

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA**  
**FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA**  
**CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**



**Análise e melhoria econômica do processo de produção de acetona pela  
desidrogenação do 2-propanol (IPA) usando o simulador de processos  
COCO**

**Autor: Augusto Vieira Cunha**

**Uberlândia – MG**

**2019**

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA**  
**FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA**  
**CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**Análise e melhoria econômica do processo de produção de acetona pela  
desidrogenação do 2-propanol (IPA) usando o simulador de processos  
COCO**

**Autor: Augusto Vieira Cunha**

**Monografia de graduação apresentada à  
Universidade Federal de Uberlândia como  
parte dos requisitos necessários para a  
aprovação na disciplina de Projeto de  
Graduação do curso de Engenharia  
Química.**

**Uberlândia – MG**

**2019**

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA MONOGRAFIA DA DISCIPLINA PROJETO DE GRADUAÇÃO DE AUGUSTO VIEIRA CUNHA APRESENTADA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA, EM 22/02/2019.

BANCA EXAMINADORA:

---

Prof. Dr. Adilson José de Assis  
Orientador – FEQUI/UFU

---

Prof. Dr. Ubirajara Coutinho Filho  
FEQUI/UFU

---

Prof. Dr. Sérgio Mauro da Silva Neiro  
FEQUI/UFU

## **AGRADECIMENTOS**

A Deus o meu maior agradecimento, por ter permitido que eu chegasse até aqui e por me mostrar sempre que sou bem mais forte do que penso.

Ao meu orientador Prof. Adilson José de Assis, por gentilmente ter me ajudado e me guiado no decorrer deste trabalho, me dando todo o suporte necessário.

Aos meus pais, pelo amor, por estarem sempre presentes me apoiando incondicionalmente e pela incansável compreensão.

A minha namorada, minha gratidão por toda ajuda, você foi essencial nesta importante etapa. E a todos que direta ou indiretamente colaboraram na execução deste trabalho e fizeram parte da minha formação, o meu muito obrigado.

## SUMÁRIO

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO	06
CAPÍTULO 2 – FUNDAMENTOS E REVISÃO DA LITERATURA	08
2.1. Acetona	08
2.2. Mercado e Aplicações da Acetona	11
2.3. Isopropanol	12
2.4. Mercado e Aplicações do Isopropanol	14
CAPÍTULO 3 – PRODUÇÃO DE ACETONA PELA DESIDROGENAÇÃO DO 2-PROPANOL (IPA)	15
3.1. Cinética Química da Reação	15
3.2. Equilíbrio de Fases	18
3.3. Layout do Processo e Condições Operacionais	19
3.3.1. Efeito da Pressão no Absorvedor	22
3.3.2. Efeito da Água como Solvente e dos Estágios no Absorvedor	23
3.3.3. Efeito do Tamanho do Reator	24
3.3.4. Design Ideal de Destilação	25
CAPÍTULO 4 – SIMULAÇÃO, ANÁLISE E MELHORIA ECONÔMICA DO PROCESSO	26
4.1. Simulador COCO	26
4.2. Operações Unitárias	28
4.3. Análise e Melhoria Econômica	30
4.3.1. Vazão de Alimentação de IPA	30
4.3.2. Pressão no Absorvedor	32
4.3.3. Integração Energética	35
4.3.4. Reciclo da Água	42
CAPÍTULO 5 – CONCLUSÕES	45
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	47

## RESUMO

A acetona é produzida através de vários processos alternativos, um dos quais é o processo de acetona via desidrogenação de 2-propanol (IPA). Esta reação endotérmica em fase gasosa converte IPA em acetona e hidrogênio. O processo tem duas colunas de destilação e uma coluna de absorção, em que uma corrente de água é usada para recuperar a acetona. Em *Ind. Eng. Chem. Res.: Vol. 50 p. 1206-1218 (2011)*, LUYBEN mostrou que operar o absorvedor a uma pressão elevada reduz as perdas de acetona, aumenta a temperatura e o custo requeridos da fonte de calor do vaporizador. Também afeta negativamente a cinética da reação, porque a reação é não equimolar e a conversão diminui com o aumento da pressão. Portanto, é necessária uma temperatura do reator mais alta para conseguir a conversão desejada. No estudo abordado neste Trabalho de Conclusão de Curso (TCC), foi proposta a melhoria da planta apresentada por LUYBEN (2011) através da simulação de processos utilizando o software COCO. Para isso, foram efetuados estudos de análise de sensibilidade e propostas a inclusão da integração energética e reciclo de água na planta original. Desenvolvidos para comparação, os resultados mostraram que a integração energética apresentou uma redução significativa de energia na planta e no consumo de água como parâmetro de sustentabilidade.

**Palavras-chave:** Acetona, 2-Propanol, IPA, Desidrogenação, Simulação, COCO.

## ABSTRACT

Acetone is produced via several alternative processes, one of which is the dehydrogenation of 2-propanol (IPA). The endothermic gas-phase reaction converts IPA to acetone and hydrogen. The process has two distillation columns and an absorption column, where a stream of water is used to recover the acetone. In *Ind. Eng. Chem. Res.: Vol. 50 p. 1206-1218 (2011)*, LUYBEN showed that operating the absorber at a high pressure reduces the losses of acetone, increases the required temperature and cost of the vaporizer heat source. It also negatively affects the kinetics of the reaction, because the reaction is nonequimolar and the conversion decreases with increasing pressure. As such, a higher reactor temperature is required to achieve the desired conversion. In the study addressed in this Final Work, it was proposed to improve the plant presented by LUYBEN (2011) through the simulation of processes using COCO software. For this, studies of sensitivity analysis and proposals were made to include energy integration and water recycling in the original plant. Developed for comparison, the results showed that energy integration showed a significant reduction of energy in the plant and water consumption as a parameter of sustainability.

**Keywords:** Acetone, 2-Propanol, IPA, Dehydrogenation, Simulation, COCO.

## CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO

A acetona é usualmente conhecida pela população como removedora de esmalte, entretanto, na indústria química ela possui diversas aplicabilidades, onde a principal é ser solvente. É utilizada como o solvente básico em resinas adesivas e como solvente na produção de explosivos. Além dessas funções, a acetona é matéria prima para produção de outros solventes, em grande parte, na indústria de tinta, principalmente, o metil-isobutilcetona (MIBK) (MANGILI E SOUZA, 2016).

Na indústria farmacêutica a acetona é empregada como solvente para extração de vitaminas do complexo B, antibióticos e enzimas, e também é utilizada como solvente para processos biológicos sensíveis. Essa aplicação exige que a acetona tenha um grau de pureza elevado e, como a principal rota de produção mundial dela é a partir do cumeno, a produção via desidrogenação do 2-propanol (IPA) passa a ser uma rota alternativa para esse tipo de indústria, uma vez que o produto final sai livre de compostos aromáticos (LUYBEN, 2011).

LUYBEN (2011) descreve a planta deste processo, no qual uma reação endotérmica em fase gasosa converte IPA em acetona e hidrogênio. O processo consiste em um vaporizador, um reator tubular aquecido, um tanque de separação do tipo flash, duas colunas de destilação e uma coluna de absorção.

Uma corrente em fase líquida, formada por uma mistura de água e IPA, é alimentada no reator que opera em fase gasosa, aquecido por sal fundido de alta temperatura. Posteriormente, esta corrente é combinada com um pequeno reciclo vaporizado de IPA/água. O efluente do reator é resfriado e alimentado para um tanque de flash, no qual o gás proveniente deste contém a maioria do hidrogênio, mas também acetona. Este gás é alimentado em uma coluna de absorção, em que uma corrente de água é usada para recuperar a acetona gerada. As correntes líquidas do absorvedor e do tanque de flash são alimentadas na primeira coluna de destilação, que produz acetona de alta pureza. Há também uma corrente de ventilação de vapor deixando o refluxo desta coluna para remover a pequena quantidade de hidrogênio dissolvido na alimentação. A segunda coluna de destilação produz água de alta pureza, e um destilado com uma composição próxima do azeótropo da água/IPA, que é reciclado para o vaporizador (LUYBEN, 2011).

Segundo LUYBEN (2011), remover o hidrogênio sem perder muita acetona no produto final é o principal desafio da planta. Ao operar o absorvedor a uma pressão elevada as perdas de acetona são reduzidas, mas aumentam a temperatura e o custo requeridos da fonte de calor do vaporizador. Isso também afeta negativamente a cinética da reação, porque a reação é não equimolar, e a conversão diminui com o aumento da pressão. Como tal, é necessária uma temperatura do reator mais elevada para alcançar a conversão desejada.

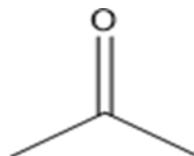
DIAS (2017), ressalta que é interessante o uso de simuladores computacionais para estudo de uma planta de processo que pode levar a otimizações, que são definidas como melhorias de processos existentes.

O objetivo deste trabalho é (1) simular uma planta de produção de acetona que usa a rota química de desidrogenação do 2-Propanol (IPA); (2) efetuar estudos de análise de sensibilidade na planta; (3) reduzir o gasto energético usando a integração energética. Para tal, todos os passos foram efetuados usando o simulador de processos COCO®.

## CAPÍTULO 2 – FUNDAMENTOS E REVISÃO DA LITERATURA

### 2.1 – Acetona

Acetona é um composto orgânico de nomenclatura oficial 2-propanona com fórmula molecular  $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$  (Figura 2.1), sendo a mais simples e a mais importante das cetonas. É um líquido incolor, inflamável, volátil, com odor ligeiramente pungente e pouco aromático. É miscível em todas as proporções de água e em solventes orgânicos como éter, metanol, álcool etílico e ésteres. Tem peso molecular de 58,08 g/mol, ponto de fusão de  $-94^\circ\text{C}$ , ponto de ebulição de  $56,5^\circ\text{C}$ , ponto de fulgor de  $-18^\circ\text{C}$ ,  $\text{pK}_a$  de 24,2 e sua densidade, medida em  $25^\circ\text{C}$ , é menor do que a da água sendo igual a 0,788 kg/L (O'NEIL, M. J., 2006).

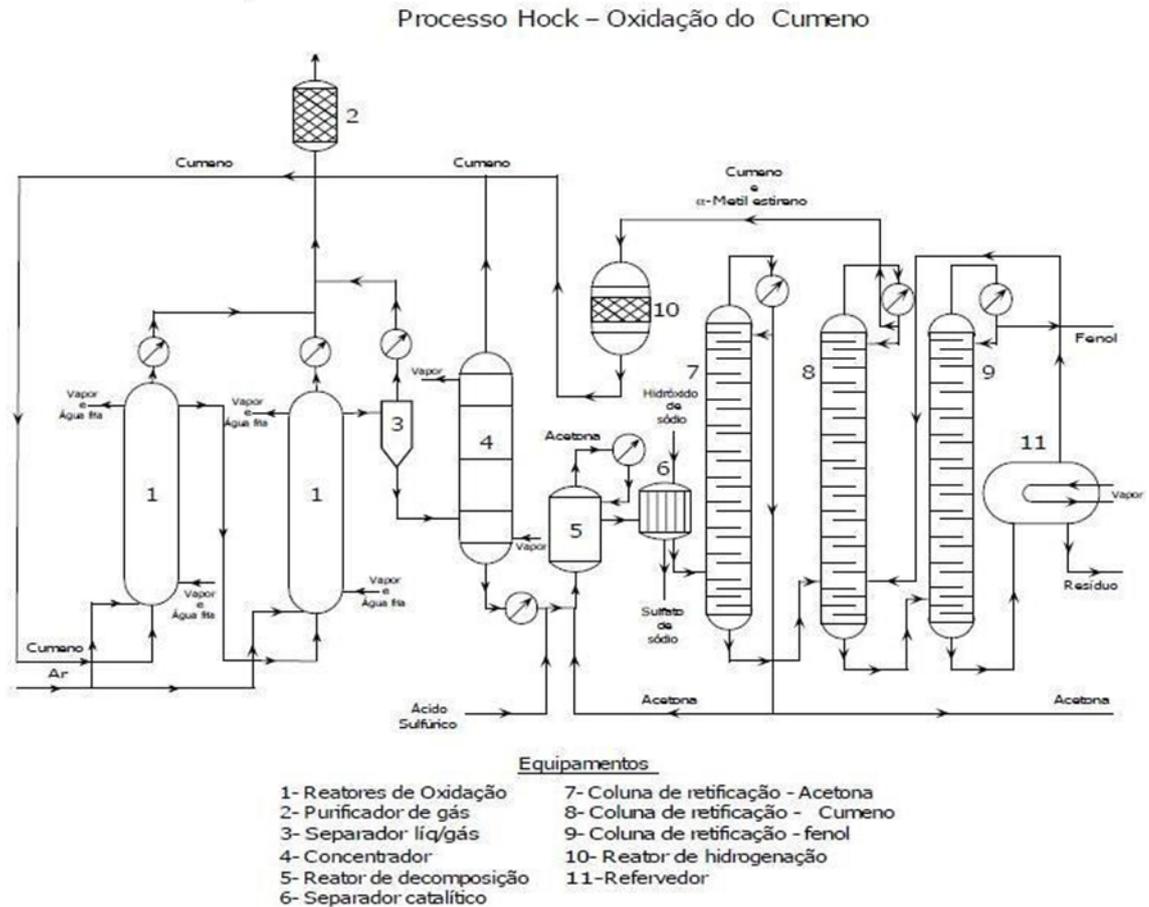


**Figura 2.1:** Molécula da 2-Propanona.

A acetona foi obtida pela primeira vez em 1595, a partir da destilação sob-baixa pressão do acetato de chumbo por Libavius, processo chamado de “dry distillation”. No entanto, sua fórmula molecular só foi corretamente determinada em 1832 por Liebig e Dumas (MILLER L. J., 1963).

A produção industrial da acetona teve início na Primeira Guerra Mundial, e só foi possível com o desenvolvimento de um processo fermentativo a partir de carboidratos, feito por Chaim Weizmann, um químico russo. Neste processo, Weizmann utilizou uma bactéria ainda desconhecida, que depois foi identificada como sendo a *Clostridium acetobutylicum*.

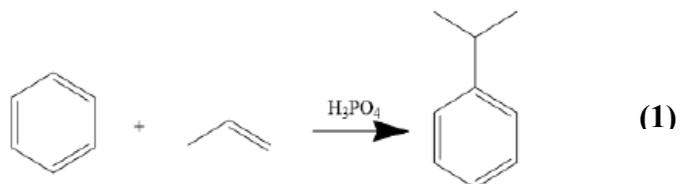
Atualmente, a maior parte da produção industrial da acetona é feita a partir do propileno. Este processo, denominado Processo Hock (Figura 2.2), foi desenvolvido, em 1944, por Hock e Lang (VELLASCO JR., W.T., 2011).



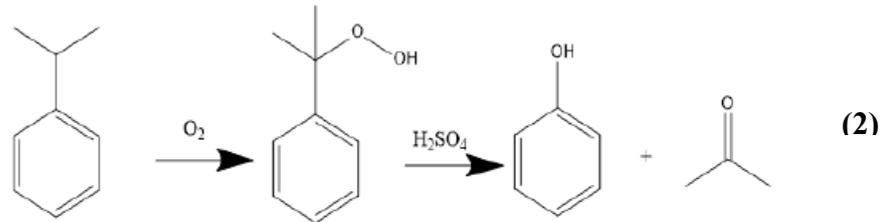
**Figura 2.2:** Planta industrial de utilização do processo Hock para obtenção de acetona.

**Fonte:** ACKER et al. (1998).

No processo Hock, o benzeno reage com o propileno por meio da reação de alquilação, onde na presença de ácido fosfórico ( $H_3PO_4$ ) como catalisador é formado o isopropilbenzeno, também denominado cumeno, conforme Reação 1.

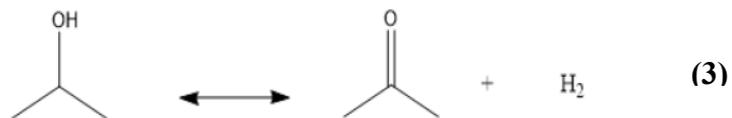


Na sequência, o cumeno é oxidado pelo oxigênio do ar, gerando o hidroperóxido de cumila, que em presença de ácido sulfúrico ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ) é clivado à acetona e fenol conforme Reação 2 (SIFNIADES E LEVY, 2002).



O objetivo principal deste processo é a obtenção do fenol, apesar de cerca de 80% da acetona produzida nos Estados Unidos da América (EUA), em 2010, ter sido obtida desta forma. No Brasil as principais empresas produtoras de acetona usam este processo para produzirem acetona e fenol (BARCZA, 2012).

Segundo CHAUVEL (1989), o processo Hock vem sendo amplamente utilizado em substituição à desidrogenação do 2-propanol. As indústrias que ainda utilizam este álcool como matéria-prima, podem seguir o processo em fase líquida ou em fase gás. Entretanto, em ambos os casos, além da formação da acetona há a geração de gás hidrogênio conforme demonstrado na Reação 3.



Em fase líquida, é necessário que o processo alcance a temperatura de  $150^\circ\text{C}$  com a ajuda de um catalisador, o níquel de Raney, para que ocorra a reação. Nesta situação tem-se como vantagem a pureza dos produtos e o rendimento de 98%.

Na fase gasosa, o aumento significativo da temperatura é fundamental, em torno de  $300\text{-}400^\circ\text{C}$ , com a utilização de catalisadores de níquel ou cobre. A desvantagem é que o rendimento permanece em torno de 90% em consequência do controle da temperatura ideal,

fazendo com que seja necessária a adição de três colunas para fazer a separação do azeótropo formado com o álcool isopropílico a ser reciclado da acetona.

Ainda tendo como base o 2- propanol, a acetona pode ser obtida mediante sua oxidação em um processo que foi utilizado, até 1980, pela Shell Chemical. Assim como no processo Hock, o principal objetivo da indústria não era a obtenção da acetona, mas obter glicerina a partir de propileno (CHAUVEL, 1989).

Segundo SMIDT et al. (1959), a acetona pode ser obtida ainda pela oxidação de olefinas com cloreto de paládio como catalisador. Este processo, conhecido como Wacker-Hoechst, originalmente foi utilizado para a formação do acetaldeído a partir do etileno, no final da década de 1950, e marcou o início da utilização de paládio como catalisador de reações orgânicas.

## **2.2 – Mercado e Aplicações da Acetona**

Muitas das indústrias de produção de fenol acabam produzindo acetona como subproduto, e avalia-se que 97% da produção mundial de acetona seja resultado dessas indústrias (IHS MARKIT, 2016).

O processo de oxidação do cumeno para produção de fenol, tem como particularidade a geração de acetona e  $\alpha$ -metilestireno como co-produtos. No Brasil, Quiminvest e Rodhia seguem esta rota, sendo a Rodhia a maior fornecedora brasileira de fenol (BARCZA, 2012).

Conforme o IHS MARKIT (2016), o setor de solvente conduz 34% da demanda industrial de acetona global, e em 2016, 42% desta demanda veio do Nordeste da Ásia. A China lidera o consumo mundial de acetona, seguido dos Estados Unidos e Europa Ocidental. Esta demanda de solvente permanecerá crescendo em uma taxa de 3,7% até 2021.

A acetona é um reagente de extrema utilidade e uma das suas principais aplicações industriais é na síntese do Bisfenol A, uma matéria-prima importante para a obtenção de plásticos de policarbonato e resinas epóxi, que estão presentes na constituição desde garrafas plásticas até automóveis (VELLASCO JR., W.T., 2011).

Outra importante aplicação industrial da acetona é a síntese do metacrilato de metila (MMA). O processo data de 1930 e utiliza ácido cianídrico (HCN) na primeira etapa, quando é produzida a acetona cianidrina. Na sequência, a adição de ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) a 140 °C e

posterior metanólise levam ao produto, que é o monômero constituinte do acrílico (BAUER JR., 2002).

De acordo com VELLASCO JR. (2011), um ponto favorável desta rota sintética reside justamente na obtenção do intermediário acetona cianidrina, que tem grande aplicação na síntese de inseticidas, produtos farmacêuticos e agentes flavorizantes.

O MMA e o Bisfenol A são nesta ordem, o segundo e terceiro maior setor em relação ao consumo global de acetona. Em 2016, 26% de acetona foram utilizados pelo setor de MMA. Sobre o Bisfenol A, esse superou o MMA, elevando 3,3% ao ano em um período de cinco anos, ou seja, até 2021 (IHS MARKIT, 2016).

Ainda na indústria química, a acetona é utilizada na produção de metil-isobutilcetona (MIBK). O processo clássico utiliza uma das principais formas de aplicação da acetona em laboratórios de síntese orgânica, que é a condensação aldólica. Após a reação de condensação, segue uma desidratação e posterior hidrogenação utilizando paládio como catalisador (CONANT E TUTTLE, 1941).

Outra aplicação em laboratórios de síntese é a sua utilização como agente protetor de grupos hidroxila, formando acetais. Esta propriedade é bastante empregada para a derivatização seletiva de carboidratos, em especial do manitol, na busca de novos agentes com potencial atividade biológica (OLIVEIRA et al., 2009).

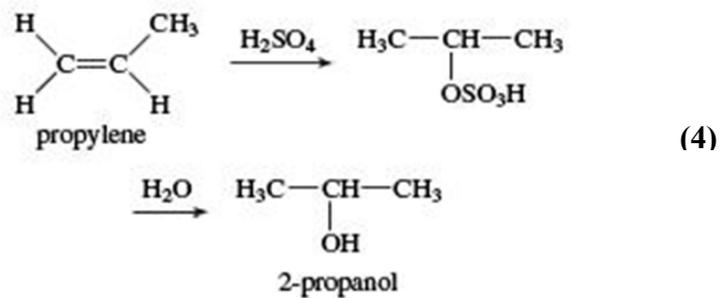
A acetona é utilizada como solvente na fabricação de tintas e vernizes, na indústria farmacêutica, na produção de esmaltes, e como principal constituinte de produtos removedores de esmaltes. Ainda é utilizada como agente estabilizante do acetileno, sendo este gás transportado de forma segura apenas quando dissolvido em acetona em cilindros de aço (VELLASCO JR., W.T., 2011).

### **2.3 – Isopropanol**

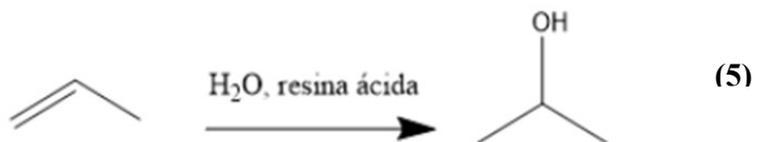
Isopropanol é um dos membros mais comuns da família do álcool de compostos orgânicos, e também é conhecido como álcool isopropílico, 2-propanol ou pelo nome oficial, propan-2-ol. É um líquido claro, incolor e volátil, com odor característico de álcoois, inflamável e explosivo. Possui fórmula  $C_3H_8O$ , massa molecular de 60,1 g/mol, densidade de 0,785 kg/L a 20°C, ponto de fusão igual a -90°C, ponto de ebulição aproximadamente de

82°C, sendo miscível em água e vários outros álcoois, clorofórmio, éter, glicerina, benzeno e acetona (O'NEIL, M. J., 2006).

O isopropanol foi o primeiro álcool sintético comercial. Os químicos da Standard Oil Company de Nova Jersey (mais tarde, Exxon Mobil) produziram-no pela primeira vez em 1920, enquanto estudavam os subprodutos do petróleo. É facilmente sintetizado a partir da reação do propileno com ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>), seguida de hidrólise, conforme Reação 4. Em alguns casos, a hidratação do propileno é realizada em uma etapa, usando água e um catalisador a alta pressão (LEROY G. W., 1998).



A rota mais moderna é a hidratação direta do propileno de grau químico (90- 99%) poupando o uso de ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>), tendo uma única etapa (Reação 5). A mistura líquido-vapor de água e propileno são aquecidos e colocados sob pressão para passar por um reator de fluxo de gotejamento contendo resinas de poliestireno (ICIS, 2007).



Outra possibilidade é realizar a reação em fase gasosa sobre um reator de leito fixo usando um catalisador suportado em ácido fosfórico (H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>). A fase líquida também pode ser utilizada empregando-se um catalisador de tungstênio solúvel. Assim, o isopropanol (IPA) é obtido a partir da solução aquosa pelo processo de destilação. Além disso, pode ser produzido

a partir da hidrogenação catalítica da acetona líquida, porém este processo é comum quando a acetona está em excesso (ICIS, 2007).

#### **2.4 – Mercado e Aplicações do Isopropanol**

O consumo do isopropanol como solvente direto e para seus respectivos derivados, representou cerca de 77% da demanda total desse composto nas suas principais regiões consumidoras em 2014. Em contrapartida, a aplicação direta deste solvente representou aproximadamente 63% da demanda industrial total (IHS MARKIT, 2015).

Ainda de acordo com a IHS MARKIT (2015), os Estados Unidos no ano de 2014 foi o país que mais consumiu o isopropanol, seguido da Europa Ocidental e China. Evidenciando que esses países também são os maiores consumidores de acetona.

O mercado de IPA permanecerá abundante durante o período de 2014-2019, especialmente com a procura global aumentando a uma taxa anual média avaliada em 1,9% até 2019, e sua capacidade crescendo a uma taxa anual média de 2,9% (IHS MARKIT, 2015).

O álcool isopropílico é empregado na indústria como um solvente de baixo custo para cosméticos, drogas, formulações medicinais, bem como para desnaturar o etanol (álcool etílico). Além disso, o IPA é facilmente oxidado em acetona, outro importante solvente. É usado também no setor cosmético em loções pós-barba, loções para as mãos e outros. Quando misturado com água têm uso como antisséptico para álcool, e ao ser adicionado ao gás úmido, ajuda a evitar a separação e o congelamento de uma camada de água (LEROY G. WADE, 1998).

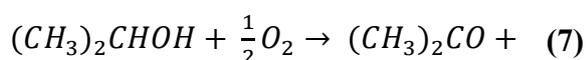
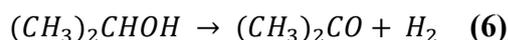
No caso de limpeza, a aplicação direta deste solvente inclui revestimentos de superfícies, tintas, formulações de pesticidas, solventes de processamento na produção de resinas e produtos domésticos (IHS MARKIT, 2015).

## CAPÍTULO 3 – PRODUÇÃO DE ACETONA PELA DESIDROGENAÇÃO DO 2-PROPANOL (IPA)

### 3.1 – Cinética Química da Reação

A produção de acetona envolve a desidrogenação do isopropanol (IPA) em um reator de fase gasosa de alta temperatura. O estudo da cinética química desta reação catalítica retratada neste trabalho foi baseado segundo o artigo de LOKRAS, DESPHANDE E KULLOOR (1970).

A obtenção de acetona pelo isopropanol pode ocorrer de duas maneiras, pela desidrogenação catalítica (Reação 6) ou pela oxidação catalítica (Reação 7).



A reação de desidrogenação precisa de energia, enquanto a de oxidação libera energia, onde esta última demanda um controle crítico de sua temperatura. Por esse motivo, muitas indústrias preferem utilizar a rota de desidrogenação para obtenção da acetona.

Ao decorrer da reação de desidrogenação, há a existência de uma reação paralela de desidratação do álcool descrita pela Reação 8, que pode ser controlada por catalisadores e condições operacionais apropriadas.



TURTON et al. (2003) consideraram que a reação de desidrogenação é irreversível, e especificam que a conversão por passe de IPA é de 90% para evitar reações colaterais, sendo que a reação ocorre em fase gasosa na presença de um catalisador sólido.

Usando o tamanho do reator e a cinética evidenciada em TURTON et al. (2003), conforme Tabela 3.1, obtem-se a conversão de 90% se a presença do catalisador sólido for negligenciada. Mas como há a presença de um catalisador, um reator maior teria que ser utilizado para se obter a mesma conversão (LUYBEN, 2011).

-	Reação Irreversível Turton	Reação Reversível Luyben	
		Direta	Reversa
K	$3.51 \times 10^5$	$22 \times 10^6$	1000
E (kJ/kmol)	72380	72380	9480
Concentração (kmol/m <sup>3</sup> )	$C_{IPA}$	$C_{IPA}$	$C_{acetona} C_{H_2}$

**Tabela 3.1:** Cinética da Reação.

**Fonte:** Adaptado de TURTON et al. (2003).

LOKRAS, DESPHANDE E KULLOOR (1970), realizaram um estudo sobre o catalisador sólido necessário para a reação de produção da acetona e, prepararam pela técnica de impregnação, os seguintes catalisadores: Cu-SiO<sub>2</sub>, Ni-SiO<sub>2</sub>, ZnO-SiO<sub>2</sub> e Cu-pumice.

Dentre esses catalisadores mencionados, o Cu-SiO<sub>2</sub> apontou melhores condições, tendo uma área específica equivalente a 310 cm<sup>2</sup>/g, densidade aparente de 2,4818 g/cm<sup>3</sup>, e densidade de bulk de 0,8750 g/cm<sup>3</sup>.

Na escolha do catalisador e do material de suporte, percebeu-se que o Cu suportado em pedra-pome teve uma baixa atividade e conseqüentemente uma vida curta, fazendo com que a sílica em gel fosse selecionada como suporte.

A partir dos resultados obtidos deste estudo, foi definida a utilização do catalisador de Cu-SiO<sub>2</sub> em um reator de leito fixo, que segundo LOKRAS, DESPHANDE E KULLOOR (1970), apresentou melhores resultados para a reação de desidrogenação.

Pode-se verificar que a reação de desidrogenação, por ser endotérmica, tem uma maior conversão com o aumento da temperatura, porém, em contrapartida, o aumento da temperatura aumenta a reação indesejada de desidratação.

LUYBEN (2011) considera a cinética usada por TURTON et al. (2003) irrealista, pois a reação não pode ser irreversível. Se fosse irreversível, o reator poderia operar a alta pressão, o que aumentaria a concentração de IPA e direcionaria a reação para os produtos. Mas, de acordo com o princípio de Le Chatelier, o aumento da pressão deve direcionar a reação para o reagente, já que existem dois mols de produto gerados a partir de um mol de reagente, em concordância com a estequiometria da reação.

Na tentativa de modificar a cinética, a fim de capturar esses efeitos realistas, um reator RGIBBS foi executado no simulador Aspen Plus para encontrar o efeito da pressão na conversão. A 623K a conversão de equilíbrio do reator RGIBBS é de 97,1% a 2 atm. Isso deve ser comparado com a conversão de 90% apresentado no design inicial do Turton. À medida que as pressões aumentam para 5, 10 e 15 atm, as conversões de equilíbrio diminuem para 93,3, 87,8 e 83,2%. Visivelmente, o efeito da pressão deve ser considerado na reação de produção da acetona via desidrogenação do IPA (LUYBEN, 2011).

Assim, a cinética foi modificada para assumir uma reação reversível, conforme Reação 9.



De acordo com KOLB E BURWELL (1945), conforme citado por LOKRAS, DESPHANDE E KULLOOR (1970), as constantes de equilíbrio foram determinadas experimentalmente para esta reação que é reversível na faixa de temperatura empregada. Com isso, é mais adequado utilizar a Reação 9 em preferência à Reação 6 irreversível de pseudo primeira ordem.

As taxas de reação global direta e reversa são fornecidas por LUYBEN (2011) através das Equações 3.1 e 3.2, respectivamente, com unidades em  $\text{kmol s}^{-1} \text{m}^{-3}$ .

$$\mathcal{R}_D = C_{IPA} k_D e^{\frac{-72380}{RT}} \quad \text{Eq. (3.1)}$$

$$\mathcal{R}_R = C_{acetona} C_{H_2} k_R e^{\frac{-9480}{RT}} \quad \text{Eq. (3.2)}$$

A energia de ativação da reação direta a ser considerada será o valor disponibilizado em TURTON et al. (2003) de 72.380 kJ/kmol. E a energia de ativação da reação reversa foi calculada utilizando o calor da reação de + 62.900 kJ/kmol, conforme a Equação 3.3.

$$\lambda = E_D - E_R \quad \text{Eq. (3.3)}$$

LUYBEN (2011) empregou um procedimento empírico de tentativa e erro para encontrar os valores desconhecidos dos fatores pré-exponenciais  $k_D$  e  $k_R$  que deveriam satisfazer duas condições. Primeiramente estes fatores devem fornecer aproximadamente a mesma dependência de pressão de conversão em um grande reator tubular conforme previsto pelo RGIBBS. Segundo, devem dar 90% de conversão quando usados no reator tubular apresentando por Turton incluindo a presença de catalisador. A Tabela 3.1, indicada anteriormente, mostra os parâmetros utilizados neste estudo. Para ser consistente com o efeito da pressão na conversão do reator, esta será mantida em 85% à medida que outros parâmetros de projeto são alterados.

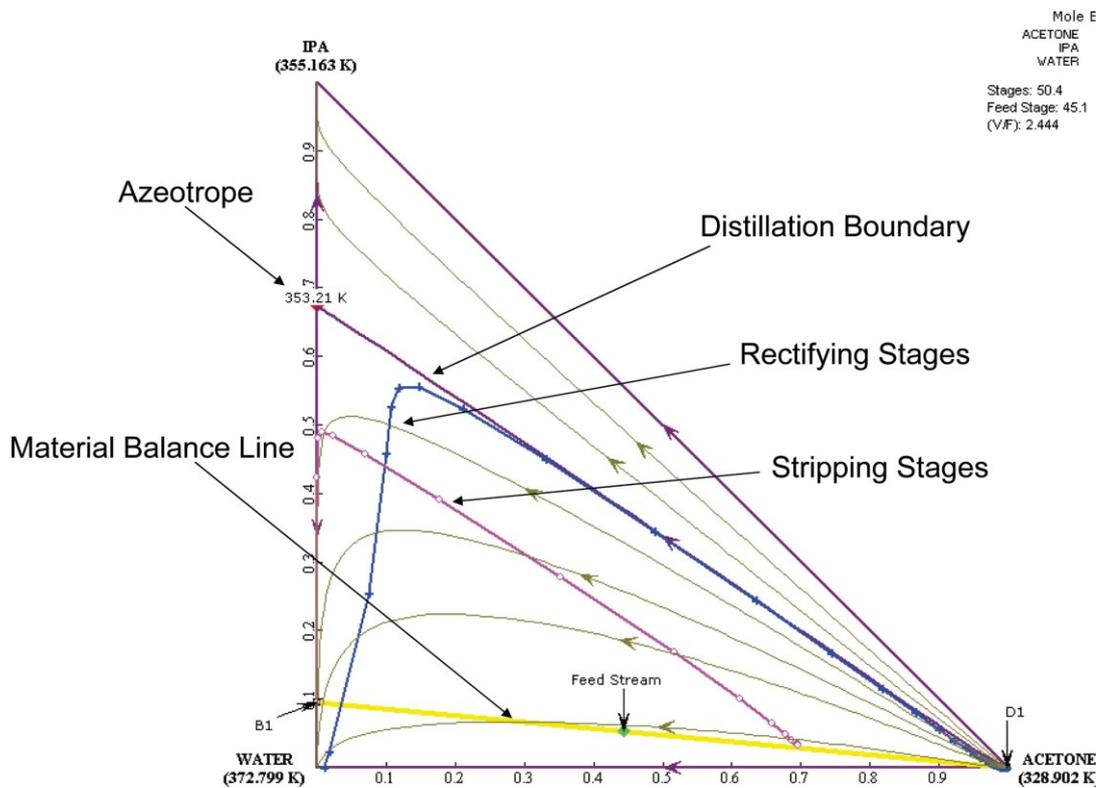
### 3.2 – Equilíbrio de Fases

Características de equilíbrio de duas fases dominam as separações requeridas neste processo. A primeira é a alta volatilidade do hidrogênio em comparação com os outros componentes. Após resfriar a mistura deixando o reator, ela é alimentada no separador. A maior parte do hidrogênio entra na corrente gasosa, mas uma pequena quantidade é dissolvida no líquido. Este hidrogênio acaba no condensador da primeira coluna de destilação, e exigiria uma temperatura muito baixa para poder condensar. Portanto, uma pequena corrente de ventilação é removida do topo do destilador. Qualquer acetona nesta corrente de ventilação é perdida e só tem valor de combustível (LUYBEN, 2011).

A segunda característica importante do equilíbrio de fases é a existência de um azeótropo no sistema IPA/água. Os pontos de ebulição normais do IPA e da água são 355,4 e 373 K, respectivamente. O azeótropo contém 67,32% em mol de IPA a 1 atm e 353,4 K. A existência do azeótropo significa que o IPA que não é convertido no reator e é reciclado a partir do topo da segunda coluna de destilação, terá uma composição próxima da composição azeotrópica (LUYBEN, 2011).

A separação é fácil, dessa forma, a segunda coluna de destilação não necessita de muitas bandejas e pode operar com uma baixa taxa de refluxo. Porém, a produção de acetona de alta pureza exigirá na primeira coluna de destilação muitas bandejas e uma taxa de refluxo razoavelmente alta.

LUYBEN (2011), apresenta na Figura 3.1 o diagrama ternário para o sistema acetona/IPA/água a 1 atm, onde existem duas regiões de destilação. A alimentação para a primeira coluna de destilação está na região inferior. As curvas de resíduos indicam que uma acetona de alta pureza pode ser produzida no destilado, e a parte inferior será uma mistura de IPA e água. A localização das composições das correntes de alimentação, destilação e fundo para a primeira destilação são mostradas e situam-se numa linha reta.



**Figura 3.1:** Diagrama ternário para Acetona/ IPA/ Água.

**Fonte:** LUYBEN (2011).

### 3.3 – Layout do Processo e Condições Operacionais

A Figura 3.2 mostra o processo de acetona descrito em TURTON et al. (2003). Sua intenção não é determinar o projeto ideal, mas sim ilustrar um processo químico típico de

multiunidades que apresenta uma seção de reação acoplada a uma seção de separação e conectada por uma corrente de reciclagem.

O alimento fresco contém 34,81 kmol/h do 2-propanol (IPA). Observe que o absorvedor é operado a baixa pressão (1,5 atm), o que resulta em uma perda de acetona no efluente gasoso de 2,52 kmol/h. A acetona perdida na corrente de ventilação da primeira coluna de destilação é pequena (0,0335 kmol/h) porque há pouco hidrogênio na alimentação da coluna na baixa pressão de operação no tanque flash e no absorvedor.

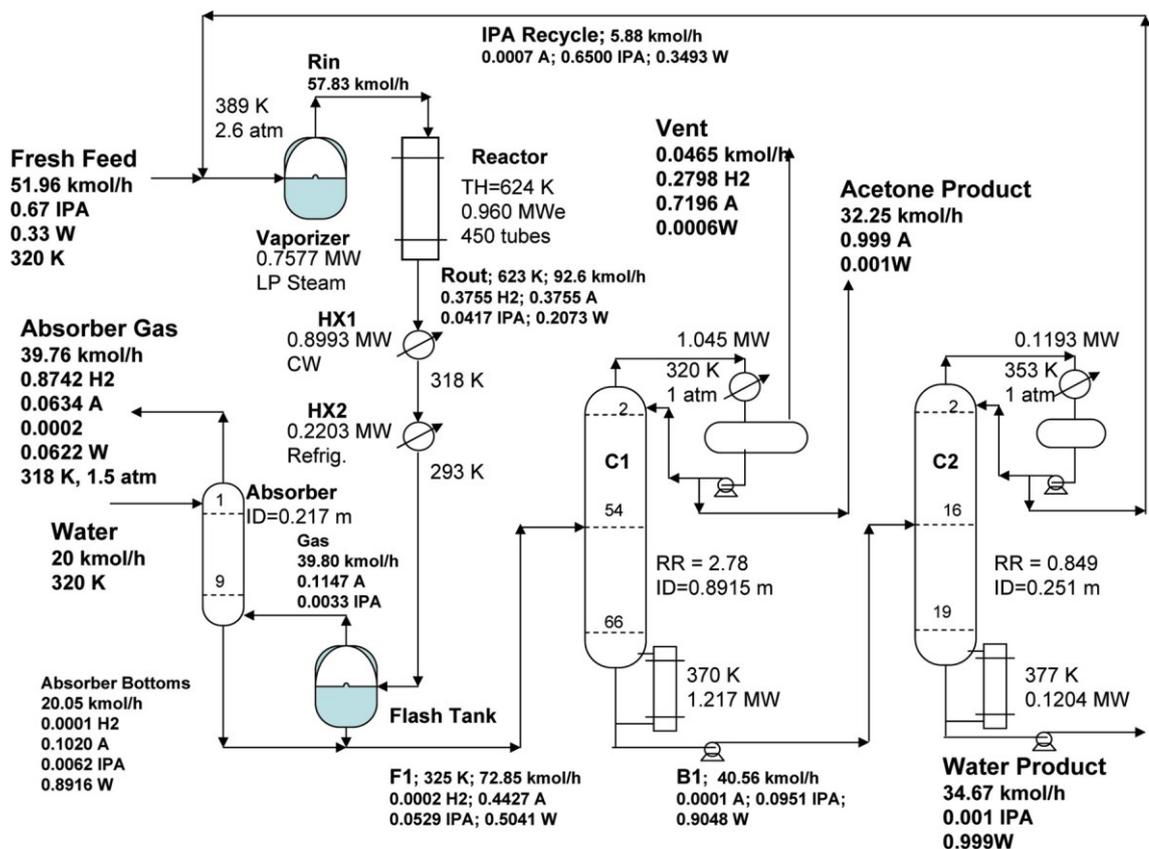


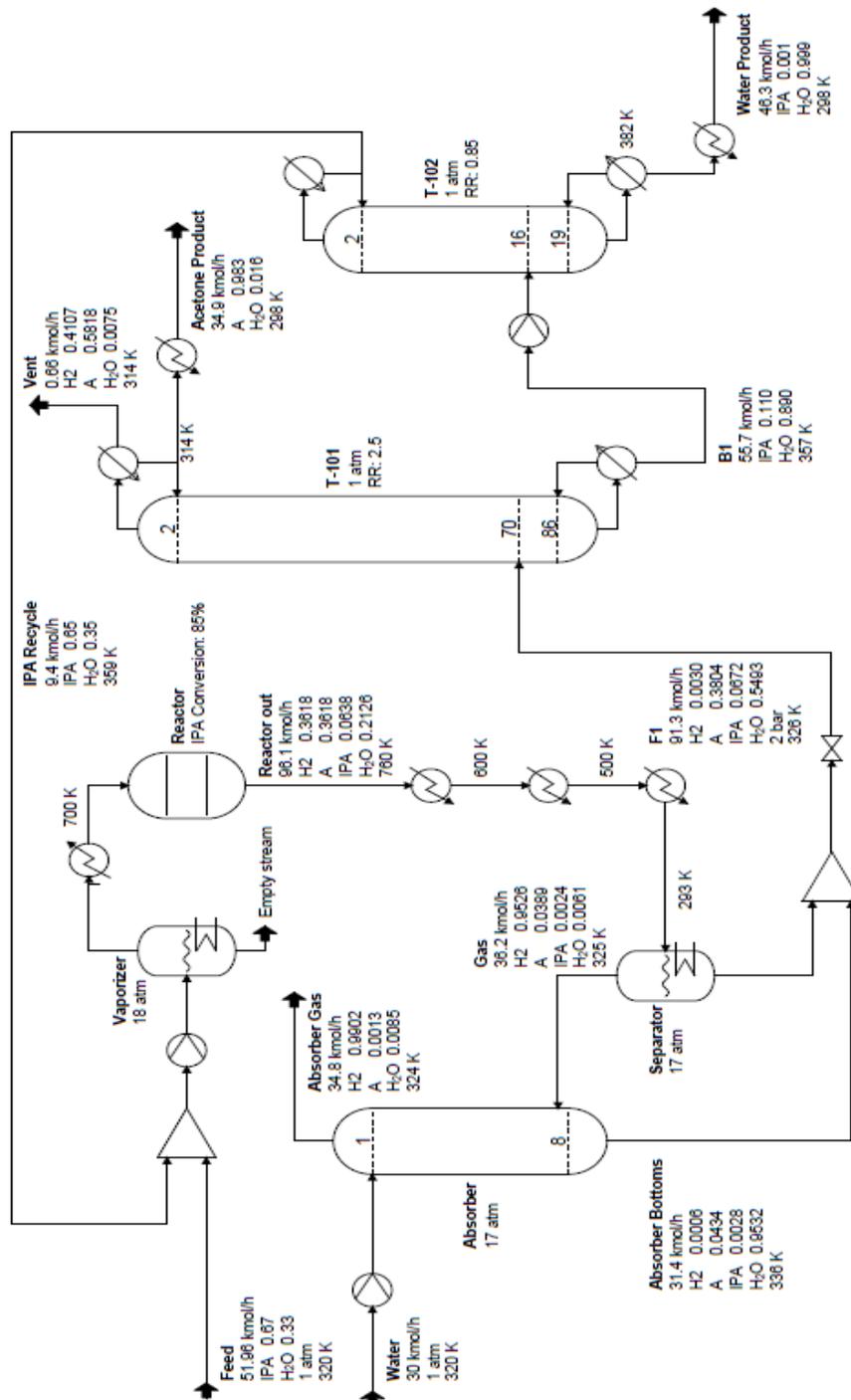
Figura 3.2: Design Turton.

Fonte: Adaptado de TURTON et al. (2003).

Porém, neste trabalho será considerado o fluxograma revisado por LUYBEN (2011), no qual a pressão do absorvedor é aumentada para reduzir as perdas totais de acetona.

O design discutido por TURTON et al. (2003) não foi otimizado do ponto de vista econômico, pois a perda de acetona é bastante alta e a refrigeração é necessária em um trocador de calor. Um parâmetro óbvio alterado foi a pressão do absorvedor. A Figura 3.3

fornece este fluxograma revisado por LUYBEN (2011) para um projeto no qual a pressão do absorvedor é aumentada para 17 atm.



**Figura 3.3:** Design revisado por Luyben.

**Fonte:** Adaptado de LUYBEN (2011).

### 3.3.1. Efeito da Pressão no Absorvedor

Como mencionado anteriormente, aumentar a pressão do absorvedor deve reduzir as perdas de acetona no efluente gasoso do absorvedor. Mas aumentará a pressão no reator, o que afeta negativamente a conversão. Para manter a conversão em 85%, a temperatura do reator deve ser aumentada. Pode haver uma limitação máxima de temperatura devido à perda de atividade do catalisador. HOWARD (2001) fornece temperaturas típicas de operação do reator de 673-773 K, então se determinou que a temperatura do meio aquecedor do reator não pode ser superior a 760 K. Vale ressaltar que a temperatura do meio de aquecimento no projeto Turton é de 624 K, o que está bem abaixo dessa limitação (LUYBEN, 2011).

Aumentar a pressão do absorvedor também aumentará a pressão e a temperatura no vaporizador, o que significa que uma fonte de energia mais alta e mais cara deve ser usada. Por outro lado, uma pressão maior no absorvedor deve significar que algum vapor pode ser gerado a partir do efluente do reator. Além disso, a água de resfriamento em vez da refrigeração pode ser usada no condensador, porque não é necessária uma temperatura baixa na pressão mais alta. Através de estudos, LUYBEN (2011) determinou a pressão no absorvedor de 17 atm para esta planta.

A essa pressão de 17 atm no absorvedor, a temperatura do vaporizador aumentou para 456 K a partir do projeto Turton de 389 K. O vapor de baixa pressão a 433 K pode ser usado no projeto Turton, no qual a carga térmica no vaporizador é de 0,7577 MW. O vapor de alta pressão a 527 K deve ser usado no projeto de 17 atm, no qual o calor é de 0,866 MW. O vapor de baixa pressão custa US \$ 7,78 por GJ. O vapor de alta pressão custa US \$ 9,83 por GJ. Portanto, o custo de energia do vaporizador é maior no projeto de 17 atm (LUYBEN, 2011).

Entretanto, o vapor de baixa pressão pode ser gerado no primeiro trocador de calor pelos gases quentes que saem do reator, em vez de desperdiçar o calor usando água de resfriamento. Segundo LUYBEN (2011), o consumo de calor neste gerador de vapor é de 0,4944 MW, o que constitui um crédito de energia. Além disso, a refrigeração não é necessária no segundo trocador de calor. O projeto Turton requer 0,2203 MW de refrigeração, a um custo de US \$ 4,2 por GJ.

O aumento da pressão do absorvedor também requer um aumento na temperatura do reator para manter a conversão de 85% por passagem de IPA. O consumo de energia do reator aumenta de 0,960 MW no projeto Turton para 1,098 MW no projeto de 17 atm. Um custo de energia de US \$ 9,83 por GJ é considerado necessário em todos os projetos (LUYBEN, 2011).

As temperaturas mais altas do reator requerem um aumento na temperatura do meio de aquecimento no reator. Se houver uma restrição máxima de temperatura do catalisador, isso poderá impor restrições à pressão máxima do absorvedor. No design de Turton, a temperatura do meio de aquecimento é de 624 K. No design de 17 atm, a temperatura do meio de aquecimento é de 760 K. Os valores de literatura da temperatura de operação indicam um intervalo de 673 a 773 K, de modo que o projeto de 17 atm está nesse limite.

### **3.3.2. Efeito da Água como Solvente e dos Estágios no Absorvedor**

Os dois parâmetros de otimização de projeto no absorvedor são a vazão da corrente de água e o número de estágios. Pouca melhora na recuperação de acetona foi observada aumentando o número de estágios acima de 10.

Aumentar a vazão da corrente de água deve recuperar mais acetona, porém o consumo de água aumentará os custos de aquisição, mas a água de processo é muito barata (US\$ 0,067 por 1000 kg). Uma vazão de 30 kmol/h corresponde a uma conta de água de apenas US\$ 317 por ano (LUYBEN, 2011).

A Tabela 3.2 mostra o efeito da água nas perdas de acetona e nas tarefas de calor do reboiler. A perda de acetona é minimizada usando 30 kmol/h de água no absorvedor. Há um pequeno aumento de 2% na taxa do reboiler na primeira coluna de destilação indo de 20 a 30 kmol/h. O dever do reboiler na segunda coluna é essencialmente constante.

<b>Vazão de Água Absorvedor (kmol/h)</b>	<b>Perda Acetona Efluente Absorvedor (kmol/h)</b>	<b>Perda Acetona Corrente Ventilação (kmol/h)</b>	<b>Perda Total Acetona (kmol/h)</b>
20	0,1241	0,4383	0,5624
25	0,0522	0,4581	0,5103
28	0,0225	0,4698	0,4923
30	0,0103	0,4776	0,4879
32	0,0040	0,4854	0,4894
35	0,0008	0,4970	0,4978

**Tabela 3.2:** Efeitos da Água no Absorvedor<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Pressão do Absorvedor = 17 atm; 300 tubos no reator.

**Fonte:** Adaptado de LUYBEN (2011).

### 3.3.3. Efeito do Tamanho do Reator

A variável de otimização do projeto final na seção de reação do processo é o tamanho do reator.

Como a conversão no reator é fixada em 85% e a pressão do reator é fixada em 18 atm pela pressão do absorvedor de 17 atm, a temperatura requerida do reator não muda à medida que o número de tubos é alterado. O calor necessário também não muda. Assim, a única coisa que aumenta à medida que o número de tubos diminui é a temperatura do meio de aquecimento. Uma vez que a energia de alta temperatura é usada para fornecer este calor (forno de queima), o nível de temperatura não afeta o custo de energia.

No entanto, isso afeta as temperaturas da parede no reator, o que poderia afetar a atividade do catalisador se existir uma limitação de alta temperatura. A literatura sugere um limite de 773 K.

Utilizando 300, 250, 200, 150 e 100 tubos no reator obtêm-se temperaturas do meio de aquecimento de 752, 754, 761, 778 e 826 K, respectivamente. Portanto, um reator com 200 tubos é selecionado para estar bem abaixo da limitação máxima de temperatura do catalisador. O custo de capital do reator no projeto Turton com 450 tubos é de US\$ 378.000. O custo de capital do reator de 200 tubos é de US\$ 223.000 (LUYBEN, 2011).

### **3.3.4. Design Ideal de Destilação**

O número de bandejas nas colunas de destilação no projeto de 17 atm que produziu o custo total anual mínimo foi determinado por LUYBEN (2011). Os custos de capital e energia foram calculados para um intervalo de número de etapas.

O número ideal de estágios na primeira coluna C1 foi 87, o que é 20 a mais que no desenho de Turton. O número ideal de estágios na segunda coluna C2 foi encontrado para ser 20, o que é o mesmo que no projeto Turton.

## CAPÍTULO 4 – SIMULAÇÃO, ANÁLISE E MELHORIA ECONÔMICA DO PROCESSO

### 4.1 – Simulador COCO

A simulação de processos assistida por computador é uma das mais importantes ferramentas tecnológicas no contexto da moderna Engenharia, podendo ser utilizada na síntese, análise e melhoria de processos, com relativo sucesso dado o grau de maturidade dos simuladores de processo disponíveis atualmente. Entretanto, a ênfase até então no desenvolvimento de simuladores tem sido no pacote de propriedades termodinâmicas e nas operações unitárias mais comuns da indústria química.

Neste trabalho, o software escolhido foi o COCO (*Cape Open to Cape Open*), visto que é um software gratuito e possui comunicação com outros softwares, aumentando e melhorando suas possibilidades. O COCO foi criado através do protocolo CAPE OPEN (*Computer Aided Process Engineering*) de maneira computacional, mas este apresenta um ambiente de simulação de fluxograma totalmente funcional. Todos esses cálculos são feitos através de interfaces CAPE-OPEN. Esta configuração permite a utilização de cada um dos componentes do COCO em combinação com qualquer outro equivalente CAPE-OPEN, compatível aos componentes.

O software COCO é um ambiente gratuito de simulação no estado estacionário, consistindo nos seguintes componentes:

- **COFE (*CAPE OPEN Flowsheet Environment*):** Ambiente de Fluxograma CAPE-OPEN é uma interface intuitiva a fluxogramas de plantas químicas com o usuário. COFE possui algoritmos de solução sequenciais que usam abertura automática de correntes. COFE mostra as propriedades das correntes, lida com conversão de unidades e provê funcionalidades de realizar gráficos. Fluxogramas COFE podem ser usados como uma operação unitária CAPE-OPEN, portanto, podem-se utilizar fluxogramas COFE como uma operação unitária dentro de outro fluxograma COFE (fluxograma dentro de um fluxograma), ou dentro de outros simuladores.

- **TEA (*Thermodynamics for Engineering Applications*):** Termodinâmica disponível no COCO para aplicações em engenharia. É baseado no código da biblioteca termodinâmica

do ChemSep e inclui um banco de dados de mais de 190 compostos químicos comumente usados. O pacote exibe mais de 100 métodos de cálculos de propriedades com suas derivadas analíticas ou numéricas.

- **COUSCOUS (*CAPE OPEN Unit-Operations Simple*):** Pacote de Operações Unitárias Simples CAPE-OPEN que acompanha o COCO. Contém um divisor de correntes (splitter), um misturador de correntes (mixer), trocadores de calor (heat-exchangers), bombas (pumps) e reatores (reactors), dentre outras operações unitárias. ChemSep-LITE, uma versão limitada do ChemSep, suportando um máximo de 10 componentes e 150 estágios, serve como uma operação unitária de destilação em equilíbrio no COCO. ChemSep-LITE está incluído na instalação do COCO.

- **CORN (*CAPE OPEN Reaction Numerics*):** Pacote Numérico de Reações CAPE-OPEN que acompanha o COCO e que facilita a especificação de qualquer tipo de cinética, ou de reação no equilíbrio. Unidades simples de reação, como reatores de equilíbrio, CSTR e reatores de escoamento empistonado (PFR), que podem usar o pacote CORN, acompanham o pacote COUSCOUS.

Para o presente estudo, o COCO será utilizado a fim de melhorar a planta do processo de produção da acetona via desidrogenação do 2-propanol (IPA). Vale ressaltar que o COCO não dispõe de nenhuma ferramenta específica para realizar estudos de otimização, mas sim de algumas ferramentas genéricas comuns aos simuladores em busca de melhorias no processo, porém não no sentido de otimização. Portanto, foram estudadas formas de se obter tal objetivo em conjunto com o software, onde o pacote das propriedades termodinâmicas utilizadas para a planta em questão é indicado na Figura 4.1.

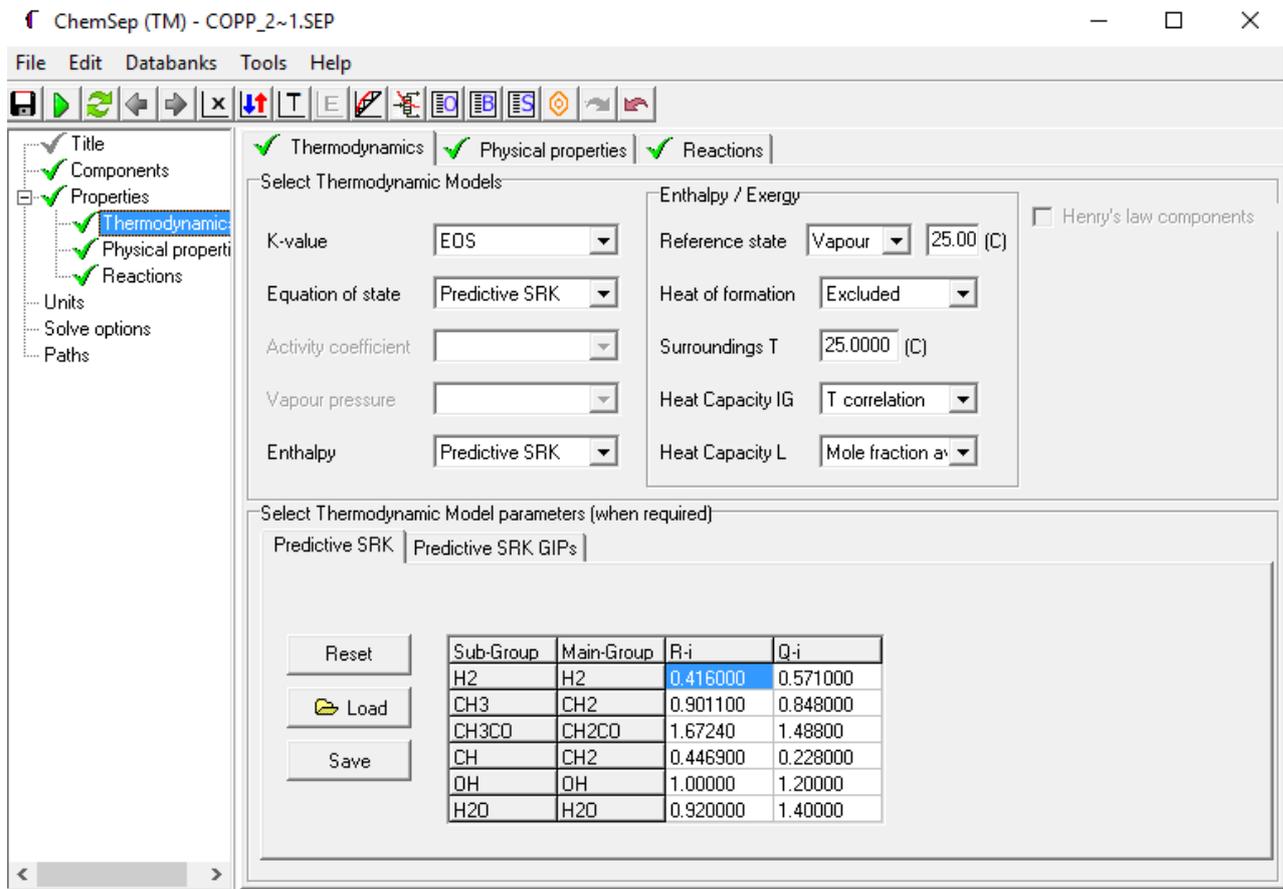


Figura 4.1: Propriedades termodinâmicas específicas utilizadas na planta.

## 4.2 – Operações Unitárias

- **Reator:** É utilizado um reator multitubular de conversão fixa. Nesse tipo de equipamento cada tubo é preenchido com um catalisador sólido e a transferência de calor ocorre na parte interna do reator. Este é alimentado por uma corrente de IPA e água a 700 K, e opera isotermicamente a 760 K. A temperatura é mantida constante por meio de aquecedores que circulam ao redor dos tubos com operação semelhante a um trocador de calor para a reação endotérmica. O calor fornecido para o reator é de 0,708 MW e a conversão foi fixada em 0,85.

- **Tanque Flash / Separador:** Dentro dos tipos de destilação, a destilação flash é conhecida como destilação integral ou em um estágio com o objetivo de promover um equilíbrio termodinâmico entre fases. Esta é uma operação limitada que efetua uma separação

pequena entre os componentes de mistura (CALDAS, et al., 2007). A corrente que chega ao tanque flash é uma mistura de quatro componentes: acetona, hidrogênio, água e IPA. Como o hidrogênio tem um ponto de ebulição muito menor que de todos os outros componentes, a corrente de topo do separador está rica neste componente, com teor de 0,952% mol de hidrogênio e 0,0389% mol de acetona. O tanque é operado a uma pressão de 17 atm.

- **Torre de Absorção:** A coluna de absorção opera adiabaticamente em média/alta pressão de 17atm com o intuito de reduzir as perdas de acetona. Esta coluna não é muito robusta, apresentando apenas oito estágios, pois segundo LUYBEN (2011), a partir de 10 estágios não ocorre aumento significativo na recuperação de acetona. No prato de número 8 (base da coluna) é alimentada uma corrente de vapor com 0,953% mol de hidrogênio e 0,039% mol de acetona, e no prato de número 1 (topo da coluna) é alimentado uma corrente de 30 kmol/h de água. O solvente água é utilizado devido a grande solubilidade da acetona neste.

- **Vaporizador:** O vaporizador tem a função de vaporizar todo o líquido que nele é alimentado, operando a uma pressão de 18 atm. Um pouco mais deste equipamento será abordado na integração energética.

- **Torres de Destilação:** Neste projeto existem duas colunas de destilação, operando ambas a 1 atm. A primeira coluna é bastante robusta, com 87 estágios, sendo que a alimentação é feita no estágio 70. Os quatro componentes estão presentes nela (água, IPA, acetona, e quantidades mínimas de hidrogênio). O produto de topo é composto por acetona com fração de 0,983% mol e água com 0,016% mol. No condensador existe uma pequena corrente de ventilação, na qual é retirado o hidrogênio remanescente que foi dissolvido no líquido. O condensador desta coluna opera com uma taxa de refluxo de 2,5 e a especificação para recuperação do IPA é de 0,999% mol. A segunda coluna de destilação realiza a separação dos componentes IPA e água. O produto de topo é uma corrente de reciclo para a recuperação de IPA, sua composição é próxima da azeotrópica com 0,65% mol de IPA e 0,35% mol de água, com isso ela apresenta apenas 20 estágios, sendo que a alimentação é

feita no décimo sexto. No condensador a taxa de refluxo é de 0,85 e a fração molar que sai juntamente com a água como produto de fundo é de 0,001% mol.

### 4.3 – Análise e Melhoria Econômica

Conforme dito anteriormente, no simulador COCO não existem otimizações no sentido estrito da palavra, e sim estudos de sensibilidade paramétrica, dos quais é possível obter algumas conclusões a fim de aprimorar a planta de produção de acetona.

#### 4.3.1 – Vazão de Alimentação de IPA

No primeiro estudo paramétrico, foi alterada na variável de entrada as proporções de IPA e água no sentido de diminuir as perdas totais de acetona. Para isso, foram realizados alguns cálculos no Excel, com base nos dados da planta, e os resultados encontrados são apresentados na Tabela 4.1.

Fração de IPA no Feed	Vazão de IPA no Feed (kmol/h)	Perda de Acetona no Absorvedor (kmol/h)	Perda de Acetona na Ventilação (kmol/h)	Perda Total de Acetona (kmol/h)
0,500385	26	0,001685	0,450521	0,452206
0,538876	28	0,004197	0,435823	0,440019
0,577367	30	0,009861	0,421162	0,431023
<b>0,615858</b>	<b>32</b>	<b>0,020623</b>	<b>0,406563</b>	<b>0,427186</b>
0,654349	34	0,037213	0,392013	0,429226
0,692841	36	0,058797	0,377521	0,436318
0,731332	38	0,084059	0,363067	0,447127
0,769823	40	0,111915	0,348652	0,460566

**Tabela 4.1:** Efeito da vazão de IPA na perda de acetona.

**Fonte:** Desenvolvido pelo autor.

Pôde-se notar que ao aumentar a vazão de IPA e, conseqüentemente sua fração na corrente de alimentação, conseguiu-se determinar os valores de vazão em kmol/h de perda de acetona no absorvedor e na corrente de ventilação, obtendo assim a perda total de acetona na planta. Baseado nos critérios de melhoria, diminuir essa perda total é essencial para se conseguir aumentar a produção de acetona.

No fluxograma original apresentado por LUYBEN (2011), a vazão utilizada de IPA na alimentação foi de 34,81 kmol/h com uma perda total de 0,431569 kmol/h. E com o estudo parametrizado apresentado na Tabela 4.1, determinou-se uma vazão de IPA de 32 kmol/h relacionada a uma perda total de 0,427186 kmol/h.

Com o intuito de obter valores mais precisos, foram feitos os mesmos cálculos iterativos em um intervalo de vazão de IPA menor, variando entre 30 e 34 kmol/h. Sendo possível validar a vazão de IPA na corrente de alimentação de 32,25 kmol/h com uma perda total de 0,427122 kmol/h, conforme Tabela 4.2. Trabalhando com esses valores na planta de acetona, é evitado um desperdício de 2240,08 kg ao ano de produto. Segundo o site mundial de cotação de matérias químicas S&P GLOBAL PLATTS, o valor comercial da acetona é de US \$ 937/ton, gerando assim uma economia de US \$ 2098,95 ao ano ou aproximadamente R\$ 8000 anuais.

Vazão de IPA no Feed (kmol/h)	Perda de Acetona no Absorvedor (kmol/h)	Perda de Acetona na Ventilação (kmol/h)	Perda Total de Acetona (kmol/h)
30,00	0,009860972	0,421162084	0,431023
30,25	0,010895012	0,419333439	0,430228
30,50	0,012013777	0,417505163	0,429519
30,75	0,013220011	0,415678833	0,428899
31,00	0,014515978	0,413852347	0,428368
31,25	0,015903438	0,412027653	0,427931
31,50	0,017383625	0,410202989	0,427587
31,75	0,018957244	0,408379396	0,427337
32,00	0,02062449	0,406558138	0,427183
<b>32,25</b>	<b>0,022385066</b>	<b>0,404736649</b>	<b>0,427122</b>
32,50	0,02423822	0,402916541	0,427155
32,75	0,026182789	0,401096887	0,42728
33,00	0,028217243	0,399278261	0,427496
33,25	0,03033974	0,397459978	0,4278
33,50	0,032548175	0,395644246	0,428192
33,75	0,034840225	0,393827769	0,428668
34,00	0,037213407	0,392012915	0,429226

**Tabela 4.2:** Efeito da vazão de IPA na perda de acetona em menores intervalos.

**Fonte:** Desenvolvido pelo autor.

#### 4.3.2 – Pressão no Absorvedor

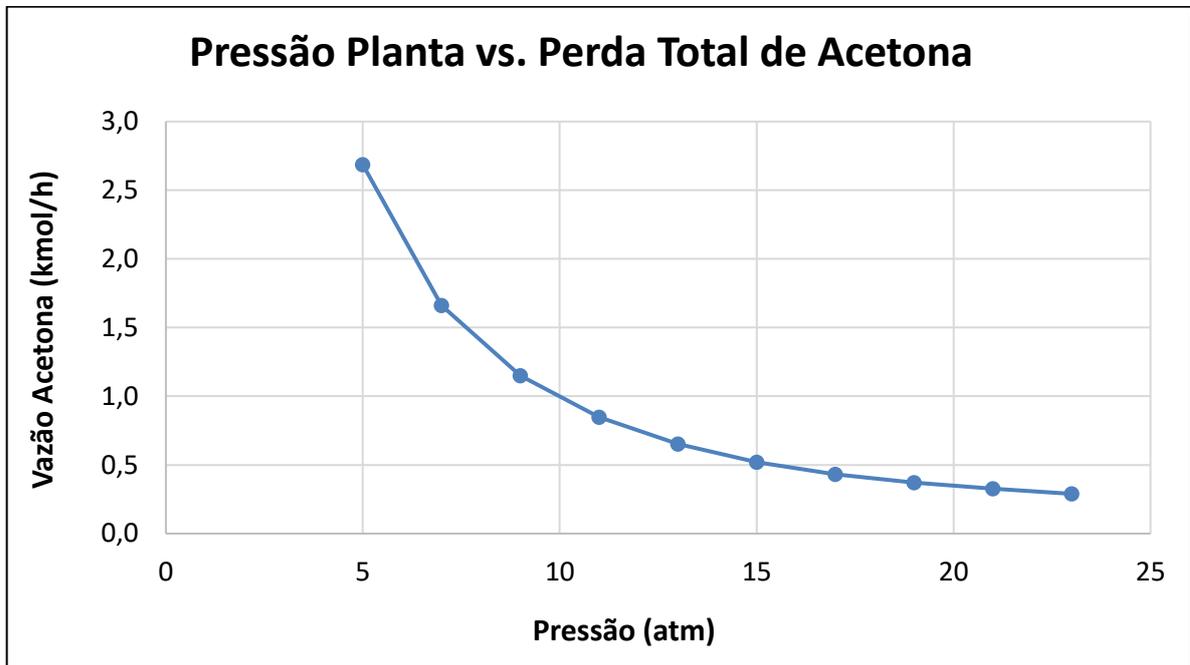
Seguindo na busca de melhorias da planta, foram realizados estudos para analisar qual o impacto da pressão na produção de acetona, assim como na perda do produto desejado em outras correntes.

A Tabela 4.3 apresenta os dados obtidos a partir desse estudo, onde é notado um aumento na quantidade de acetona produzida à medida que a pressão na planta é elevada.

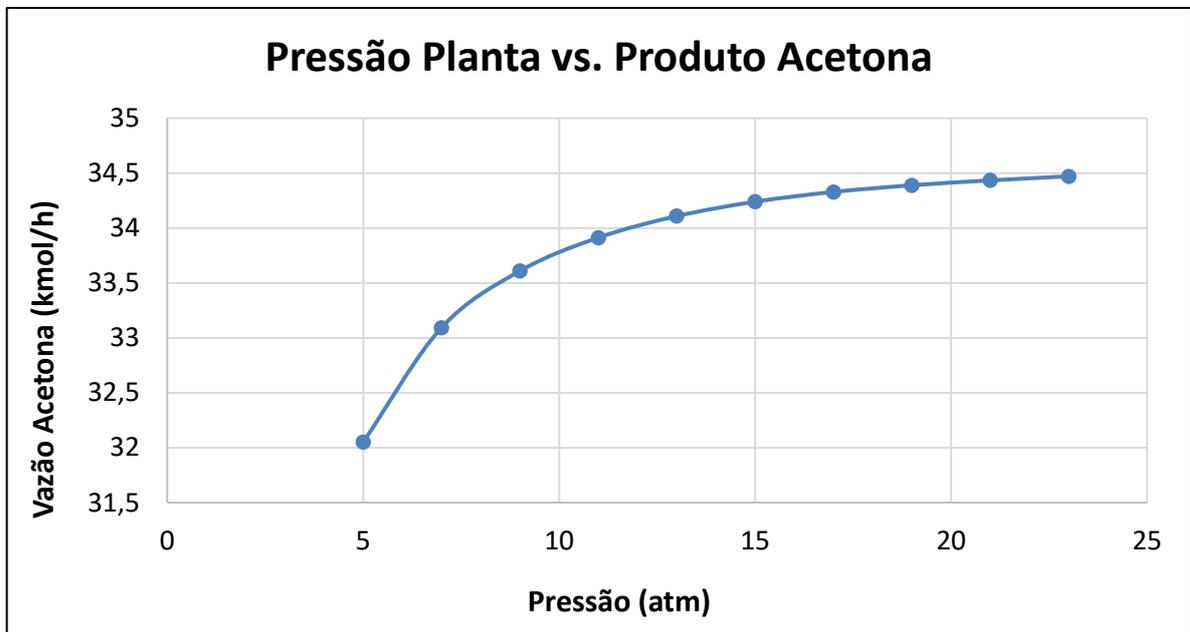
<b>Pressão (atm)</b>	<b>Vazão do Produto Acetona (kmol/h)</b>	<b>Perda de Acetona no Absorvedor (kmol/h)</b>	<b>Perda de Acetona na Ventilação (kmol/h)</b>	<b>Perda Total de Acetona (kmol/h)</b>
5	32,051	2,0990	0,586878	2,6859
7	33,0933	1,10693	0,553232	1,6602
9	33,6091	0,629632	0,519669	1,1493
11	33,9126	0,361121	0,486164	0,8473
13	34,1082	0,199353	0,45273	0,6521
15	34,2396	0,101335	0,419396	0,5207
<b>17</b>	<b>34,3287</b>	<b>0,045495</b>	<b>0,386105</b>	<b>0,4316</b>
19	34,3894	0,0179048	0,352946	0,3709
21	34,4338	0,00661338	0,319878	0,3265
23	34,4709	0,00252725	0,286816	0,2893

**Tabela 4.3:** Efeito da pressão na perda de acetona.

**Fonte:** Desenvolvido pelo autor.



**Figura 4.2:** Gráfico da influência da pressão da planta na perda total de acetona.



**Figura 4.3:** Gráfico da influência da pressão da planta na corrente do produto final acetona.

A partir dos dados apresentados na Tabela 4.3 foram plotados os gráficos das Figuras 4.2 e 4.3, onde nestas pode-se notar que à medida que a pressão aumenta, há simultaneamente um crescimento da produção de acetona e diminuição da perda total desta na planta.

Porém, devem-se levar em consideração os gastos energéticos e custo que estão aliados ao aumento gradativo da pressão, mesmo que haja uma corrente com mais produto final.

Assim, podemos ver através dos gráficos e dados de custos de energia (que serão abordados posteriormente neste trabalho), que partindo de 5 atm até alcançar a pressão de 17 atm, ocorre um aumento brusco da produção de acetona e também uma diminuição das perdas deste produto que segue o mesmo padrão. A partir de 17 atm é notado um pequeno aumento na produção de acetona e os custos com energia se elevam.

Com essa análise e estudo do efeito da pressão, é validado o valor de 17 atm utilizado por Luyben para esta planta, no intuito de produzir mais, reduzir perdas e equilibrar gastos energéticos.

#### **4.3.3 – Integração Energética**

A planta proposta por Luyben tem uma alta demanda energética, tanto em correntes quentes quanto em correntes de resfriamento. Além disso, um custo mais elevado é agregado devido ao aquecimento das operações unitárias, como no separador, reator, vaporizador e no primeiro trocador de calor, uma vez que o vapor requerido é de média/alta pressão. Já nos refeedouros das colunas de destilação, o vapor que fornece energia pode ser de baixa pressão, pois ambos operam à pressão de 1 atm.

A maior e mais importante melhoria na planta é a tentativa de minimizar ao extremo os gastos energéticos. Tendo em vista que vapor superaquecido é bem mais caro que água de resfriamento, inicialmente nossos esforços serão para reduzir a demanda de vapor superaquecido.

Em razão das especificações da planta, a reação de desidrogenação do isopropanol (IPA) ocorre em fase gasosa a altas temperaturas. Para que ocorra uma separação dos componentes após esta reação é necessário trabalhar com temperaturas menores ao longo da planta. Por este motivo, se gasta muita energia para aquecer e vaporizar a corrente de alimentação do reator, e posteriormente é preciso remover grande energia para resfriar os componentes da reação.

O simulador COCO fornece facilmente a carga térmica que cada operação unitária desprende, facilitando assim, uma análise de integração energética e custos de energia. A

Tabela 4.4 mostra as cargas térmicas da planta original proposta por Luyben conforme Figura 4.4.

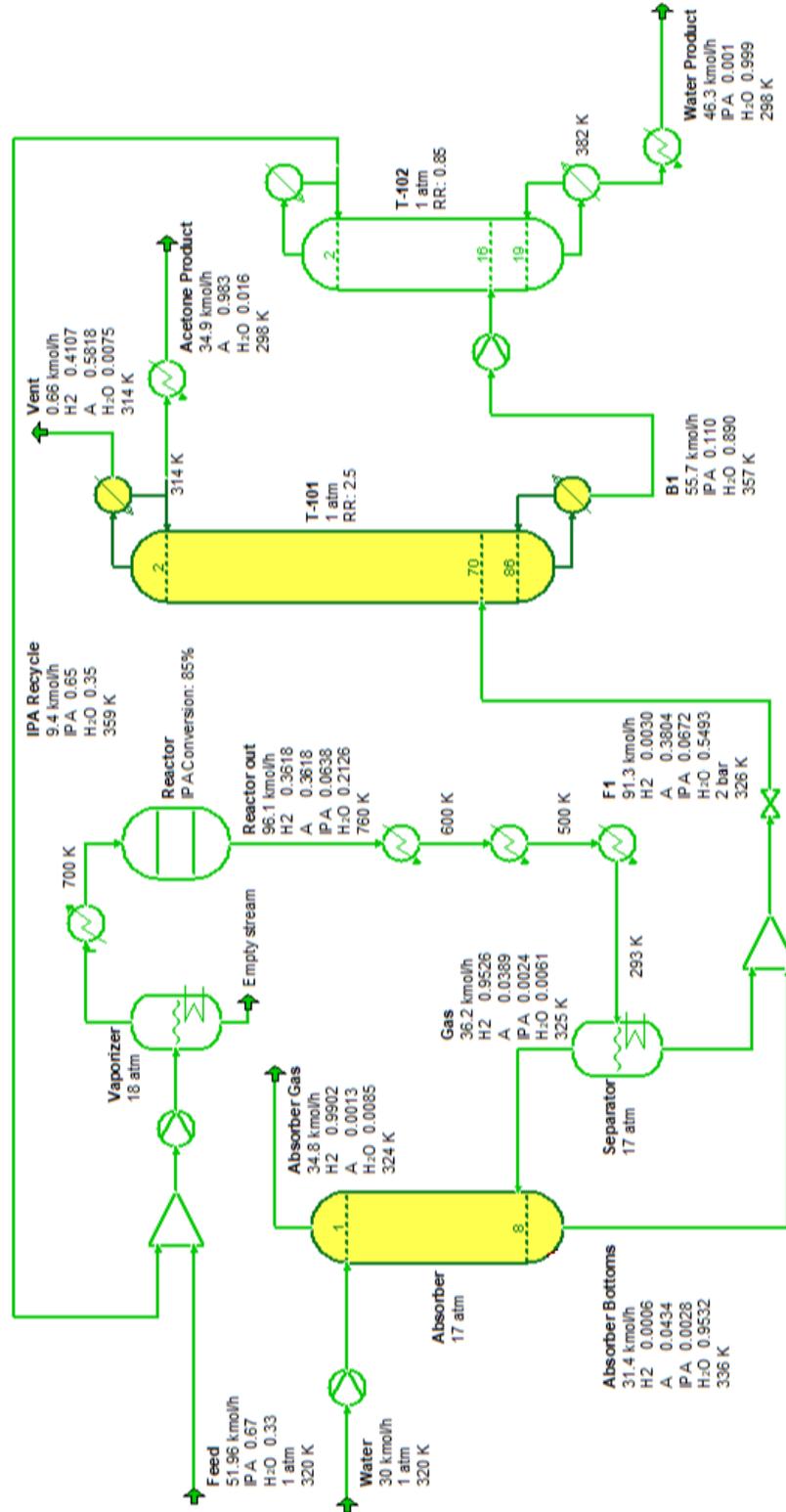


Figura 4.4: Planta proposta por Luyben no simulador COCO.

<b>Condição</b>	<b>Operação Unitária</b>	<b>Carga Energética (W)</b>	<b>Carga Térmica Total (W)</b>
<b>Pressão Média / Vapor Quente</b>	Vaporizador	862817	<b>2143362,978</b>
	Trocador (ant. Reator)	490691,2969	
	Reator	708749,081	
	Separador Flash	81105,6	
<b>Pressão Baixa / Vapor Quente</b>	Refervedor C1	1102770	<b>1319471</b>
	Refervedor C2	216701	
<b>Água de Resfriamento</b>	Trocador (resf. 1)	-331874,9515	<b>-2826399,477</b>
	Trocador (resf. 2)	-192703,2793	
	Trocador (resf. 3)	-924185,1422	
	Condensador C1	-1080720	
	Condensador C2	-196893	
	Trocador Prod. Ac.	-19056,92472	
	Trocador Prod. W.	-80966,17955	

**Tabela 4.4:** Cargas térmicas originais.

**Fonte:** Desenvolvido pelo autor.

Como apresentado na Tabela 4.4, o gasto energético com vapor de média/alta pressão é de 2,14 MW, já o vapor de baixa pressão tem gasto de aproximadamente 1,31 MW. Para a água de resfriamento, é necessário remover cerca de -2,82 MW da planta inteira.

Desta forma, através da utilização do simulador COCO e suas funcionalidades, foram efetuadas alterações na planta, onde houve a integração das correntes com o intuito de minimizar o gasto energético. As modificações são exibidas na Figura 4.5.

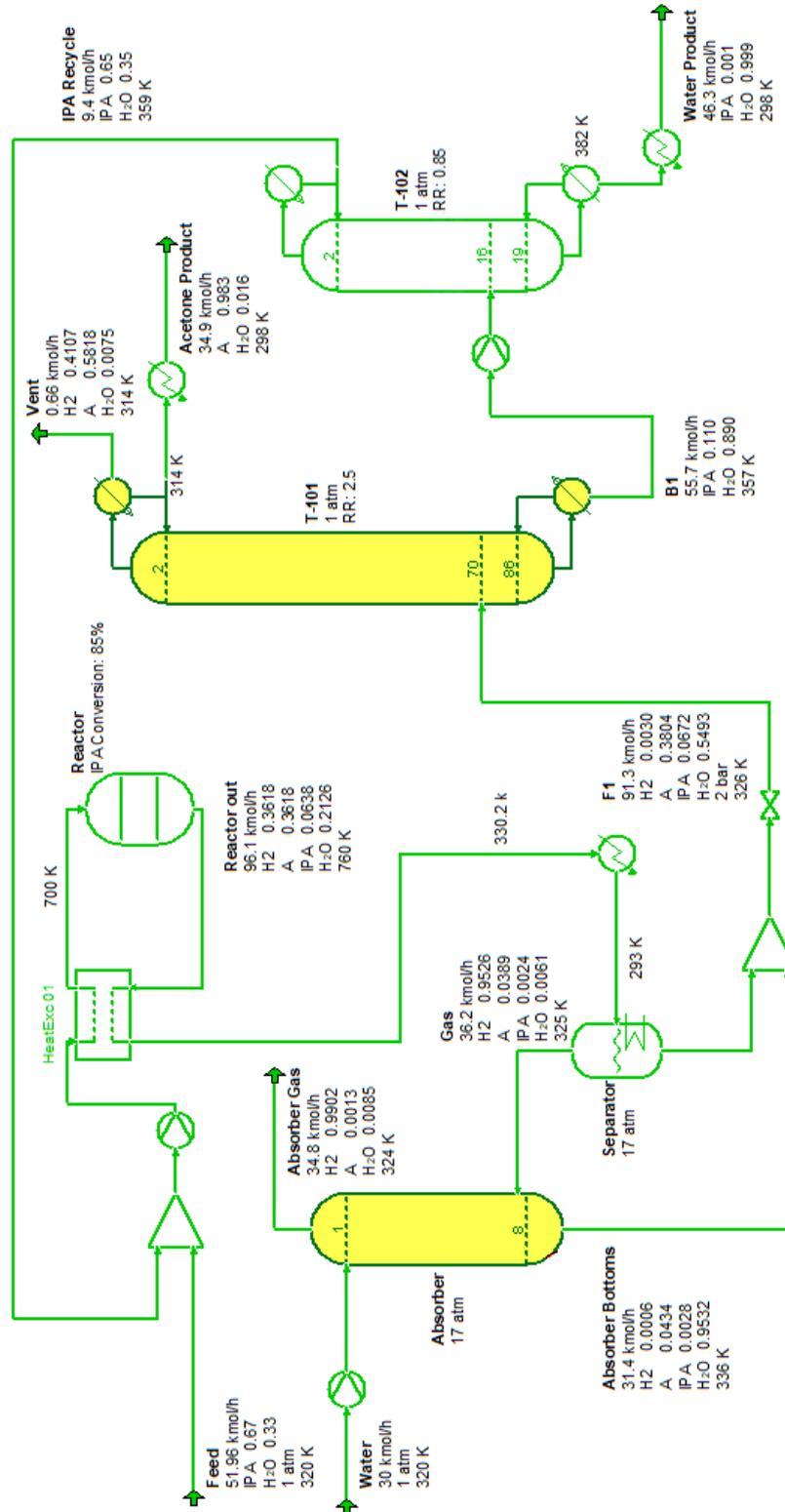


Figura 4.5: Planta com integração energética do simulador COCO.

A função do vaporizador na planta original é prover a quantia exata de energia para vaporizar toda a corrente de alimentação do reator, independente das condições de entrada da mesma. Foi optado por utilizar um trocador de calor (heat exchanger) no lugar do vaporizador, pois através da energia fornecida para o reator é possível fazer essa mudança. Além disso, foi possível eliminar o trocador de calor que pré-aquecia a corrente de alimentação do reator, e também dois dos três trocadores que resfriavam a mistura antes do separador flash. A corrente que sai do heat exchanger ainda tem calor para fornecer, mas os outros trocadores de calor (Water Product e Acetone Product) também querem fornecer energia. Assim, só resta o reator da T-101 para receber a energia, mas a temperatura do reator é de 357 K, portanto, maior que a temperatura da corrente de saída do heat exchanger (330,2 K). Porém, de acordo com a termodinâmica não é possível transferir calor espontaneamente nesse caso, pois a temperatura da corrente quente (a ser resfriada) é menor que a temperatura da corrente fria (a ser aquecida).

Nessa planta, como há poucos trocadores de calor, não foi necessário aplicar a metodologia Pinch, pois foi possível fazer a integração energética pareando manualmente as correntes quentes e frias. As modificações foram realizadas visando reduzir o gasto energético das correntes com pressão mais elevada, pois estas têm maiores custos e, conseqüentemente, maior redução de gastos.

Na Tabela 4.5 é apresentado um comparativo de antes e depois das mudanças relacionadas aos gastos energéticos.

-	-	<b>ORIGINAL</b>	<b>MODIFICADA</b>
<b>Condição</b>	<b>Operação Unitária</b>	<b>Carga Energética (W)</b>	<b>Carga Energética (W)</b>
<b>Pressão Média / Vapor Quente</b>	Vaporizador	862817	0
	Trocador (ant. Reator)	490691,2969	0
	Reator	708749,081	708749,609
	Separador Flash	81105,6	81105,6
	<b>TOTAL</b>	<b>2143362,978</b>	<b>789855,209</b>
<b>Pressão Baixa / Vapor Quente</b>	Refervedor C1	1102770	1102770
	Refervedor C2	216701	216701
	<b>TOTAL</b>	<b>1319471</b>	<b>1319471</b>
<b>Água de Resfriamento</b>	Trocador (resf. 1)	-331874,9515	0
	Trocador (resf. 2)	-192703,2793	0
	Trocador (resf. 3)	-924185,1422	-95256,2071
	Condensador C1	-1080720	-1080720
	Condensador C2	-196893	-196893
	Trocador Prod. Ac.	-19056,92472	-19056,92472
	Trocador Prod. W.	-80966,17955	-80966,17955
	<b>TOTAL</b>	<b>-2826399,477</b>	<b>-1472892,311</b>

**Tabela 4.5:** Comparativo com e sem integração energética.

**Fonte:** Desenvolvido pelo autor.

Na Tabela 4.6 são mostradas as estimativas de preço do vapor superaquecido que podem ser usados na planta.

Utilidades	Preço
Vapor alta pressão	US\$ 9,83 / GJ
Vapor média pressão	US\$ 8,22 / GJ
Vapor baixa pressão	US\$ 7,78 / GJ
Água de resfriamento	US\$ 0,354 / GJ

**Tabela 4.6:** Estimativa dos preços de utilidades.

**Fonte:** LUYBEN (2011).

Para a planta original, o gasto total de energia de média/alta pressão é de 66667,16 GJ por ano, com um custo de US\$ 548004 dólares. Já a de baixa pressão, demanda 41040,82 GJ por ano custando cerca de US\$ 319297 dólares. É necessário ainda computar o gasto com a água de resfriamento, que requer -87912,33 GJ por ano com custo de US\$ 31120, totalizando assim, aproximadamente **US\$ 898421 dólares anuais** com gastos energéticos.

Após as modificações implantadas, os gastos energéticos e custos com a planta integrada para energia de média/alta pressão foram alterados para 24567,65 GJ anuais com custo de US\$ 201946 dólares. O vapor de baixa pressão não foi alterado. Deve-se considerar também a água de resfriamento com necessidade de remover -45812,84 GJ anuais e custo de US\$ 16217 dólares. Logo, para a planta integrada energeticamente será gasto aproximadamente **US\$ 537460 dólares anuais**.

Estabelecendo uma comparação entre o antes e o depois da integração energética na planta de produção de acetona, a redução da demanda energética para vapor de média/alta pressão foi de 63,15%. Analisando em custo o impacto na planta como um todo, se obteve uma redução aproximada de 40,18%, que representa uma economia de **US\$ 360961 dólares por ano**. É válido ressaltar que foram reduzidos dois trocadores de calor.

#### 4.3.4 – Reciclo da Água

A corrente que sai do separador flash e entra na base do absorvedor está em fase gasosa e é rica em hidrogênio, porém contém quantidades significativas de acetona. Para fazer a

recuperação dessa acetona é utilizada uma corrente de água alimentada no topo da coluna de absorção. Contudo, ao analisarmos a planta podemos observar que dispomos de uma fonte de água com alta pureza que sai da base da segunda coluna de destilação. A partir disso, foi efetuada uma tentativa de modificar a planta com a finalidade de reciclar essa água, conforme apresentado na Figura 4.6.

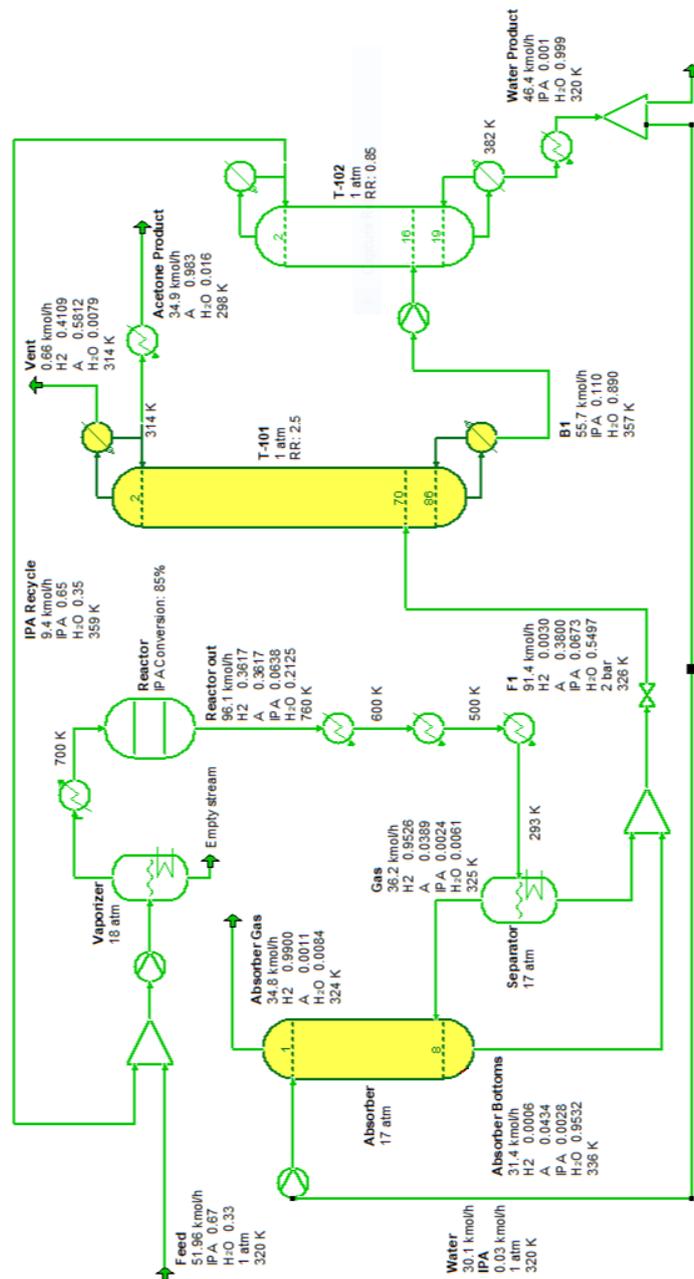


Figura 4.6: Planta com utilização do reciclo da água.

Para essa simulação, podemos observar que o produto de fundo da segunda coluna de destilação tem uma corrente com 46,3 kmol/h de água, e na entrada do absorvedor a corrente é de 30kmol/h. Deste modo, foi adicionado um spliter para manter a entrada em apenas 30 kmol/h, a fim de não afetar os balanços de massa nem outros reciclos da planta. A compilação procedeu corretamente sem alterações muito significativas.

No ponto de vista monetário essa modificação é irrisória, pois o preço da água nesse processo é muito baixo. Entretanto, com a crescente conscientização e busca por meios que atinjam a sustentabilidade, essa pequena mudança na planta pode ocasionar uma economia de aproximadamente 4,6 milhões de litros de água por ano.

## CAPÍTULO 5 – CONCLUSÕES

Ao longo deste trabalho foi abordado um processo de obtenção de acetona via desidrogenação do 2-propanol proposto por LUYBEN (2011), além de modificações com o objetivo de melhorar este processo baseado na diminuição de gastos energéticos, e também em fator de sustentabilidade. Foram efetuados quatro estudos diferentes simulados no software COCO utilizando como referência as especificações apresentadas por LUYBEN (2011).

O primeiro estudo paramétrico foi no intuito de apenas mudar a fração da alimentação de IPA e água e, observar o comportamento nas perdas de acetona. Para esta modificação o resultado se mostra satisfatório, pois foi identificado um ponto de mínimo nas perdas totais de acetona, com a vazão de 32,25 kmol/h de IPA e fração em 0,6207% mol. A modificação proposta evita um desperdício de 2.240,08 kg anuais de acetona comparados com a planta original.

O estudo realizado da pressão na planta foi para compreender e também validar a escolha do LUYBEN (2011) por utilizar média/alta pressão. Através das figuras 4.2 e 4.3, combinados com o estudo dos custos do vapor em diferentes pressões, foi possível a validação para operar a planta em 17 atm. Visto que o aumento da pressão traz um crescimento abrupto da produção de acetona na faixa de 5 a 17 atm, e o incremento da pressão após essa faixa não causa um aumento significativo na produção da mesma.

A modificação mais importante na planta, seguramente, é a integração energética. Nos quesitos de custos fixos, foi possível a redução de três trocadores de calor e a substituição de um tanque de vaporização por apenas um trocador de calor. Já em termos de custos anuais, em relação ao valor gasto com vapor de média pressão para aquecimento de trocadores de calor, foi possível reduzir em 63,15% da demanda energética. Em termos totais da planta, se obteve uma redução de 40,18% nos custos de energia, que representam uma economia de aproximadamente US\$ 360.961 dólares anuais. Assim, se tem um resultado muito expressivo para as modificações realizadas nesta planta.

Por último, se tem uma reciclagem da água de alta pureza que sai como produto de fundo da segunda coluna de destilação, onde esta é utilizada como água de recuperação de acetona no absorvedor. O impacto nos custos da planta é irrelevante, entretanto visando uma

planta com maior sustentabilidade, esta modificação oferece uma redução em 4,6 milhões de litros de água gasta no processo todos os anos.

Como podemos observar, todas as modificações são de extrema importância na redução de gastos e, se mostraram bastantes eficientes no seu propósito, viabilizando ainda mais a produção de acetona via desidrogenação do IPA, visto que esta rota não é a rota mais utilizada na atualidade, tornando-a um pouco mais atrativa do que a planta original.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ACKER, A. et al. **Hock-Verfahren**. 1998. Disponível em: <<https://www.spektrum.de/lexikon/chemie/hock-verfahren/4136>>. Acesso em: 4 de dezembro de 2018.

BARCZA, M. V. **Oxidação**. São Paulo: PQI-III, p.12, 2012.

BAUER JR, W. **Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry**. Wiley-VCH, Weinheim, 2002.

CALDAS, J. N. et al. **Internos de Torres: Pratos e Recheios**. 2 ed. Rio de Janeiro: Interciência, 2007. p. 510.

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

CONANT, J. B.; TUTTLE, N. **Org. Synth.** 1941, Coll. Vol. 1, p. 199-345.

DIAS, R. F. **Avaliação de Ecoeficiência de Processos de Produção de Dimetil Éter Via Simulação Computacional**. 2017. 193 f. Dissertação de Mestrado – Pós Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal Fluminense, Niterói, RJ, Brasil, 2017.

HOWARD, W. L. Acetone. **Kirk –Othmer Encyclopedia of Chemical Technology**. Wiley: New York, 2001. Vol. 1, p. 160.

ICIS. **Isopropanol (IPA) Production and Manufacturing Process**. 2007. Disponível em: <<https://www.icis.com/explore/resources/news/2007/11/05/9076021/isopropanol-ipa-production-and-manufacturing-process>>. Acesso em: 16 de dezembro de 2018.

IHS MARKIT (Londres) (Org.). **Chemical Economics Handbook: Acetone**. 2016. Disponível em: <<https://ihsmarkit.com/products/acetone-chemical-economics-handbook.html>>. Acesso em: 13 de dezembro de 2018.

IHS MARKIT (Londres) (Org.). **Chemical Economics Handbook: Isopropyl Alcohol (IPA)**. 2015. Disponível em: <<https://ihsmarkit.com/products/isopropyl-alcohol-ipa-chemical-economics-handbook.html>>. Acesso em: 14 de dezembro de 2018.

LEROY, G. W. **Encyclopedia Britannica: Isopropyl Alcohol**. 1998. Disponível em: <<https://www.britannica.com/science/isopropyl-alcohol>>. Acesso em: 14 de dezembro de 2018.

LOKRAS, S. S.; DESPHANDE, P. K.; KULLOOR, N. R. **Catalytic Dehydrogenation of 2-Propanol to Acetone**. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop.*, vol. 9, n. 2, p. 293-297, abr. 1970.

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

MANGILI, P. V.; SOUZA, Y. P. D. M. **Avaliação de Ecoeficiência de Processos de Separação Acetona-Metanol Via Simulação**. 2016. 126 f. TCC (Graduação) – Curso de Engenharia Química, Engenharia Química da Escola de Engenharia da Universidade Federal Fluminense, Universidade Federal Fluminense, Niterói, 2016.

MILLER, R. J. **Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology**. 2 ed. Vol. 1. Interscience Publishers, New York, 1963.

OLIVEIRA, P. S. M.; FERREIRA, V. F.; SOUZA, M. V. N. **Quim. Nova** 2009, 32, 2042.

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

SIFNIADES, S.; LEVY, A. B. **Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry**. Wiley-VCH, Weinheim, 2002.

SMIDT, J.; HAFNER, W.; JIRA, R.; SEDLMEIER, J.; SIEBER, R.; RUTTINGER, R.; KOJER, H. **Angew. Chem.** 1959, 71, 176.

TURTON, R.; BAILIE, R. C.; WHITING, W. B.; SHAELWITZ, J. A. **Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes**. 2<sup>nd</sup> ed. Prentice Hall: Upper Saddle River, NJ, 2003.

VELLASCO JÚNIOR, W. T. **Acetona**. Revista Virtual de Química, Rio de Janeiro. Vol. 4, n. 3, p. 339-343, 6 out. 2011.