



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA



ANDRÉ LENZA SALLUM

**ANÁLISE TÉCNICO-ECONÔMICA DO PROCESSO DE PRODUÇÃO DO ÁLCOOL
ISOPROPÍLICO**

UBERLÂNDIA/MG

2023

ANDRÉ LENZA SALLUM

**ANÁLISE TÉCNICO-ECONÔMICA DO PROCESSO DE PRODUÇÃO DO ÁLCOOL
ISOPROPÍLICO**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários para a aprovação na disciplina Trabalho de Conclusão do Curso de Graduação em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Adilson Jose de Assis

UBERLÂNDIA/MG

2023

ANDRÉ LENZA SALLUM

**ANÁLISE TÉCNICO-ECONÔMICA DO PROCESSO DE PRODUÇÃO DO ÁLCOOL
ISOPROPÍLICO**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários para a aprovação na disciplina Trabalho de Conclusão do Curso de Graduação em Engenharia Química.

Uberlândia, 19 de janeiro de 2023.

Banca examinadora:

Adilson José de Assis – FEQUI/UFU

Sérgio Mauro da Silva Neiro – FEQUI/UFU

Thiago Vaz da Costa – FEQUI/UFU

RESUMO

O álcool isopropílico é um dos solventes mais utilizados do mundo e com um mercado global em ascensão. Com o aumento de sua importância, também surge a necessidade de analisar rotas de produção já existentes do composto a fim de otimizá-las, além de encontrar caminhos alternativos para aumentar sua eficiência e estudar sua viabilidade econômica. Com base em uma planta já existente, descreve-se a rota utilizada e algumas melhorias sugeridas para a produção. Além disso, estuda-se os parâmetros financeiros CAPEX, OPEX, VPL e *payback* a partir da planilha CAPCOST para determinar sua viabilidade. Após a análise econômica, obtém-se um CAPEX de \$30.910.000,00, um OPEX de \$203.871.545,00, um VPL de \$23.020.000,00 e um *payback* descontado de 2,7 anos. Conclui-se, assim, que a planta é viável economicamente. Ao analisar duas propostas de otimização energética do processo original, verifica-se que a planta com alimentação de água em excesso com a torre de destilação reativa apresenta vantagens econômicas significativas em relação à planta original, aumentando a viabilidade econômica do processo de produção de IPA.

Palavras-chave: Álcool isopropílico. Propileno. Viabilidade econômica. Parâmetros econômicos.

ABSTRACT

Isopropyl alcohol is one of the most widely used solvents in the world and with a growing global market. With the increase in its importance, there is also a need to analyze existing production routes of the compound in order to optimize them, in addition to finding alternative ways to increase its efficiency and study its economic viability. From an existing plant, the route used is described and some improvements suggested. In addition, CAPEX, OPEX, NPV and payback economic parameters are studied using the CAPCOST spreadsheet to determine the economic viability of the plant. After the economic analysis, a CAPEX of \$30,910,000.00, an OPEX of \$203,871,545.00, an NPV of \$23,020,000.00 and a payback of 2.7 years are obtained. Therefore, it is concluded that the plant is economically viable. Examining two proposals for energy optimization of the original process, it appears that the plant with water in excess with the reactive distillation tower has significant economic advantages over the original plant, increasing the economic viability of the overall IPA production process.

Keywords: Isopropyl Alcohol. Propylene. Economic Viability. Economic Parameters.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Primeira parte da simulação da planta de produção do isopropanol.....	12
Figura 2 – Segunda parte da simulação da planta de produção do isopropanol.....	13
Figura 3 – Captura de tela do sumário de correntes do processo.....	15
Figura 4 – Diagrama de fluxo de caixa do projeto.....	34
Figura 5 – Simulação Monte Carlo do valor presente líquido.....	35
Figura 6 – Simulação Monte Carlo da taxa de retorno descontada.....	36
Figura 7 – Simulação Monte Carlo do <i>payback</i> descontado.....	37
Figura 8 – Otimização da planta utilizando propileno em excesso.....	38
Figura 9 – Otimização da planta utilizando água em excesso.....	39

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Propriedades físico-químicas do álcool isopropílico.....	10
Tabela 2 – Parâmetros e áreas dos refeedores.....	22
Tabela 3 – Parâmetros e áreas dos condensadores.....	22
Tabela 4 – Parâmetros e áreas dos trocadores de calor.....	23
Tabela 5 – Parâmetros e volume do reator.....	25
Tabela 6 – Dados dos trocadores de calor.....	27
Tabela 7 – Dados das bombas.....	28
Tabela 8 – Dados do reator.....	28
Tabela 9 – Dados das torres.....	28
Tabela 10 – Custos estimados dos equipamentos.....	29
Tabela 11 – Custo das utilidades.....	31
Tabela 12 – Preço dos materiais do processo.....	32
Tabela 13 – Parâmetros econômicos da planta.....	33
Tabela 14 – Parâmetros para a estimativa de custo operacional.....	33
Tabela 15 – Dados para a Simulação de Monte Carlo.....	35

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	8
1.1 Objetivo Geral	9
1.2 Objetivos Específicos	9
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	10
2.1 Álcool Isopropílico	10
2.2 Planta de produção do álcool isopropílico	11
3 METODOLOGIA	16
3.1 Introdução à análise econômica	16
3.1.1 Custos de Capital de Investimento (CAPEX)	17
3.1.2 Custos Operacionais (OPEX)	18
3.1.3 <i>Payback</i> ou tempo de retorno	18
3.1.4 Valor presente líquido	19
3.1.5 Classe de Estimativa de Custos	19
3.2 Área dos trocadores de calor	20
3.3 Volume do Reator	23
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	26
4.1 Análise econômica	26
4.2 Otimização do processo	38
5 CONCLUSÃO	42
REFERÊNCIAS	43

1 INTRODUÇÃO

A indústria química, composta por uma série de setores como refino de petróleo, petroquímica, polímeros, agroquímicos, produtos biotecnológicos, etc., possui um dos maiores gastos energéticos do setor industrial. A maioria das plantas químicas foram construídas numa época em que os custos energéticos e preocupações ambientais não eram considerados. Com o avanço das tecnologias computacionais e de processos, há necessidade de verificar e melhorar o projeto de plantas já existentes, a fim de otimizá-las energeticamente e economicamente (NIU; RANGAIAH, 2016).

Então, é papel do engenheiro químico analisar e determinar a viabilidade técnica e econômica de uma planta química para fins de otimização energética. A análise técnico-econômica de uma planta engloba uma série de decisões, como a determinação de quais equipamentos serão utilizados, as utilidades necessárias, a rota utilizada no processo, a verificação de rotas alternativas e as estratégias termodinâmicas num ambiente de simulação. Os parâmetros econômicos também são levados em consideração, como os custos operacionais e de capital.

Dentre os inúmeros compostos que são produzidos pela indústria química, o álcool isopropílico chama atenção pelo seu crescente mercado global. Sua produção total chega aos 2,7 milhões de toneladas por ano, do qual um terço desse número é produzido pelos Estados Unidos, com 840 mil toneladas por ano, seguido pela Ásia com 800 mil toneladas por ano, sendo a Ásia o continente que mais consome o álcool isopropílico (GOMES, 2016). Além disso, o mercado do álcool isopropílico apresenta um crescimento estável com uma taxa anual de 7% e é esperado que esse aumento continue devido ao seu crescente uso na indústria farmacêutica (PANJAPAKKUL; EL-HALWAGI, 2018).

O álcool isopropílico também chama atenção por ser um dos solventes mais utilizados no mundo, além de ser utilizado nas indústrias da saúde, dos pesticidas e de tintas (DUTIA, 2012). A crescente preocupação com a saúde global devido à pandemia da COVID-19 ajudou a impulsionar o mercado de farmacêuticos no mundo, refletindo especialmente nas vendas de higienizadores e, assim, aumentando a busca global pelo álcool isopropílico. Vários países como Índia, Estados Unidos e Alemanha aumentaram seus gastos com farmacêuticos nos anos recentes, impulsionando o mercado global do álcool isopropílico (IPA) (MORDOR INTELLIGENCE LLP, 2021). Exemplificando esse crescente interesse, a Shell reativou sua planta química com

produção de 75 mil toneladas por ano de álcool isopropílico na Singapura, devido ao aumento da demanda por higienizadores de mão. Ainda, uma nova fábrica de álcool isopropílico de 45 mil toneladas por ano começou a ser construída na França, pela empresa Seqens (ALLIED MARKET RESEARCH, 2022).

Devido ao interesse crescente no composto, há a necessidade de avaliar as plantas químicas e rotas de produção já conhecidas no intuito de verificar as oportunidades de redução de gasto energético, sem comprometer a viabilidade técnico-econômica do processo.

1.1 Objetivo Geral

- Analisar a viabilidade técnico-econômica de uma planta de produção de álcool isopropílico após reconfiguração, tendo como objetivo a redução de gasto energético.

1.2 Objetivos Específicos

- Descrever e entender a rota utilizada, conferindo as vantagens e desvantagens;
- Realizar a análise econômica do processo pelas estimativas de CAPEX, OPEX, *payback* e VPL;
- Identificar possíveis melhorias tendo em vista a redução de gasto energético no processo.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Álcool Isopropílico

O álcool isopropílico (isopropanol, IPA) é um líquido incolor e inflamável com um odor característico de álcool/acetona, além de se misturar com a maioria dos solventes, inclusive com água (DUTIA, 2012). A Tabela 1 apresenta as principais propriedades físico-químicas do composto.

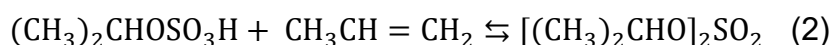
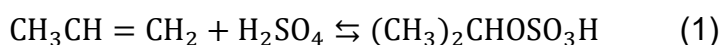
Tabela 1 – Propriedades físico-químicas do álcool isopropílico.

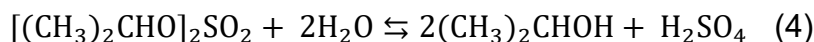
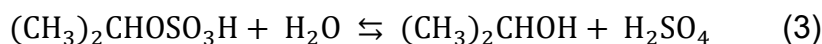
Fórmula	C ₃ H ₈ O
Peso molecular (g/mol)	60,10
Ponto de ebulição (°C)	82,4
Ponto de fusão (°C)	-89,5
Densidade relativa (g/cm ³) a 25 °C	0,786
pH (em 20°C)	Neutro
Solubilidade em água (em 20°C)	Solúvel

Fonte: MULTICHEMIE LTDA (s.d.).

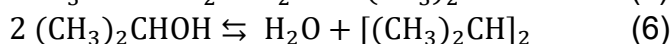
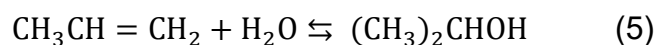
O isopropanol vem sendo produzido em larga escala a partir do propileno por duas rotas comerciais: hidratação indireta e hidratação direta do propileno (PANJAPAKKUL; EL-HALWAGI, 2018).

Em um processo de hidratação indireta, o propileno reage com ácido sulfúrico e forma uma mistura de ésteres (Equação 1 e Equação 2). A hidrólise subsequente desses ésteres por vapor produz isopropanol (Equação 3 e Equação 4) (LI *et al.*, 2018). Há a necessidade de atentar-se aos materiais de construção dos equipamentos para evitar corrosão, além do tratamento e descarte de alguns resíduos de processo, tais como: água residual, ácido sulfúrico residual e gases de escape. A principal vantagem desse tipo de processo é a capacidade de usar uma alimentação com baixa pureza de propileno (entre 40% e 60%) (PANJAPAKKUL; EL-HALWAGI, 2018).





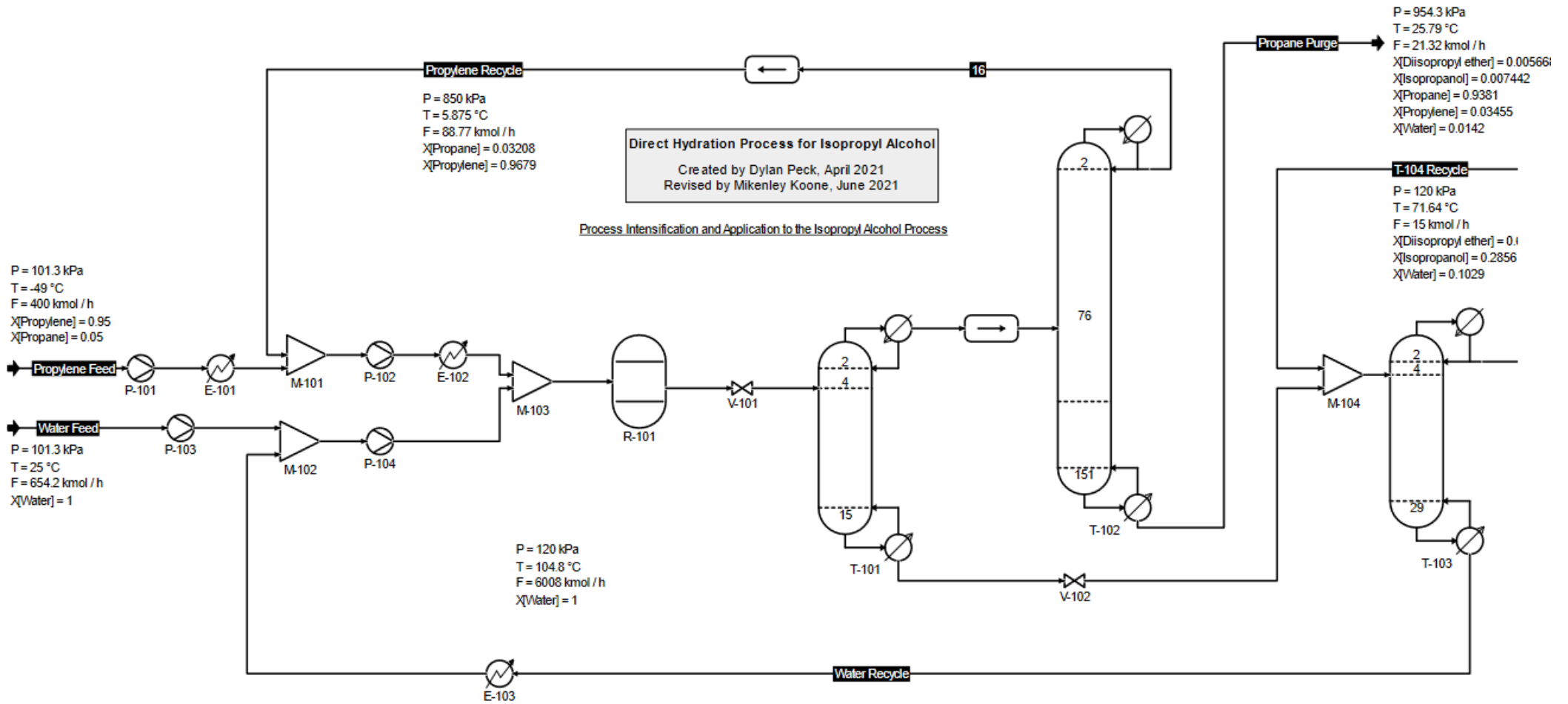
O processo de hidratação direta converte propileno em isopropanol por meio da reação direta da água com propileno (Equação 5), com uma reação secundária que forma éter diisopropílico (DIPE) e água (Equação 6). A principal desvantagem desse método é a demanda de uma alimentação com alta pureza de propileno (ao menos 90%), além da necessidade de operar a reação em temperatura e pressão muito maiores que a hidratação indireta para melhorar a conversão e rendimento. No entanto, a hidratação direta possui como vantagem a utilização da água, no processo, como solvente em vez de ácido sulfúrico, reduzindo o impacto da corrosão e problemas ambientais. (PANJAPAKKUL; EL-HALWAGI, 2018).



2.2 Planta de produção do álcool isopropílico

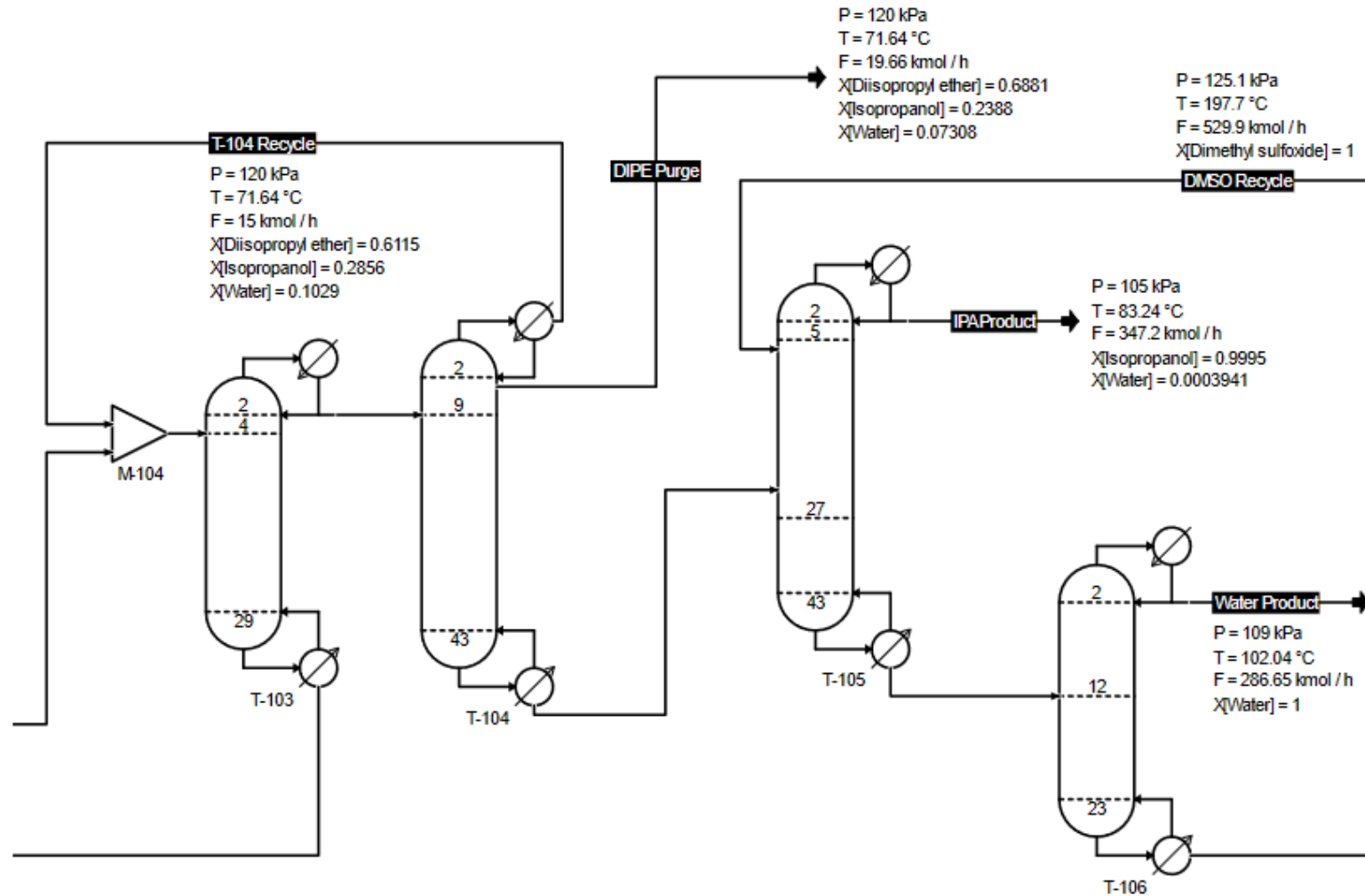
A metodologia empregada na simulação foi partir de uma planta já previamente simulada e disponível em: <http://www.chemsep.org/downloads/index.html>. O processo simulado para a síntese de álcool isopropílico baseado na hidratação direta do propileno foi adaptado de Niu e Rangaiah (2016). O fluxograma demonstra o uso de vários modelos K, simultaneamente. A equação de estado de Peng-Robinson é usada para a separação de propileno de propano, permitindo que o reagente seja reciclado de volta ao reator. Já o modelo NRTL é utilizado para as demais operações do processo e os parâmetros de interação binária foram ajustados aos dados experimentais disponíveis para as misturas binárias não ideais envolvidas nesse processo. Devido à possibilidade de três fases nos pares contendo propeno/propileno e água, o modelo UNIFAC é aplicado para prever esses parâmetros. Para aumentar a temperatura e evitar a formação de duas fases líquidas, a primeira coluna utiliza um condensador parcial. A separação mais difícil nesse processo é entre a água e o álcool isopropílico, então o solvente DMSO (dimetilsulfóxido) é introduzido na seção de separação final, permitindo efetivamente que um produto final de IPA nas condições desejadas seja obtido. Niu e Rangaiah (2016) descrevem melhorias adicionais que podem ser feitas no processo.

Figura 1 – Primeira parte da simulação da planta de produção do isopropanol.



Fonte: COCO (2013).

Figura 2 – Segunda parte da simulação da planta de produção do isopropanol.



Fonte: COCO (2013).

O diagrama representado pela Figura 1 e Figura 2 é a simulação de uma planta de produção de álcool isopropílico por meio da hidratação direta, realizada no software COCO.

Inicialmente, tem-se uma alimentação de propileno com 95% de pureza misturada com um reciclo de propileno 95,2%. Essa mistura será pressurizada e aquecida antes de ser alimentada ao reator. Então, a corrente de propileno é misturada com uma alimentação aquecida e pressurizada de água pura e, por sua vez, a mistura é alimentada ao reator R-101, em que as Equações 5 e 6 são as reações químicas configuradas na simulação do processo. Na simulação, o reator está configurado como isotérmico ($T = 133,5 \text{ }^\circ\text{C}$); embora a reação seja exotérmica, o calor da reação não é suficiente para atingir a temperatura reacional desejada, necessitando utilizar vapor como utilidade quente.

O efluente que sai do reator (contendo propileno, água, éter diisopropílico, propano e álcool isopropílico) é alimentado na primeira coluna de destilação T-101 do processo. O produto de topo é enviado para uma segunda torre T-102, com o objetivo de separar a mistura propileno/propano, em que o propileno separado é reciclado ao início do processo e o propano é purgado. Em seguida, o produto pesado da T-101 é alimentado na terceira coluna T-103 em que 95% da água é separada e reciclada ao início do processo. A torre subsequente T-104 separa o éter diisopropílico, que é purgado. Assim, restou-se apenas uma corrente de 54,7% de álcool isopropílico com 45,3% de água, e sabe-se que essa mistura é azeotrópica e muito difícil de ser separada. Para isso, adiciona-se o solvente dimetilsulfóxido (DMSO) puro na quinta coluna do processo T-105, em que finalmente se separa o álcool isopropílico como produto de fundo a partir de uma destilação extrativa, enquanto a água e o solvente DMSO são recuperados na última coluna de separação T-106 do processo.

Dessa forma, com uma alimentação de 380 kmol/h de propileno com alta pureza (como demanda a rota de hidratação direta), produz-se 347,05 kmol/h de álcool isopropílico. A Figura 3 mostra a composição e especificações das principais correntes de interesse do processo descrito.

Figura 3 – Captura de tela do sumário de correntes do processo.

Stream	Propylene Feed	Water Feed	IPA Product	Water Product	Unit
Pressure	101.325	101.325	105	109	kPa
Temperature	-49	25	83.2386	102.043	°C
Flow rate	400	654.2	347.224	286.65	kmol / h
Mole frac Propylene	0.95	0	0	0	
Mole frac Propane	0.05	0	3.22094e-22	0	
Mole frac Diisopropyl ether	0	0	9.88302e-05	0	
Mole frac Isopropanol	0	0	0.9995	7.14522e-20	
Mole frac Water	0	1	0.000394104	1	
Mole frac Dimethyl sulfoxide	0	0	7.06578e-06	6.26102e-22	

Fonte: COCO (2013).

3 METODOLOGIA

3.1 Introdução à análise econômica

Uma planta química aceitável economicamente deverá produzir um produto que por sua vez será vendido com lucro. Para isso, uma quantidade de capital suficiente é fundamental para construir todas as instalações necessárias para o funcionamento da fábrica. Simplificando, uma vez que o lucro líquido da planta é igual ao lucro total menos todas as despesas, é fundamental que o engenheiro químico se atente aos vários custos associados a cada etapa da construção da unidade (PETERS; TIMMERHAUS, 2003).

Inúmeros fatores afetam a análise econômica de um processo, entre eles o custo com utilidades, consumíveis (solventes, ácidos, bases, materiais inertes, entre outros), disposição de efluentes e até mesmo o custo com embalagens e expedições. O custo da mão de obra também deve ser considerado, junto com ela as leis trabalhistas, legislações e impostos que variam dependendo do território onde a planta está localizada. Aliado a isso, o valor do terreno e alguns outros custos embutidos também são levados em consideração na análise econômica (TOWLER; SINNOTT, 2013).

Um dos aspectos mais importantes da análise de viabilidade de uma planta química a médio e longo prazo são os preços das matérias-primas. O custo é considerado como variável, ou seja, está sujeito a flutuações do mercado. Em algumas situações, também é papel do engenheiro o contato com fornecedores para estabelecer acordos e, assim, receber propostas abaixo do preço do mercado. Além disso, para avaliar economicamente uma planta, cotações diretas de possíveis fornecedores são desejáveis com a intenção de fornecer melhores estimativas (PETERS; TIMMERHAUS, 2003). Tendo em vista as inúmeras variáveis econômicas de um processo, a análise financeira torna-se indispensável. Então, diversos parâmetros foram desenvolvidos baseando-se em diferentes conceitos econômicos. Para realizar a análise econômica da planta, utilizou-se a planilha Capcost elaborada por Turton *et al.* (2014) com o intuito de facilitar a estimativa e cálculo de alguns parâmetros econômicos do projeto. A seguir serão discutidas algumas metodologias utilizadas.

3.1.1 Custos de Capital de Investimento (CAPEX)

O Custo de Capital de Investimento ou CAPEX (*Capital Expenditure*) é definido por Brennan (2020) como o custo total do projeto, construção, despesas com terreno e instalação de uma fábrica e as necessárias modificações para finalizá-la de modo satisfatório. O investimento de capital é crucial para novas plantas e até mesmo para modificações em fábricas já existentes, visto que são frequentemente necessárias a favor de implementar novas tecnologias, modificar matérias-primas ou atender especificações de qualidade do produto. O CAPEX pode ser dividido em algumas principais categorias:

- Custos da própria fábrica, incluindo a aquisição dos principais equipamentos da planta química (reatores, trocadores de calor, colunas de destilação, compressores, bombas, turbinas, entre outros), além de obras civis como estradas, fundações, edifícios, esgotos, entre outros. O valor recuperável desse investimento geralmente é negligenciável ao final da vida útil do projeto.
- Aquisição do terreno com a finalidade de construção da fábrica, em que o gasto total dependerá do tamanho e localização do terreno. Geralmente, esse gasto é pequeno quando comparado aos custos da fábrica e custos externos e é realisticamente recuperável ao fim da vida útil do projeto. Algumas características desejáveis de um terreno de uma planta química são: solo plano, bem drenado, ter uma distância considerável dos centros urbanos, bom acesso às estradas, ferrovias e portos.
- *Offsite Costs* (custos externos): inclui o gasto de adições a serem feitas à planta com finalidade de acomodar uma nova instalação ou aumento da capacidade de uma fábrica já existente. Os investimentos externos podem incluir instalações de armazenamento de matérias-primas e produtos acabados, infraestruturas de produção de utilidades bem como instalações de produção de vapor e eletricidade, torres de arrefecimento e tratamento de efluentes, além de unidades de serviço como laboratórios, escritórios, entre outros. Assim como os custos da própria fábrica, o valor recuperável do investimento é negligenciável.

3.1.2 Custos Operacionais (OPEX)

O Custo Operacional ou OPEX (*Operational Expenditure*) é definido por Brennan (2020) como todos os custos associados à produção, distribuição e comercialização de produtos, aliado aos custos de desenvolvimento, manutenção e aquisição de tecnologias para o funcionamento da fábrica. O OPEX também engloba os gastos de gestão e comerciais na fabricação e venda dos produtos acabados. Pode ser dividido em algumas principais categorias:

- Custos com matérias-primas. Nas fases iniciais de avaliação do projeto, o consumo de matérias-primas deve ser estimado por meio de balanços de massa e energia detalhados, levando em consideração potenciais perdas na produção por diversos fatores, como evaporação, condições climáticas, entre outros. Segundo Smith (2016), na maioria dos processos, o maior custo operacional está na aquisição desses materiais e tem um grande impacto na viabilidade econômica da planta. Devido às flutuações do mercado financeiro, estimar esses gastos torna-se um desafio para os engenheiros.
- Gastos com utilidades, que incluem energia, correntes de aquecimento e resfriamento. As principais utilidades de uma planta química são combustível, vapor, eletricidade, água de resfriamento, ar comprimido, entre outros. Assim como as matérias-primas, o gasto com utilidades deve ser estimado no início do projeto por meio de balanços de massa e energia, além de também sofrerem oscilações de preço de mercado.
- Custos com funcionários, em geral trabalhadores de processo, manutenção, supervisão e administrativos.
- Custos gerais com manutenção, royalties, embalagens, empacotamento, seguros, distribuição, venda e pesquisa e desenvolvimento (P&D).

3.1.3 *Payback* ou tempo de retorno

O tempo de retorno ou *payback* simples é definido por Paltrinieri e Khan (2016) como o período necessário para recuperar um certo investimento. Porém a metodologia tem suas limitações, já que não leva em consideração o valor do dinheiro no tempo (para isso, utilizar o *payback* descontado), riscos, custos de oportunidade,

além de não medir a lucratividade do investimento, portanto, não é recomendado a utilização dessa metodologia individualmente ao avaliar a viabilidade de um projeto, mas sim em conjunto com outros parâmetros econômicos. Geralmente, define-se o *payback* como uma medida de liquidez do investimento.

3.1.4 Valor presente líquido

O valor presente líquido (VPL) é um parâmetro econômico que segundo Martins (2002) é uma técnica refinada de análise econômica que considera o valor do dinheiro no tempo. Essa metodologia converte todas as saídas e entradas de caixa para valores financeiros atuais e, assim, comparado com o investimento inicial.

Geralmente, os seguintes critérios são utilizados pelos investidores ao tomar uma decisão utilizando o valor presente líquido como parâmetro: um $VPL > 0$, ou seja, se os fluxos monetários futuros trazidos e somados a valor presente superam os investimentos iniciais, o projeto deve ser aceito. Caso $VPL < 0$, o projeto não deve ser aceito (GONZAGA, 2011).

3.1.5 Classe de Estimativa de Custos

De acordo com Christensen *et al.* (2005), a Associação Americana de Engenharia de Custos (AAC) classifica um projeto em cinco etapas de acordo com o grau de precisão das estimativas de custos e seu andamento. Essa divisão é importante para a equipe de gestão gerar múltiplas estimativas e, assim, analisar se um certo projeto é viável o suficiente para um detalhamento mais completo, progredindo da Classe 5 até a Classe 1.

- Classe 5: É basicamente uma triagem conceitual do projeto. Estimativas dessa classe são preparadas com base em informações limitadas e podem ser formuladas em pouquíssimo tempo, geralmente apenas o tipo, localização e capacidade das instalações são propostas. Normalmente é necessário apenas a elaboração de um diagrama de blocos e sua precisão varia de -20% a -50% e 30% a 100%.
- Classe 4: Nessa etapa, realiza-se a triagem de projetos, determinação da viabilidade, avaliação conceitual e aprovação do orçamento preliminar do projeto. Geralmente, é necessário um PFD (*Process Flow Diagram*) da planta,

a capacidade das instalações e a listagem dos equipamentos do processo, dimensionando-os de forma preliminar a fim de determinar o custo de cada um. A precisão dessa classe de estimativa é de -15% a -30% e 20% a 50%. A estimativa a ser feita do presente projeto está inserida nessa classe.

- Classe 3: É preparado para formar a base da estimativa orçamental de um projeto e sua autorização orçamentária. As utilidades, encanamentos, instrumentações e equipamentos precisam de um detalhamento mais completo, além de um processo completo de engenharia. Sua precisão está entre -10% a -20% e 10% a 30%.
- Classe 2: São elaboradas para formar um detalhado controle de projeto e todo o trabalho é monitorado em termos de custos e progresso. Geralmente, essa classe de estimativa é utilizada com o objetivo de estabelecer o valor do contrato com os empreiteiros. Além das outras necessidades listadas acima, exige-se os balanços de massa e energia, o PFD final, o layout final, diagramas e custos da parte elétrica e de utilidades, cotações de fornecedores, planos para a mão de obra, entre outros. Sua precisão vai de -5% a -15% e 5% a 20%.
- Classe 1: Todos os equipamentos, utilidades, PFD, P&ID, layout e outras necessidades detalhadas acima estão completos e adequadamente dimensionados. Agora, elabora-se essa classe de estimativa com o objetivo de criar uma base de controle final em que todas as variações no orçamento sejam monitoradas, assim a planta estará pronta para entrar na fase de construção. Estima-se uma precisão de -3% a -10% e 3% a 15%.

3.2 Área dos trocadores de calor

Ao utilizar a planilha CAPCOST para determinar o CAPEX de uma planta, é necessário informar as áreas dos trocadores de calor do processo. Como o simulador COCO não fornece todas as informações essenciais desses equipamentos, vê-se a necessidade de buscar hipóteses com o objetivo de auxiliar o cálculo dessas áreas. Para isso, será utilizado duas metodologias para o cálculo: um referente aos condensadores e refeedores das torres de destilação e outro para os trocadores de calor convencionais. A área de um trocador é determinada usualmente pelas Equações 7 e 8:

$$Q = UA\Delta T_{ln} \quad (7)$$

$$\Delta T_{ln} = \frac{T_{a_{in}} - T_{a_{out}}}{\ln \left(\frac{T_b - T_{a_{out}}}{T_b - T_{a_{in}}} \right)} \quad (8)$$

Em que:

Q = Taxa de transferência de calor do trocador;

A = Área da superfície de transferência de calor;

U = Coeficiente global de transferência de calor;

ΔT_{ln} = Média logarítmica de transferência de calor;

$T_{a_{in}}$ = Temperatura de entrada do fluido refrigerante;

$T_{a_{out}}$ = Temperatura de saída do fluido refrigerante;

T_b = Temperatura do fluido a ser refrigerado.

A metodologia de Douglas (1988) prevê algumas condições e hipóteses para o cálculo da área dos condensadores e refeedores:

- Em relação aos refeedores, a diferença de temperatura adotada estará entre 30°F e 45°F, já que temperaturas maiores que essa faixa ocasionará na ebulição de filme e prejudicará a troca de calor. Adotou-se um valor igual de coeficiente global de calor para todos os refeedores (Tabela 2), o mesmo recomendado por Douglas (1988).
- No que se refere aos condensadores, Douglas (1988) recomenda utilizar a água fria como fluido refrigerante, numa temperatura de entrada de 90°F e saindo a 120°F. Também recomenda-se utilizar um mesmo coeficiente global de calor indicado para todos os condensadores do processo (Tabela 3), já que esse valor oferece resultados aceitáveis na indústria.

Com base nos parâmetros obtidos pela simulação da planta no COCO e das hipóteses de Douglas (1988), as Tabelas 2 e 3 mostram todos os dados necessários para o cálculo das áreas dos condensadores e refeedores. Os valores de taxa de transferência de calor (Q) foram retirados da simulação, enquanto os coeficientes

globais de transferência de calor (U) e média logarítmica de transferência de calor (ΔT_{ln}) foram baseados em Douglas (1988).

Tabela 2 – Parâmetros e áreas dos refervedores.

REFERVEDOR	Q (btu/h)	U (btu/hr*ft ² *°F)	ΔT_{ln} (°F)	A (ft ²)
E-105	68115000,00	250,00	45,00	6054,67
E-107	10619000,00	250,00	45,00	943,91
E-109	496080000,00	250,00	45,00	44096
E-111	13829000,00	250,00	45,00	1229,24
E-113	30989000,00	250,00	45,00	2754,58
E-115	81564000,00	250,00	45,00	7250,13

Fonte: O autor com base em Douglas (1988) e simulação.

Tabela 3 – Parâmetros e áreas dos condensadores.

CONDENSADOR	Q (btu/h)	U (btu/hr.ft ² .°F)	T _b (°F)	T _{a_{in}} (°F)	T _{a_{out}} (°F)	ΔT_{ln} (°F)	A (ft ²)
E-104	5,51.10 ⁷	100,00	73,13	90,00	120,00	29,36	18757,59
E-106	1,23.10 ⁷	100,00	55,58	90,00	120,00	47,87	2577,98
E-108	5,32.10 ⁸	100,00	180,84	90,00	120,00	74,84	71030,83
E-110	1,31.10 ⁷	100,00	160,95	90,00	120,00	54,58	2401,85
E-112	3,52.10 ⁷	100,00	181,85	90,00	120,00	75,86	4643,84
E-114	7,73.10 ⁷	100,00	215,67	90,00	120,00	109,99	7027,85

Fonte: O autor com base em Douglas (1988) e simulação.

A fim de determinar a área dos trocadores de calor convencionais E-101, E-102 e E-103, é necessário determinar o coeficiente global de calor de cada um deles. Nos equipamentos E-101 e E-102, tem-se o aquecimento do propileno, um hidrocarboneto leve, utilizando vapor d'água. No equipamento E-103, a água reciclada quente é resfriada com água fria. Com os sistemas conhecidos, utilizou-se um valor intermediário das faixas de coeficiente global fornecidas por Cao (2009).

Como esses equipamentos são considerados *heaters/coolers* na simulação e não há necessidade de especificar a corrente de utilidade (diferente de um *heat exchanger*), utilizou-se a diferença de temperatura simples do fluido a ser aquecido (propileno) ou resfriado (água), com o objetivo de simplificar o dimensionamento dos

trocadores de calor (Tabela 4), já que o principal objetivo é a estimativa de custos da planta inteira. Os valores de taxa de transferência de calor (Q) e diferença de temperatura (T) foram retirados da simulação, enquanto os coeficientes globais de transferência de calor (U) foram baseados em Cao (2009).

Tabela 4 – Parâmetros e áreas dos trocadores de calor.

TROCADOR DE CALOR	Q (W)	U (W/m ² . K)	T (K)	A (m ²)
E-101	778616,813102	525	61,086	24,279
E-102	3037728,58187	525	110,636	52,299
E-103	5873783,20001	1200	44,797	109,267

Fonte: O autor com base em Cao (2009) e simulação.

3.3 Volume do Reator

A simulação da planta química de produção do álcool isopropílico por meio da reação de hidratação direta do propileno utiliza um reator de conversão fixa, que existe para fins de simulação e cálculo do balanço de massa e energia, porém, ao determinar o CAPEX pela planilha CAPCOST, informar o volume desse equipamento é indispensável. Assim, será necessário dimensionar um reator equivalente ao da simulação que ofereça os mesmos resultados observados.

Primeiramente, será preciso informar a cinética da reação ao simulador. Em relação à reação de hidratação direta do propileno, Onoue *et al.* (1973) determinaram por meio das Equações 9, 10 e 11:

$$\log_{10}K_l = \left(\frac{1950}{T}\right) - 6,06 \quad (9)$$

$$\log_{10}K_g = \left(\frac{2045}{T}\right) - 5,08 \quad (10)$$

$$r = k_l \cdot \left(\frac{C_p - C_i}{K_l}\right) = k_g \cdot \left(\frac{P_p - P_i}{P_w^e - K_g}\right) \quad (11)$$

Em que:

r = Taxa da reação química;

T = Temperatura da fase líquida ou vapor;

K_l = Constante de equilíbrio na fase líquida;

K_g = Constante de equilíbrio na fase vapor;

C_p = Concentração de propileno em solução;

C_i = Concentração de álcool isopropílico em solução;

P_p = Pressão parcial do propileno na fase vapor;

P_i = Pressão parcial do álcool isopropílico na fase vapor;

P_w^e = Pressão de equilíbrio parcial da água na fase vapor.

No que se refere a equações de cinética química, o simulador COCO e outros simuladores em geral possuem várias limitações. Ao configurar o pacote de reação do reator, não foi possível inserir a Equação 11 devido à sua complexidade, portanto dimensionar o reator a partir da simulação não foi possível.

A metodologia adotada a fim de projetar o reator do processo foi explicitado por Idenishi, Kamamoto e Hosaka (2017), em que se recomenda a utilização da Equação 12 para ajustar o volume e tempo de residência da água no reator.

$$\tau = \frac{V}{q} \quad (12)$$

Em que:

τ = Tempo de residência da água;

V = Volume do reator;

q = Vazão de entrada da água no reator.

Com o objetivo de melhorar a concentração e pureza do isopropanol obtido na saída do reator, Idenishi, Kamamoto e Hosaka (2017) recomendam uma faixa de 30 a 40 minutos para o tempo de residência da água. Logo, a Tabela 5 mostra o dimensionamento do reator levando em conta a simulação da planta de produção do álcool isopropílico. O valor de tempo de residência da água (τ) foi baseado em Idenishi, Kamamoto e Hosaka (2017), enquanto o valor de vazão de entrada da água no reator foi retirado da simulação.

Tabela 5 – Parâmetros e volume do reator.

REATOR	τ (min)	q (m³/min)	V (m³)
R-101	30	2,038	61,14

Fonte: O autor com base em Idenishi, Kamamoto e Hosaka (2017) e simulação.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Análise econômica

Com base nas informações do processo retiradas da simulação e das metodologias descritas anteriormente, alimentou-se a planilha Capcost para a realizar-se a análise econômica do projeto. Utilizou-se o índice CEPCI (*Chemical Engineering Plant Cost Index*), utilizado na planilha como um índice de inflação, de fevereiro de 2022 com o valor de 801,3.

Inicialmente, deve-se inserir na planilha os parâmetros necessários para a estimativa de custo de cada um dos equipamentos utilizados no processo e, assim, calcular o CAPEX. As Tabelas 6, 7, 8 e 9 informam os parâmetros necessários para a avaliação dos custos de capital de investimento. Destaca-se que os dimensionamentos das torres de destilação foram retirados da simulação.

Tabela 6 – Dados dos trocadores de calor.

Equipamento	Tipo	Pressão no casco (barg)	Pressão no tubo (barg)	Material	Área (m²)
E-101	Cabeçote Flutuante	9	9	Aço Carbono	24
E-102	Cabeçote Flutuante	76	76	Aço Carbono	52
E-103	Cabeçote Flutuante	2	2	Aço Carbono	109
E-104	Cabeçote Flutuante	10	10	Aço Carbono	1740
E-105	Cabeçote Flutuante	10	10	Aço Carbono	562
E-106	Cabeçote Flutuante	10	10	Aço Carbono	239
E-107	Cabeçote Flutuante	10	10	Aço Carbono	87
E-108	Cabeçote Flutuante	2	2	Aço Carbono	6600
E-109	Cabeçote Flutuante	2	2	Aço Carbono	4100
E-110	Cabeçote Flutuante	2	2	Aço Carbono	223
E-111	Cabeçote Flutuante	2	2	Aço Carbono	114
E-112	Cabeçote Flutuante	2	2	Aço Carbono	432
E-113	Cabeçote Flutuante	2	2	Aço Carbono	256
E-114	Cabeçote Flutuante	2	2	Aço Carbono	653
E-115	Cabeçote Flutuante	2	2	Aço Carbono	674

Fonte: O autor.

Tabela 7 – Dados das bombas.

Equipamento	Tipo	Potência (kW)	Material	Pressão de descarga (barg)
P-101	Centrífuga	7,88	Aço Carbono	8,7
P-102	Centrífuga	96,3	Aço Carbono	75,1
P-103	Centrífuga	1	Aço Carbono	1,34
P-104	Centrífuga	300	Aço Carbono	75

Fonte: O autor.

Tabela 8 – Dados do reator.

Equipamento	Tipo	Volume (m³)
R-101	Agitado Encamisado	61,1

Fonte: O autor.

Tabela 9 – Dados das torres.

Equipamento	Material	Material do prato	Tipo do prato	Número de pratos	Diâmetro (m)	Altura (m)	Pressão (barg)
T-101	Aço Carbono	Aço Carbono	Perfurado	16	0,2	34	12
T-102	Aço Carbono	Aço Carbono	Perfurado	152	0,2	34,5	12
T-103	Aço Carbono	Aço Carbono	Perfurado	30	0,2	35,4	3
T-104	Aço Carbono	Aço Carbono	Perfurado	44	0,2	35	3
T-105	Aço Carbono	Aço Carbono	Perfurado	44	0,2	35,6	3
T-106	Aço Carbono	Aço Carbono	Perfurado	24	3,84	28,9	3

Fonte: O autor.

Os custos dos equipamentos explicitados na Tabela 10 são retornados pela planilha após inserir todos os parâmetros exigidos.

Tabela 10 – Custos estimados dos equipamentos.

Equipamento	Purchased Equipment Cost (\$)	Bare Module Cost (\$)	Base Equipment Cost (\$)	Base Bare Module Cost (\$)
E-101	37.500,00	123.000,00	37.000,00	122.000,00
E-102	53.700,00	156.000,00	41.100,00	135.000,00
E-103	53.100,00	175.000,00	53.100,00	175.000,00
E-104	249.000,00	1.620.000,00	489.000,00	804.000,00
E-105	160.000,00	533.000,00	161.000,00	528.000,00
E-106	83.700,00	273.000,00	82.200,00	270.000,00
E-107	49.200,00	160.000,00	48.300,00	159.000,00
E-108	266.000,00	6.120.000,00	1.860.000,00	874.000,00
E-109	230.000,00	3.790.000,00	1.150.000,00	757.000,00
E-110	78.500,00	258.000,00	78.500,00	258.000,00
E-111	54.200,00	178.000,00	54.200,00	178.000,00
E-112	128.000,00	421.000,00	128.000,00	421.000,00
E-113	86.100,00	283.000,00	86.100,00	283.000,00
E-114	184.000,00	607.000,00	184.000,00	607.000,00
E-115	190.000,	625.000,00	190.000,00	625.000,00
P-101	22.800,00	58.500,00	14.690,00	47.600,00
P-102	173.000,00	330.000,00	50.900,00	165.000,00
P-103	15.300,00	39.400,00	9.890,00	32.000,00
P-104	400.000,00	765.000,00	118.000,00	382.000,00
R-101	316.000,00	1.270.000,00	316.000,00	1.270.000,00
T-101	70.200,00	90.300,00	60.000,00	80.000,00
T-102	514.000,00	534.000,00	514.000,00	534.000,00
T-103	106.800,00	127.300,00	106.800,00	127.300,00
T-104	154.000,00	174.000,00	154.000,00	174.000,00
T-105	154.000,00	174.000,00	154.000,00	174.000,00
T-106	1.057.000,00	2.530.000,00	817.000,00	2.090.000,00
Total	4.889.100,00	21.413.500,00	6.957.780,00	11.271.900

Fonte: O autor.

Uma das principais vantagens da produção do álcool isopropílico pela hidratação direta é a ausência do risco de corrosão aos equipamentos. Com isso, o material escolhido foi o aço carbono, já que seria irrelevante utilizar um material resistente a corrosões como o aço inox, mudança esta que elevaria o preço dos equipamentos.

Os valores de *Bare Module Cost* e *Base Bare Module Cost*) consideram o custo de um equipamento pronto para a utilização, incluindo os gastos com acessórios, instalação, impostos, entre outros (TURTON *et al.*, 2014). O *Total Module Cost* da planta de produção do álcool isopropílico é de \$25.270.000,00. Outro parâmetro para avaliação seria o *Total Grass Roots Cost*, que estima o custo da construção de uma planta do zero, englobando os custos do terreno e de novas instalações e facilidades a serem construídas. Nesse caso, o valor presumido é de \$30.910.000,00. Destaca-se que os custos estimados usando a planilha CAPCOST são para unidades a serem construídas no Golfo do México, nos Estados Unidos. Para outras localidades, corrige-se usando a metodologia apropriada, como o fator de localização de Richardson.

Em seguida, o cálculo do OPEX exige as informações das utilidades de cada equipamento, sendo eles os trocadores de calor, bombas e reator. Os parâmetros necessários e seus custos estão na Tabela 11.

Tabela 11 – Custo das utilidades.

Equipamento	Total Module Cost (\$)	Grass Roots Cost (\$)	Utilidade	Eficiência	Consumo	Custo Anual (\$)
E-101	145.000,00	206.000,00	Vapor de Média Pressão	-	2800 MJ/h	64.800,00
E-102	184.000,00	252.000,00	Vapor de Média Pressão	-	10900 MJ/h	252.200,00
E-103	206.000,00	293.000,00	Água de Resfriamento	-	21100 MJ/h	67.000,00
E-104	1.916.000,00	2.720.000,00	Água de Resfriamento	-	58100 MJ/h	183.000,00
E-105	600.000,00	890.000,00	Vapor de Média Pressão	-	71900 MJ/h	1.663.000,00
E-106	320.000,00	457.000,00	Água de Resfriamento	-	13000 MJ/h	41.000,00
E-107	189.000,00	269.000,00	Vapor de Média Pressão	-	11200 MJ/h	259.200,00
E-108	7.220.000,00	10.300.000,00	Água de Resfriamento	-	561000 MJ/h	1.760.000,00
E-109	4.468.000,00	6.400.000,00	Vapor de Média Pressão	-	523000 MJ/h	12.110.000,00
E-110	300.000,00	434.000,00	Água de Resfriamento	-	13800 MJ/h	44.000,00
E-111	210.000,00	299.000,00	Vapor de Média Pressão	-	14600 MJ/h	338.000,00
E-112	496.000,00	710.000,00	Água de Resfriamento	-	37200 MJ/h	117.000,00
E-113	330.000,00	476.000,00	Vapor de Média Pressão	-	32700 MJ/h	756.000,00
E-114	716.000,00	1.020.000,00	Água de Resfriamento	-	81600 MJ/h	257.000,00
E-115	740.000,00	1.050.000,00	Vapor de Média Pressão	-	86100 MJ/h	1.991.000,00
P-101	46.700,00	62.800,00	Eletricidade	0,86	9,17 kW	5.140,00

P-102	263.000,00	319.000,00	Eletricidade	0,86	112 kW	62.800,00
P-103	31.400,00	42.300	Eletricidade	0,86	1,16 kW	652,00
P-104	609.000,00	740.000,00	Eletricidade	0,86	349 kW	196.000,00
R-101	1.490.000,00	1.650.000,00	Vapor de Média Pressão		25900 MJ/h	599.000,00
T-101	72.000,00	99.000,00	NA			
T-102	427.000,00	607.000,00	NA			
T-103	102.000,00	145.000,00	NA			
T-104	139.000,00	198.000,00	NA			
T-105	139.000,00	198.000,00	NA			
T-106	2.020.000,00	2.730.000,00	NA			
Total	23.400.000,00	32.600.000,00				20.800.000,00

Fonte: O autor.

Além disso, também é necessário adicionar os valores gastos com os materiais necessários para o funcionamento do processo. Os preços dos materiais no mercado aberto global podem variar muito com o período de tempo, então baseou-se o preço tanto da matéria-prima quanto do produto em mercados e datas iguais (Tabela 12) (ECHEMI, 2022).

Tabela 12 – Preço dos materiais do processo.

Nome do material	Classificação	Preço (\$/kg)	Vazão (kg/h)	Custo Anual (\$)
Propileno	Matéria-prima	0,98	16872,213	138.023.577
Álcool Isopropílico	Produto	1,46	20862,186	-253.478.063

Fonte: O autor e baseado em Echemi (2022).

A planilha ainda exige alguns parâmetros finais para a análise de viabilidade econômica. Primeiramente, listou-se na Tabela 13 os valores do custo de terreno, taxa de tributação, taxa de juros anual, valor de venda dos equipamentos como sucata (*salvage value*), o capital de investimento fixo FCI_L (soma de todos os equipamentos da planta), capital de giro, custos com mão de obra, entre outros. Como não houve

uma pesquisa de mercado, os valores adotados são arbitrários, ou seja, podem não refletir a realidade do mercado no momento.

Tabela 13 – Parâmetros econômicos da planta.

Parâmetro econômico	Valor
Custo do terreno	\$10.000.000,00
Taxa de tributação	45%
Taxa de juros anual	10%
Salvage Value	\$3.091.000,00
Capital de giro	\$17.000.000,00
FCI _L	\$30.910.000,00
Total Module Factor	1,18
Grass Roots Factor	0,50

Fonte: O autor.

Destaca-se que a atual análise financeira considera um projeto novo, ou seja, feito do zero. Nesse caso, a adoção do *Grass Root Cost* é mais adequada quando comparado ao *Total Module Cost*, que geralmente é utilizado diante de expansão de plantas químicas já existentes.

Por último, o custo operacional é baseado em Turton *et al.* (2014) seguindo a Equação 13, que leva em conta o valor de capital de investimento fixo, custos do trabalho operacional, gastos com utilidades, tratamento de resíduos e matéria-prima. A planilha também detalha o lucro com a venda do produto da planta. Os parâmetros do presente projeto estão listados na Tabela 14.

$$COM_d = 0,18 \cdot FCI_L + 2,76 \cdot C_{OL} + 1,23 \cdot (C_{UT} + C_{WT} + C_{RM}) \quad (13)$$

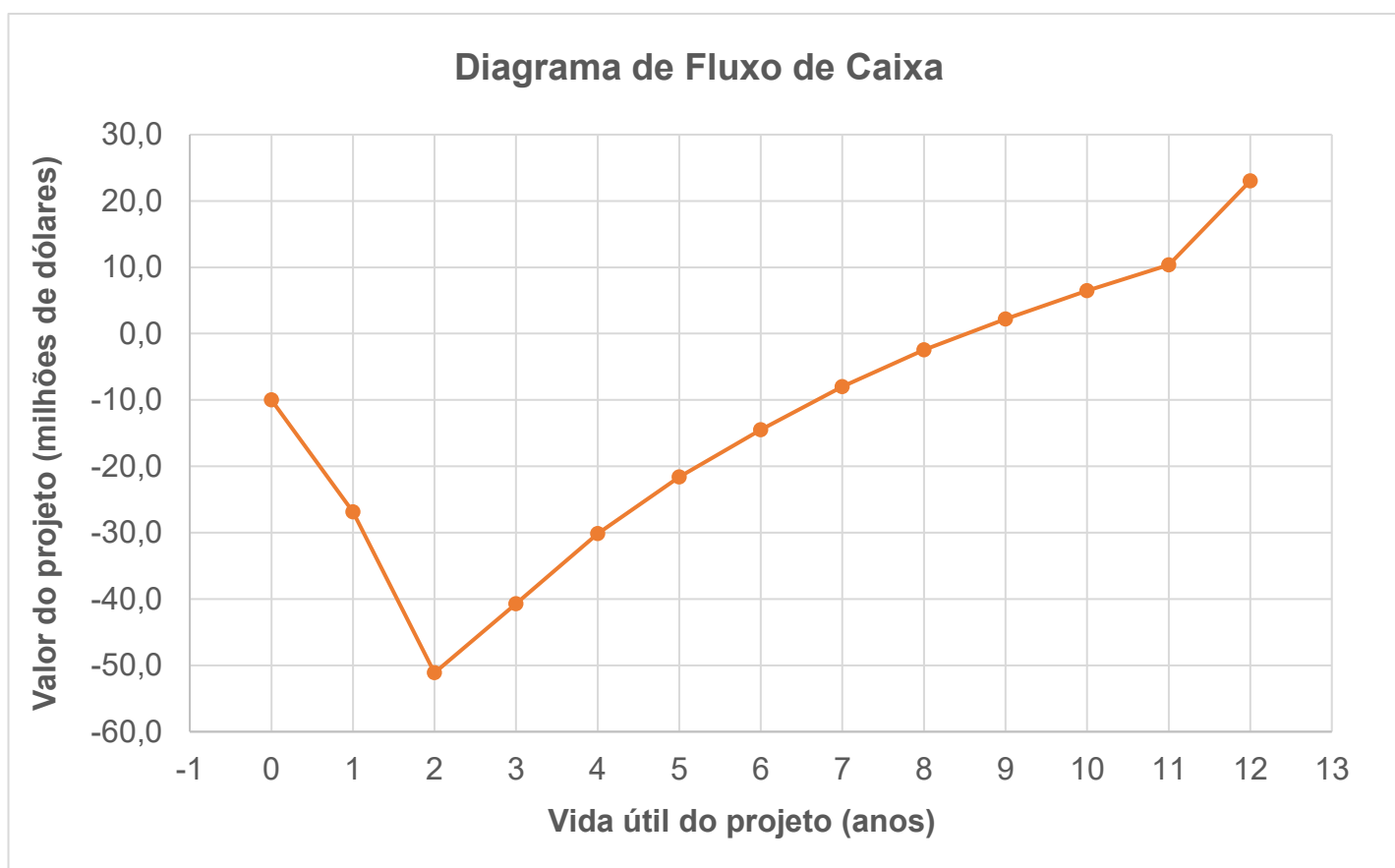
Tabela 14 – Parâmetros para a estimativa de custo operacional.

Parâmetro econômico	Valor
Custos com matéria-prima (C _{RM})	\$138.023.577,00
Custos com utilidades (C _{UT})	\$20.800.000,00
Custos com tratamento de água (C _{WT})	0
Custos com trabalho operacional (C _{OL})	\$1.070.560,00
Lucro da venda do produto	\$223.963.494,00
Custo operacional (COM _d)	\$203.871.545,00

Fonte: O autor.

Após a obtenção de todos os dados necessários para a análise econômica, a planilha Capcost fornece o fluxo de caixa do projeto, seu respectivo diagrama (explicitado na Figura 4) e alguns parâmetros para avaliar a viabilidade financeira da planta, entre eles: o valor presente líquido, a taxa descontada de retorno de caixa e o *payback*. O projeto terá doze anos de duração, sendo dois anos de construção e dez de vida útil.

Figura 4 – Diagrama de fluxo de caixa do projeto.



Fonte: O autor.

Considerando a vida útil do projeto e a necessidade de levar em consideração o valor do dinheiro no tempo devido às flutuações do mercado que afetarão o projeto, escolheu-se o método descontado para a determinação dos indicadores de viabilidade econômica. Observa-se que o valor presente líquido ao final do funcionamento é de \$23.020.000,00 com uma taxa de retorno de fluxo de caixa descontada de 17,64% e com *payback* descontado de 2,7 anos. Ao analisar esses indicadores econômicos, com caixa positivo e um tempo de retorno descontado consideravelmente baixo, avaliara-se o projeto como viável.

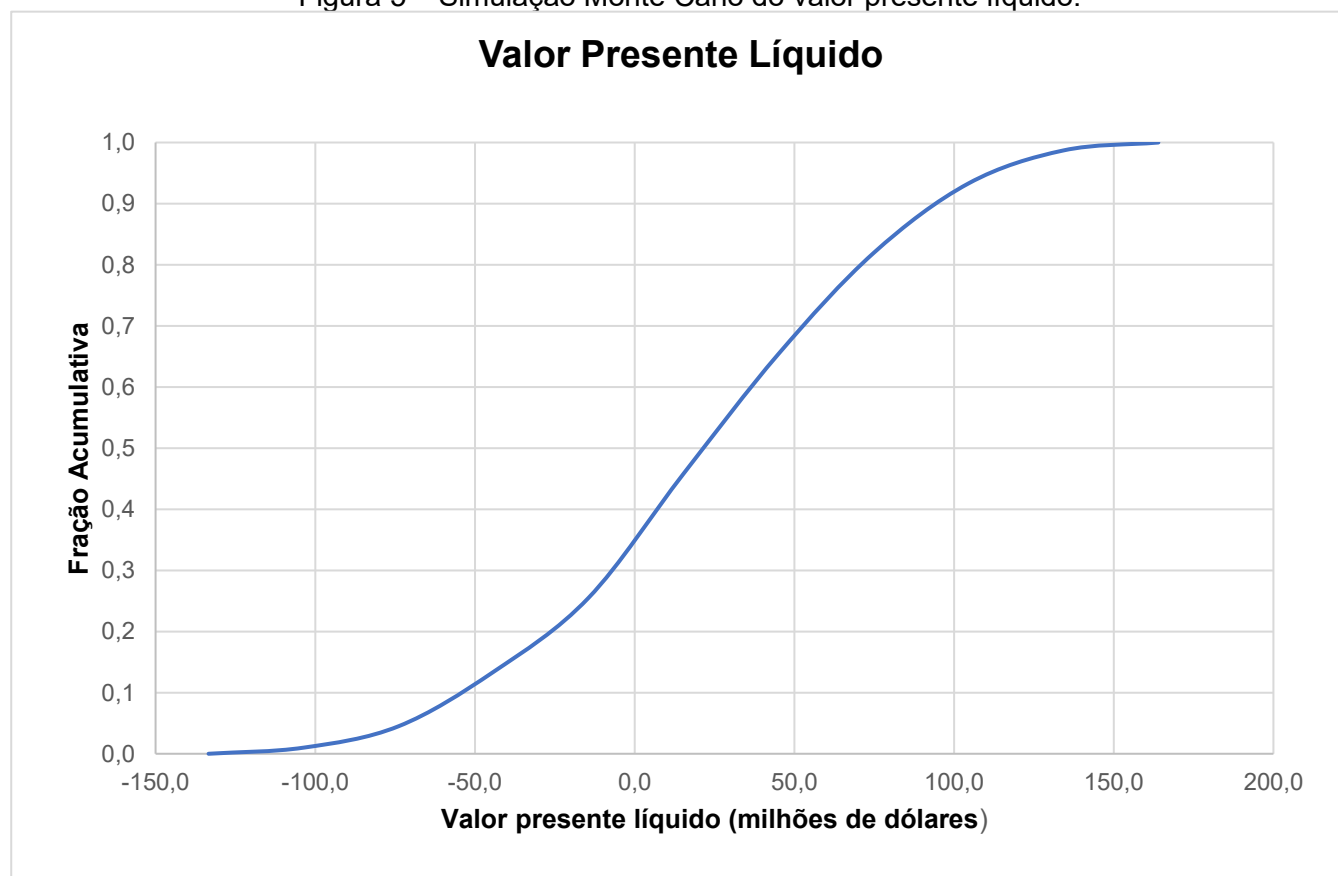
No entanto, faz-se necessário analisar as possíveis variações nos indicadores econômicos obtidos e investigar os riscos atrelados a essas possíveis flutuações financeiras. A metodologia utilizada foi a simulação de Monte Carlo, em que se informa as variações a serem consideradas e se gera os gráficos probabilísticos de cada indicador econômico. Após analisar as variações dos preços do propileno e do álcool isopropílico, além de considerar a flutuação do capital de investimento fixo, chegou-se nas porcentagens exibidas na Tabela 15. Posteriormente, as Figuras 5, 6 e 7 mostram os gráficos gerados pela simulação.

Tabela 15 – Dados para a Simulação de Monte Carlo.

Parâmetro	Limite Inferior	Limite Superior	Valor Base
FCIL	-20%	20%	\$30.910.000,00
Preço do produto	-20%	20%	\$223.963.494,00
Preço da matéria-prima	-10%	10%	\$138.023.577,00

Fonte: O autor.

Figura 5 – Simulação Monte Carlo do valor presente líquido.



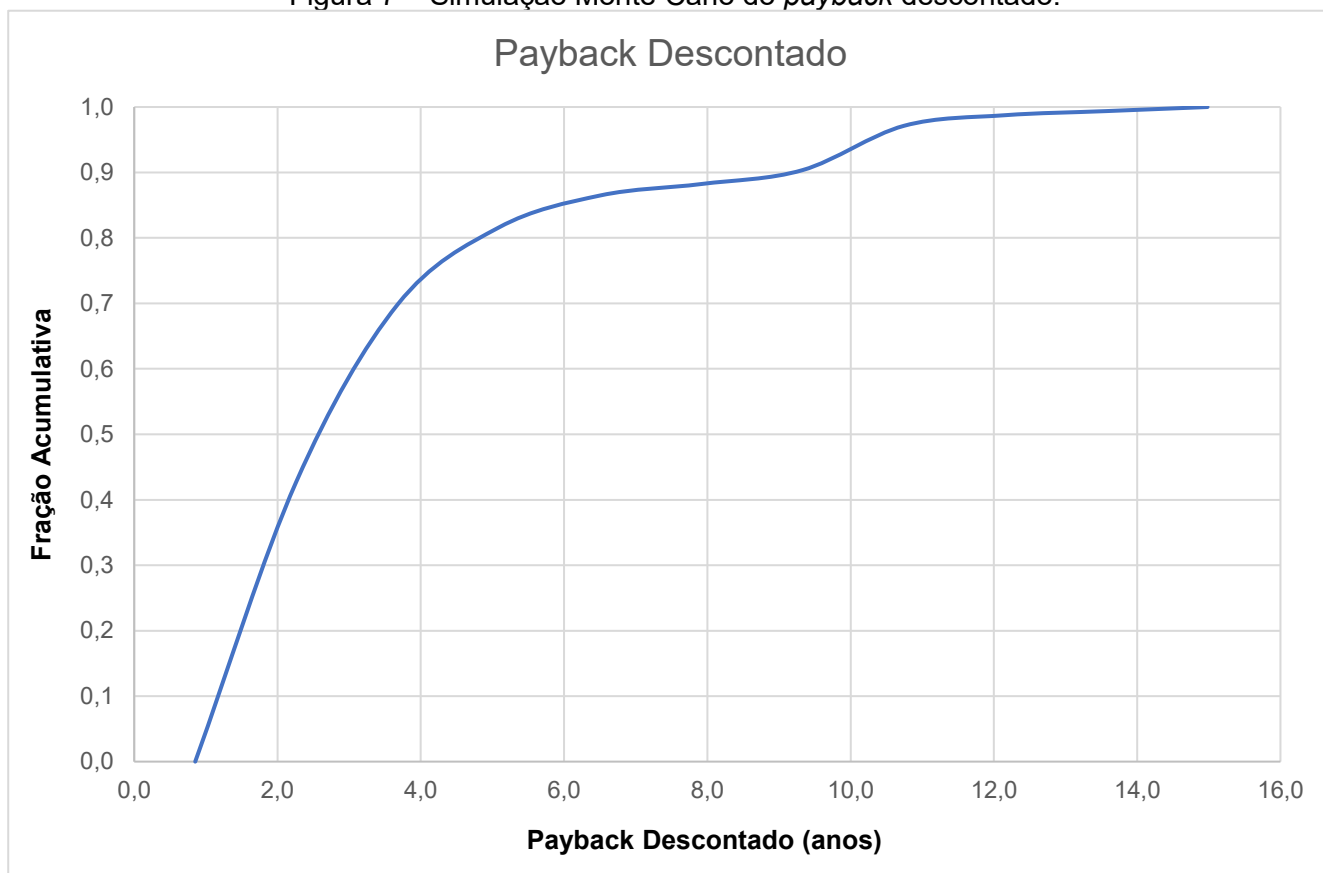
A Figura 5 demonstra que o projeto tem a probabilidade de 65% de ser lucrativo, com uma variação de \$-133.406.646,00 até \$163.977.813,000.

Figura 6 – Simulação Monte Carlo da taxa de retorno descontada.



Fonte: O autor.

A Figura 6 revela que, com as variações fixadas, a taxa descontada de retorno de fluxo de caixa varia de zero até 53,62%. Caso seja necessário, compara-se esse valor com a taxa de desconto interna para avaliação financeira da planta.

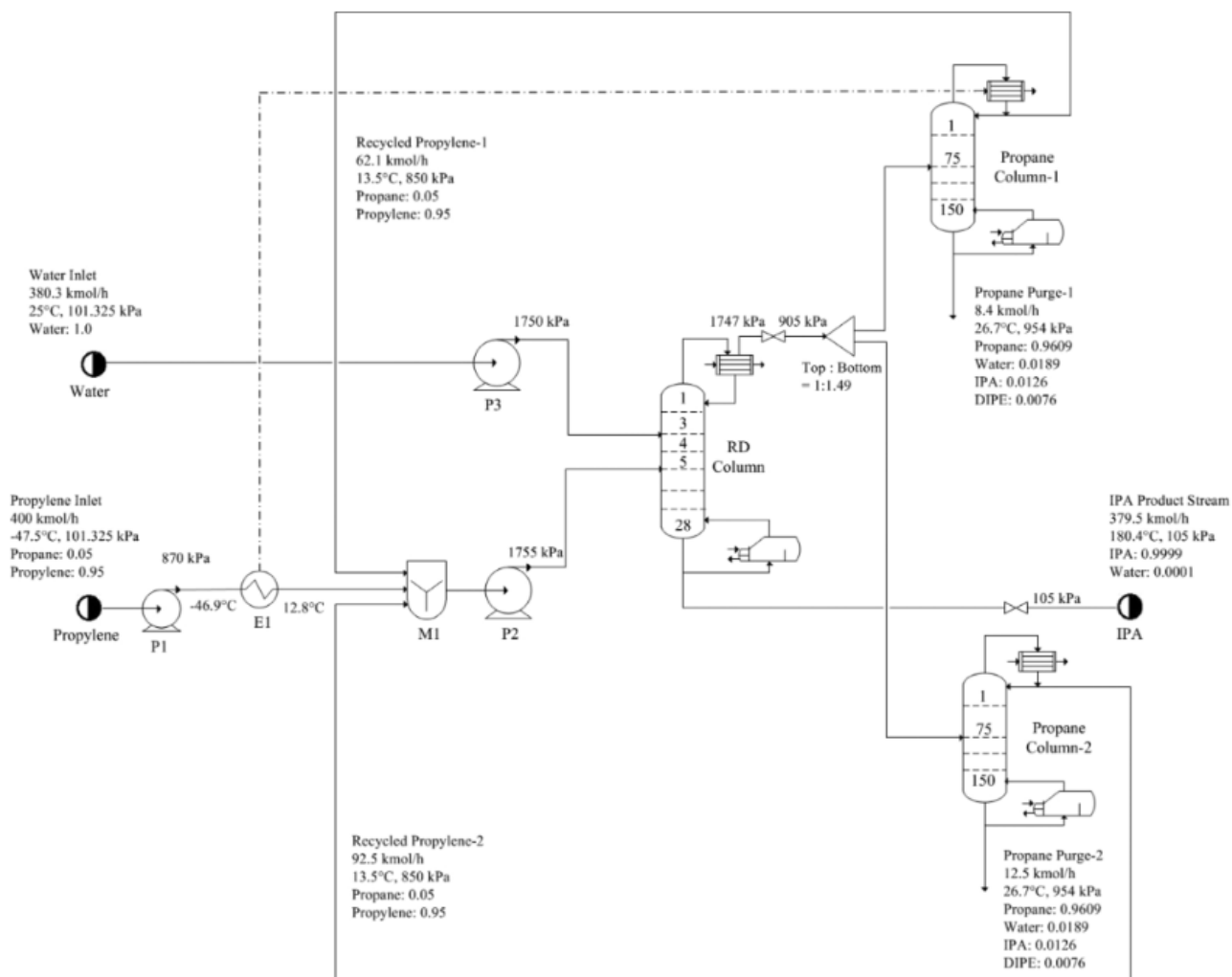
Figura 7 – Simulação Monte Carlo do *payback* descontado.

Fonte: O autor.

Por último, a Figura 7 mostra a probabilidade do retorno do investimento em função dos anos. Por exemplo, existe uma probabilidade de aproximadamente 37% de que o *payback* seja de dois anos.

4.2 Otimização do processo

Figura 8 – Otimização da planta utilizando propileno em excesso.

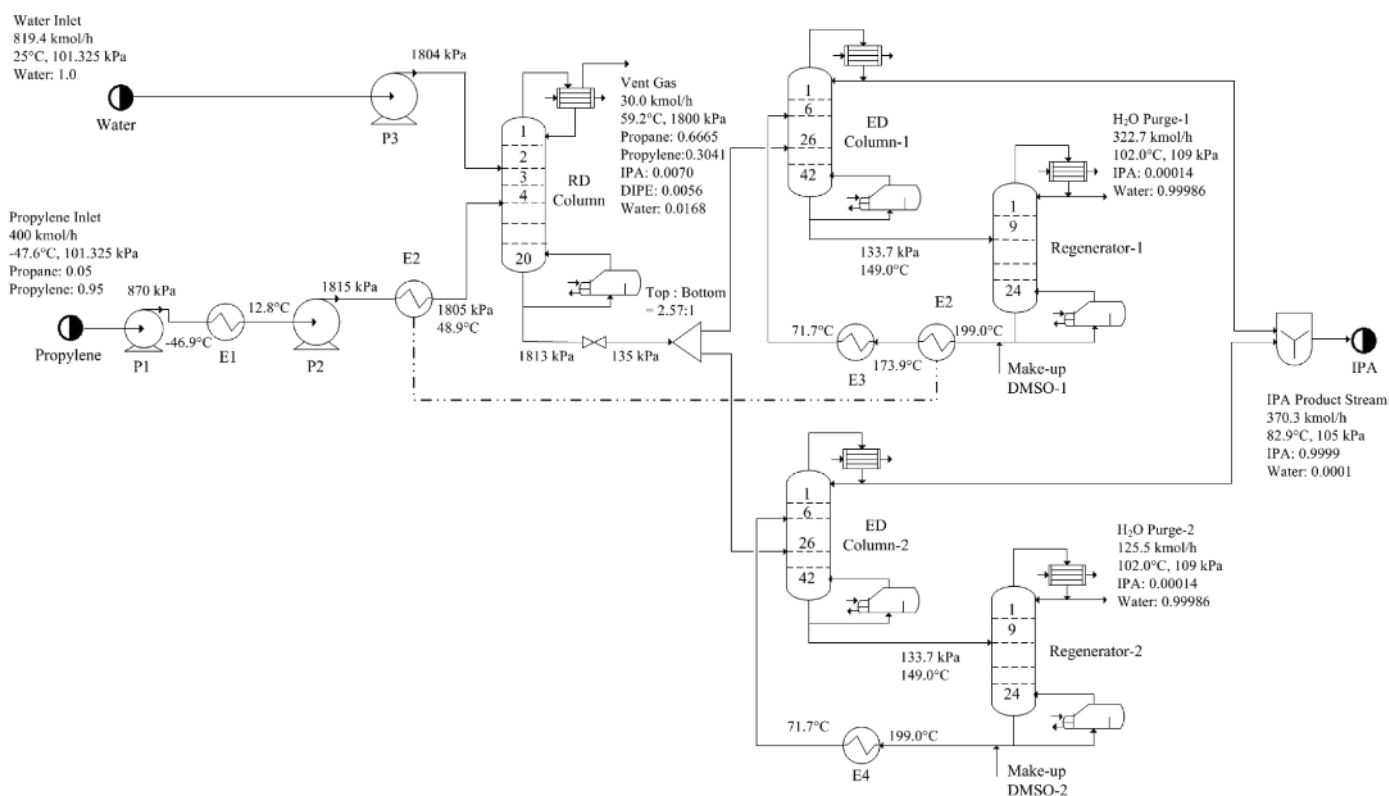


Fonte: Niu e Rangaiah (2016).

A primeira solução de otimização proposta por Niu e Rangaiah (2016) (Figura 8) utiliza uma alimentação em excesso de 400 kmol/h de propileno 95% a -47,5°C e 101,325 kPa, e 380 kmol/h de água a 25°C e 101,325 kPa. A corrente de água de alimentação é pressurizada até 1750 kPa. O propileno alimentado mistura-se com duas correntes de reciclo a 95% de pureza, que em seguida é pressurizada para 1750 kPa. Em seguida, elas são alimentadas para a torre de destilação reativa (*RD Column* ou *Reactive Distillation Column*), em que a razão entre água e propileno deve ser fixada para 1:1,39. A fim de evitar a formação de éter diisopropílico, a reação é realizada numa faixa de temperatura entre 126°C e 133°C, nos estágios 3 a 5.

Uma corrente de álcool isopropílico de 379,5 kmol/h com 99,99% de pureza é recuperada no fundo da coluna, quantidade maior de produto gerado quando comparado com a planta original apresentada anteriormente. Em seguida, o produto de topo é despressurizado para 905 kPa e dividido em duas correntes, que por sua vez serão alimentadas na coluna de propano-1 e coluna de propano-2, respectivamente. O propileno não reagido será recuperado e reciclado para o início do processo e o propano no produto de fundo dessas colunas será purgado. Em decorrência do excesso de propileno, duas colunas de destilação são necessárias para separar a mistura propileno/propano e convergir o sistema, já que apenas uma não seria suficiente devido à alta demanda dessas correntes. Além disso, Niu e Rangaiah (2016) fornecem as principais variáveis de projeto: razão de refluxo da coluna de destilação reativa, taxa de destilado da coluna de propano-1 e coluna de propano-2 e razão de separação da corrente de topo da coluna de destilação extrativa.

Figura 9 – Otimização da planta utilizando água em excesso.



Fonte: Niu e Rangaiah (2016).

A segunda solução de otimização proposta por Niu e Rangaiah (2016) (Figura 9) utiliza uma alimentação em excesso 819,4 kmol/h de água a 25°C e 101,325 kPa e 400 kmol/h de propileno 95% a -47,5°C e 101,325 kPa. A corrente de propileno é

pressurizada para 870 kPa e aquecida para 12,8°C. Em seguida, é pressurizada novamente para 1815 kPa e aquecida para 48,9°C, sendo alimentada no estágio 4 da coluna de destilação reativa. Já a corrente de água é pressurizada para 1804 kPa e alimentada no estágio 2 da torre, em que a razão entre água e propileno deve ser fixada para 2,05:1.

Após a reação, o produto de topo composto majoritariamente por propano e propileno é ventilado. Como sua composição possui pouco propileno (9 kmol/h), não seria viável economicamente adicionar uma coluna de separação para reciclar essa corrente.

Em seguida, a corrente de fundo da coluna reativa, composta por uma mistura azeotrópica de água e álcool, é despressurizada para 135 kPa e dividida em duas correntes, que serão alimentadas em duas torres de destilação a fim de separá-las. De forma similar que a primeira proposta, apenas uma coluna de separação não atenderia à corrente de água em excesso, portanto será necessária uma operação de separação a mais.

Utilizando o solvente dimetilsulfóxido (DMSO), água e álcool isopropílico são separados nas duas colunas de destilação extrativa, gerando 370 kmol/h de produto com 99,99% de pureza. Ainda, o solvente do fundo das colunas é alimentado em dois regeneradores, que por sua vez retornam para a torre extrativa após a separação da água. Ainda, Niu e Rangaiah (2016) fornecem as principais variáveis do projeto: razão de refluxo da coluna de destilação reativa, razão de separação da corrente de topo da coluna de destilação extrativa e taxa de destilado dos regeneradores.

Ao analisar as duas propostas economicamente, Niu e Rangaiah (2016) concluem que as duas soluções otimizadas são mais viáveis que o processo original, já que há uma drástica redução energética, além de gastos menores com equipamentos, menor complexidade do processo e maior produção anual de álcool isopropílico.

Apesar de produzir menos IPA em relação à proposta com propileno em excesso, o processo otimizado utilizando água em excesso mostra um custo de capital de investimento e de utilidades muito menor entre todas as propostas. Isso pode ser explicado pela necessidade de se reciclar o propileno em excesso não reagido no topo da coluna, fato que demanda uma torre de destilação reativa com um diâmetro muito maior e mais consumo de utilidade por conta do refeedor. A exigência de duas colunas de separação de propileno/propano também eleva muito o custo de capital de

investimento, já que são torres muito grandes (com 150 estágios cada) e caras. Além de um gasto menor com utilidades, nota-se a redução de equipamentos necessários ao comparar com o processo original, fator que reduz o gasto com capital de investimento e exige um terreno menor para o funcionamento da planta, portanto, recomenda-se o processo otimizado utilizando água em excesso.

5 CONCLUSÃO

Após realizar a análise técnico-econômica do processo de produção do álcool isopropílico, incluindo as metodologias de análise para os trocadores de calor, refeedores, condensadores e reator, pode-se dizer que a planta química proposta é economicamente viável, tendo um retorno financeiro de \$23.020.000,00 ao longo dos doze anos do projeto, com um *payback* descontando de 2,7 anos. Ainda, os indicadores da análise probabilística de Monte Carlo também são positivos, já que indicam chances altas de VPL positivo e *payback* descontado rápido. Destaca-se que o atual projeto é de Classe 4 e carrega incertezas consideráveis em relação às análises econômicas realizadas. Para estimativas mais precisas, recomenda-se a realização e progressão do projeto até a Classe 1 com uma equipe maior de pessoas capacitadas, a fim de reduzir drasticamente as incertezas econômicas.

Por último, analisou-se duas propostas de otimização da planta original e concluiu-se que o processo otimizado com alimentação de água em excesso é o mais lucrativo entre todas as opções apresentadas, já que se reduziu o capital de investimento e gasto energético drasticamente com a ajuda da substituição do reator pela torre de destilação reativa, fator determinante para a redução do número de equipamentos do processo e do consumo de utilidades, além do aumento da produção anual de álcool isopropílico em relação ao processo original.

REFERÊNCIAS

ALLIED MARKET RESEARCH. **Isopropyl Alcohol Market by Application: Global Opportunity Analysis and Industry Forecast**. 2021. Disponível em: <https://www.alliedmarketresearch.com/isopropyl-alcohol-market-A13841>. Acesso em: 18 out. 2022.

BRENNAN, D. **Process Industry Economics Principles, Concepts and Applications**. 2. ed. Cambridge: Elsevier, 2020.

CAO, Eduardo. **HEAT TRANSFER IN PROCESS ENGINEERING**. [S. l.]: The McGraw-Hill Companies, 2009.

CHRISTENSEN, P. *et al.* **Cost Estimate Classification System - As Applied in Engineering, Procurement, and Construction for the Process Industries**. AACE International Recommended Practice N° 18R-97. 2005. Disponível em: https://www.costengineering.eu/Downloads/articles/AACE_CLASSIFICATION_SYSTEM.pdf. Acesso em: 9 ago. 2022.

DOUGLAS, J. **Conceptual Design of Chemical Processes**. New York: McGraw-Hill, 1988.

DUTIA, P. Isopropyl alcohol: A techno-commercial profile. **Special Report**, p. 211-216, 2012.

ECHEMI. **Isopropanol International Price**. 2022. Disponível em: https://www.echemi.com/pip/isopropanol-pid_Rock3921.html. Acesso em: 9 ago. 2022.

ECHEMI. **Propylene International Price**. 2022. Disponível em: https://www.echemi.com/pip/propylene-pid_Seven1855.html. Acesso em: 9 ago. 2022.

GOMES, G. C. C. Isopropanol (CAS 67-63-0). **Revista Virtual de Química**, v. 8, n. 6, 2016.

GONZAGA, V. C. Análise de fluxos de caixa em ambientes de incerteza e sua aplicação no controle externo. **Encontro técnico nacional de auditoria de obras públicas**. 2011. Disponível em: http://www.ibraop.org.br/enaop2011/docs/Analise_Fluxos_Caixa_ambientes_20_incerteza_aplicacao_ConExt.pdf. Acesso: 8 ago. 2022.

- IDENISHI, K.; KAMAMOTO, M.; HOSAKA, S. **Method for producing isopropyl alcohol and isopropyl alcohol having reduced impurity content**. 2017. Disponível em: <https://patents.google.com/patent/WO2017217279A1/en>. Acesso em: 22 out. 2022.
- LI, C. *et al.* Electrochemical Hydrogenation of Acetone to Produce Isopropanol Using a Polymer Electrolyte Membrane Reactor. **Energies**, v. 11, n. 10, 2018.
- MORDOR INTELLIGENCE LLP. **Isopropyl Alcohol (IPA) Market - Growth, Trends, COVID-19 Impact, and Forecasts (2021 - 2026)**. 2021. Disponível em: https://www.reportlinker.com/p06177328/Isopropyl-Alcohol-IPA-Market-Growth-Trends-COVID-19-Impact-and-Forecasts.html?utm_source=GNW. Acesso em: 18 out. 2022.
- MULTICHEMIE LTDA. **ÁLCOOL ISOPROPÍLICO FISPQ 96**. Ficha de Informação de Segurança de Produto Químico. Disponível em: <https://www.multichemie.com.br/pdfs/alcool-isopropilico.pdf>. Acesso em: 8 ago. 2022.
- NIU, M. W.; RANGAIAH, G. P. Process retrofitting via intensification: a heuristic methodology and its application to isopropyl alcohol process. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 55, n. 12, p. 3614-3629, 2016.
- ONOUE, Y. *et al.* Isopropyl alcohol by direct hydration of propylene. **Bulletin of The Japan Petroleum Institute**, v. 15, n. 1, p. 50-55, 1973.
- PALTRINIERI, N.; KHAN, F. **Dynamic risk analysis in the chemical and petroleum industry**: evolution and interaction with parallel disciplines in the perspective of industrial application. Oxford: Elsevier, Butterworth-Heinemann, 2016.
- PANJAPAKKUL, W.; EL-HALWAGI, M. M. Technoeconomic analysis of alternative pathways of isopropanol production. **ACS Sustainable Chemistry & Engineering**, v. 6, n. 8, 2018.
- PETERS, M.; TIMMERHAUS, K. **Plant Design and Economics for Chemical Engineers**. 5. ed. New York: McGraw-Hill, 2003.
- SMITH, R. **Chemical Process Design and Integration**. West Sussex: John Wiley & Sons Ltd., 2016.
- TOWLER, G. P.; SINNOTT, R. **Chemical engineering design**: principles, practice, and economics of plant and process design. Oxford: Elsevier, Butterworth-Heinemann, 2013.
- TURTON, R. *et al.* **Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes**. 3. ed. New Jersey: Prentice Hall, 2014.