	61.4721	1.0000	6523.0132	1.0000	7.4973	1.0000

Material Stream: To Condenser @COL1


Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

CONDITIONS

32		Overall	Vapour Phase		
33	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000		
34	Temperature: (C)	139.0	139.0		
35	Pressure: (kPa)	110.0	110.0		
36	Molar Flow (kgmole/h)	151.4	151.4		
37	Mass Flow (kg/h)	1.606e+004	1.606e+004		
38	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	18.46	18.46		
39	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	4.695e+004	4.695e+004		
40	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	67.56	67.56		
41	Heat Flow (kJ/h)	7.107e+006	7.107e+006		
42	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	18.42 *	18.42		

PROPERTIES

45		Overall	Vapour Phase		
46	Molecular Weight	106.1	106.1		
47	Molar Density (kgmole/m3)	3.340e-002	3.340e-002		
48	Mass Density (kg/m3)	3.544	3.544		
49	Act. Volume Flow (m3/h)	4533	4533		
50	Mass Enthalpy (kJ/kg)	442.4	442.4		
51	Mass Entropy (kJ/kg-C)	0.6367	0.6367		
52	Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	176.8	176.8		
53	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	1.666	1.666		
54	LHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---		
55	HHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---		
56	HHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---		
57	CO2 Loading	---	---		
58	CO2 Apparent Mole Conc. (kgmole/m3)	---	---		
59	CO2 Apparent Wt. Conc. (kgmol/kg)	---	---		
60	LHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---		
61	Phase Fraction [Vol. Basis]	1.000	1.000		
62	Phase Fraction [Mass Basis]	1.000	1.000		
63	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	1.000	1.000		
64	Mass Exergy (kJ/kg)	126.2	---		
65	Partial Pressure of CO2 (kPa)	0.0000	---		
66	Cost Based on Flow (Cost/s)	0.0000	0.0000		
67	Act. Gas Flow (ACT_m3/h)	4533	4533		
68	Avg. Liq. Density (kgmole/m3)	8.199	8.199		

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: simulacao46pratos_TCC.hsc
2		Unit Set: SI
3		Date/Time: Mon Feb 13 19:26:44 2023
4		
5		

Material Stream: To Condenser @COL1 (cont)

Fluid Package: Basis-1
 Property Package: Peng-Robinson

PROPERTIES


		Overall	Vapour Phase		
12	Specific Heat (kJ/kgmole-C)	176.8	176.8		
13	Std. Gas Flow (STD_m3/h)	3579	3579		
14	Std. Ideal Liq. Mass Density (kg/m3)	870.0	870.0		
15	Act. Liq. Flow (m3/s)	---	---		
16	Z Factor	0.9611	0.9611		
17	Watson K	10.36	10.36		
18	User Property	---	---		
19	Partial Pressure of H2S (kPa)	0.0000	---		
20	Cp/(Cp - R)	1.049	1.049		
21	Cp/Cv	1.057	1.057		
22	Ideal Gas Cp/Cv	1.050	1.050		
23	Ideal Gas Cp (kJ/kgmole-C)	175.4	175.4		
24	Mass Ideal Gas Cp (kJ/kg-C)	1.653	1.653		
25	Heat of Vap. (kJ/kgmole)	3.547e+004	---		
26	Kinematic Viscosity (cSt)	2.289	2.289		
27	Liq. Mass Density (Std. Cond) (kg/m3)	872.2	872.2		
28	Liq. Vol. Flow (Std. Cond) (m3/h)	18.42	18.42		
29	Liquid Fraction	0.0000	0.0000		
30	Molar Volume (m3/kgmole)	29.94	29.94		
31	Mass Heat of Vap. (kJ/kg)	334.3	---		
32	Phase Fraction [Molar Basis]	1.0000	1.0000		
33	Surface Tension (dyne/cm)	---	---		
34	Thermal Conductivity (W/m-K)	1.912e-002	1.912e-002		
35	Bubble Point Pressure (kPa)	110.5	---		
36	Viscosity (cP)	8.111e-003	8.111e-003		
37	Cv (Semi-Ideal) (kJ/kgmole-C)	168.5	168.5		
38	Mass Cv (Semi-Ideal) (kJ/kg-C)	1.588	1.588		
39	Cv (kJ/kgmole-C)	167.3	167.3		
40	Mass Cv (kJ/kg-C)	1.576	1.576		
41	Cv (Ent. Method) (kJ/kgmole-C)	---	---		
42	Mass Cv (Ent. Method) (kJ/kg-C)	---	---		
43	Cp/Cv (Ent. Method)	---	---		
44	Reid VP at 37.8 C (kPa)	2.790	2.790		
45	True VP at 37.8 C (kPa)	2.793	2.793		
46	Liq. Vol. Flow - Sum(Std. Cond) (m3/h)	18.42	18.42		
47	Viscosity Index	-28.01	---		


COMPOSITION

Overall Phase							Vapour Fraction	1.0000
COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION		
54	Benzene	0.2861	0.0019	22.3497	0.0014	0.0253	0.0014	
55	E-Benzene	151.0820	0.9981	16039.7687	0.9986	18.4358	0.9986	
56	14-EBenzene	0.0020	0.0000	0.2644	0.0000	0.0003	0.0000	
57	Total	151.3701	1.0000	16062.3828	1.0000	18.4615	1.0000	

Vapour Phase

Vapour Phase							Phase Fraction	1.000
COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION		
62	Benzene	0.2861	0.0019	22.3497	0.0014	0.0253	0.0014	
63	E-Benzene	151.0820	0.9981	16039.7687	0.9986	18.4358	0.9986	
64	14-EBenzene	0.0020	0.0000	0.2644	0.0000	0.0003	0.0000	
65	Total	151.3701	1.0000	16062.3828	1.0000	18.4615	1.0000	

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA		Case Name: simulacao46pratos_TCC.hsc	
2			Unit Set: SI	
3			Date/Time: Mon Feb 13 19:26:44 2023	
4				
5			Fluid Package: Basis-1	
6	Material Stream: To Reboiler @COL1		Property Package: Peng-Robinson	
7				
8	CONDITIONS			
9				
10		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase
11				
12	Vapour / Phase Fraction	0.0000	0.0000	1.0000
13	Temperature: (C)	183.8	183.8	183.8
14	Pressure: (kPa)	140.0	140.0	140.0
15	Molar Flow (kgmole/h)	139.0	0.0000	139.0
16	Mass Flow (kg/h)	1.793e+004	0.0000	1.793e+004
17	Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h)	20.71	0.0000	20.71
18	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-2.000e+004	2.852e+004	-2.000e+004
19	Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	82.25	147.8	82.25
20	Heat Flow (kJ/h)	-2.780e+006	0.0000	-2.780e+006
21	Liq Vol Flow @Std Cond (m3/h)	20.69 *	0.0000	20.69
22	PROPERTIES			
23				
24		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase
25	Molecular Weight	129.0	123.0	129.0
26	Molar Density (kgmole/m3)	5.562	3.881e-002	5.562
27	Mass Density (kg/m3)	717.2	4.772	717.2
28	Act. Volume Flow (m3/h)	25.00	0.0000	25.00
29	Mass Enthalpy (kJ/kg)	-155.1	231.9	-155.1
30	Mass Entropy (kJ/kg-C)	0.6378	1.202	0.6378
31	Heat Capacity (kJ/kgmole-C)	300.7	231.2	300.7
32	Mass Heat Capacity (kJ/kg-C)	2.332	1.881	2.332
33	LHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---	---
34	HHV Molar Basis (Std) (kJ/kgmole)	---	---	---
35	HHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---	---
36	CO2 Loading	---	---	---
37	CO2 Apparent Mole Conc. (kgmole/m3)	---	---	---
38	CO2 Apparent Wt. Conc. (kgmol/kg)	---	---	---
39	LHV Mass Basis (Std) (kJ/kg)	---	---	---
40	Phase Fraction [Vol. Basis]	---	---	1.000
41	Phase Fraction [Mass Basis]	0.0000	0.0000	1.000
42	Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0.0000	0.0000	1.000
43	Mass Exergy (kJ/kg)	65.56	---	---
44	Partial Pressure of CO2 (kPa)	0.0000	---	---
45	Cost Based on Flow (Cost/s)	0.0000	0.0000	0.0000
46	Act. Gas Flow (ACT_m3/h)	---	---	---
47	Avg. Liq. Density (kgmole/m3)	6.712	7.048	6.712
48	Specific Heat (kJ/kgmole-C)	300.7	231.2	300.7
49	Std. Gas Flow (STD_m3/h)	3288	0.0000	3288
50	Std. Ideal Liq. Mass Density (kg/m3)	865.6	866.6	865.6
51	Act. Liq. Flow (m3/s)	6.944e-003	---	6.944e-003
52	Z Factor	---	0.9495	6.625e-003
53	Watson K	10.74	10.65	10.74
54	User Property	---	---	---
55	Partial Pressure of H2S (kPa)	0.0000	---	---
56	Cp/(Cp - R)	1.028	1.037	1.028
57	Cp/Cv	1.028	1.045	1.028
58	Ideal Gas Cp/Cv	1.035	1.038	1.035
59	Ideal Gas Cp (kJ/kgmole-C)	242.6	229.2	242.6
60	Mass Ideal Gas Cp (kJ/kg-C)	1.882	1.864	1.882
61	Heat of Vap. (kJ/kgmole)	4.094e+004	---	---
62	Kinematic Viscosity (cSt)	0.2969	1.731	0.2969
63	Liq. Mass Density (Std. Cond) (kg/m3)	866.6	868.2	866.6
64	Liq. Vol. Flow (Std. Cond) (m3/h)	20.69	0.0000	20.69
65	Liquid Fraction	1.000	0.0000	1.000
66	Molar Volume (m3/kgmole)	0.1798	25.77	0.1798
67	Mass Heat of Vap. (kJ/kg)	317.5	---	---
68	Phase Fraction [Molar Basis]	0.0000	0.0000	1.0000
69	Aspen Technology Inc.		Aspen HYSYS Version 11	

1	 Company Name Not Available Bedford, MA USA	Case Name: simulacao46pratos_TCC.hsc
2		Unit Set: SI
3		Date/Time: Mon Feb 13 19:26:44 2023
4		
5		

6	Material Stream: To Reboiler @COL1 (continu	Fluid Package: Basis-1
7		Property Package: Peng-Robinson

PROPERTIES						
		Overall	Vapour Phase	Liquid Phase		
12	Surface Tension (dyne/cm)	13.67	---	13.67		
13	Thermal Conductivity (W/m-K)	0.1061	2.234e-002	0.1061		
14	Bubble Point Pressure (kPa)	140.0	---	---		
15	Viscosity (cP)	0.2129	8.257e-003	0.2129		
16	Cv (Semi-Ideal) (kJ/kgmole-C)	292.4	222.9	292.4		
17	Mass Cv (Semi-Ideal) (kJ/kg-C)	2.268	1.813	2.268		
18	Cv (kJ/kgmole-C)	292.4	221.2	292.4		
19	Mass Cv (kJ/kg-C)	2.268	1.799	2.268		
20	Cv (Ent. Method) (kJ/kgmole-C)	---	---	---		
21	Mass Cv (Ent. Method) (kJ/kg-C)	---	---	---		
22	Cp/Cv (Ent. Method)	---	---	---		
23	Reid VP at 37.8 C (kPa)	0.8100	1.331	0.8100		
24	True VP at 37.8 C (kPa)	0.8101	1.331	0.8101		
25	Liq. Vol. Flow - Sum(Std. Cond) (m3/h)	20.69	0.0000	20.69		
26	Viscosity Index	-23.64	---	---		

COMPOSITION							
Overall Phase						Vapour Fraction	0.0000
COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION	
33	Benzene	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
34	E-Benzene	26.1178	0.1878	2772.8258	0.1546	3.1870	
35	14-EBenzene	112.9266	0.8122	15157.2350	0.8454	17.5277	
36	Total	139.0444	1.0000	17930.0608	1.0000	20.7148	

Vapour Phase						Phase Fraction	0.0000
COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION	
41	Benzene	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
42	E-Benzene	0.0000	0.4015	0.0000	0.3467	0.0000	
43	14-EBenzene	0.0000	0.5985	0.0000	0.6533	0.0000	
44	Total	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	

Liquid Phase						Phase Fraction	1.000
COMPONENTS	MOLAR FLOW (kgmole/h)	MOLE FRACTION	MASS FLOW (kg/h)	MASS FRACTION	LIQUID VOLUME FLOW (m3/h)	LIQUID VOLUME FRACTION	
49	Benzene	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
50	E-Benzene	26.1178	0.1878	2772.8258	0.1546	3.1870	
51	14-EBenzene	112.9266	0.8122	15157.2350	0.8454	17.5277	
52	Total	139.0444	1.0000	17930.0608	1.0000	20.7148	

53	Energy Stream: E condenser @COL1	Fluid Package: Basis-1
54		Property Package: Peng-Robinson

CONDITIONS			
58	Duty Type: Direct Q	Duty Calculation Operation: Condenser @COL1	
59	Duty SP: 5.369e+006 kJ/h	Minimum Available Duty: ---	Maximum Available Duty: ---

61	Energy Stream: E reboiler @COL1	Fluid Package: Basis-1
62		Property Package: Peng-Robinson

CONDITIONS			
65	Duty Type: Direct Q	Duty Calculation Operation: Reboiler @COL1	
66	Duty SP: 5.238e+006 kJ/h	Minimum Available Duty: 0.0000 kJ/h	Maximum Available Duty: ---