



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO



Análise de déficits e superávits de vapores de baixa e alta pressão em plantas de produção de etilbenzeno e estireno

Felipe Assis Martins

Uberlândia - MG

2022

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS.....
LISTA DE EQUAÇÕES.....
LISTA DE TABELAS.....
RESUMO.....	5
1- INTRODUÇÃO.....	6
2- DESCRIÇÃO DO PROCESSO.....	8
2.1- PRODUÇÃO DE ETILBENZENO	8
2.2- PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS DO ETILBENZENO	10
2.3 – PRODUÇÃO DE ESTIRENO	11
2.4 – PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS DO ESTIRENO	12
3- SIMULAÇÃO.....	14
3.1- UniSim® Design Suite.....	14
3.2- PLANTA DE PRODUÇÃO DE ETILBENZENO.....	14
3.3- PLANTA DE PRODUÇÃO DE ESTIRENO.....	23
3.4 – PLANTAS INTEGRADAS	30
4- RESULTADOS COMPUTACIONAIS.....	36
4.1-PRINCIPAIS CORRENTES DO PROCESSO E PRODUÇÃO OBTIDA	36
4.2- ANÁLISE DE DÉFCITIS E SUPERÁVITS DE UTILIDADES.....	37
5- CONCLUSÃO.....	41
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	42

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Parâmetros cinéticos envolvidos na produção de etilbenzeno.....	9
Figura 2.2: Fluxograma de produção de etilbenzeno	10
Figura 2.3: Fluxograma de produção de estireno	12
Figura 3.1: Estequiometria da reação cinética de produção de etilbenzeno.....	15
Figura 3.2: Parâmetros cinéticos da reação de produção de etilbenzeno.....	15
Figura 3.3: Estequiometria da reação de produção de dietilbenzeno.....	16
Figura 3.4: Parâmetros cinéticos da reação de produção de dietilbenzeno.....	16
Figura 3.5: Equação de equilíbrio, estequiometria.....	16
Figura 3.6: Equação de equilíbrio, cinética.....	17
Figura 3.7: Estequiometria da produção de etilbenzeno, reação entre benzeno e etileno.....	18
Figura 3.8: Cinética da produção de etilbenzeno, reação entre benzeno e etileno.....	18
Figura 3.9: Fluxograma de processos obtido por meio da simulação pelo UniSim Design.....	19
Figura 3.10: Sumário de correntes do processo.....	20
Figura 3.11: Sumário de correntes obtido pelo UniSim Design.....	22
Figura 3.12: Estequiometria da reação de decomposição do etilbenzeno em benzeno e etileno.....	23
Figura 3.13: Cinética da reação de decomposição do etilbenzeno em benzeno e etileno.....	23
Figura 3.14: Estequiometria da reação de hidrodealkilação do etilbenzeno.....	23
Figura 3.15: Cinética da reação de hidrodealkilação do etilbenzeno.....	24
Figura 3.16: Estequiometria da reação de equilíbrio, produção de estireno.....	25
Figura 3.17: Cinética da reação de equilíbrio, produção de estireno.....	25
Figura 3.18: Fluxograma de processos obtido por meio da simulação pelo UniSim Design.....	26
Figura 3.19: Sumário de correntes do fluxograma de produção do estireno.....	27
Figura 3.20: Sumário de correntes da produção de estireno obtido no UniSim Design.....	29
Figura 3.21: Fluxograma das plantas de produção de etilbenzeno e estireno unificadas.....	30
Figura 3.22: Lista geral de componentes da simulação unificada.....	31
Figura 3.23: Pacote termodinâmico associados aos vapores e água de resfriamento.....	31
Figura 3.24: Pacote termodinâmico associado às correntes de processo.....	32
Figura 4.1: Principais correntes do processo, condições e vazões molares.....	36
Figura 4.2: Composições das principais correntes do processo.....	38
Figura 4.3: Equipamentos utilizados para cálculo de utilidades nas colunas de destilação.....	39

LISTA DE EQUAÇÕES

Equação 2.1: Formação do etilbenzeno	8
Equação 2.2: Reação de produção de dietilbenzeno	8
Equação 2.3: Decomposição em equilíbrio entre dietilbenzeno e etilbenzeno	8
Equação 2.4: Reação de formação de etilbenzeno a partir de tolueno	8
Equação 2.5: Cinética geral das reações do processo	8
Equação 2.6: Formação de estireno	12
Equação 2.7: Cinética de equilíbrio de formação do estireno, reação direta	12
Equação 2.8: Cinética de equilíbrio de formação do estireno, reação indireta	12
Equação 2.8: Reação de decomposição do etilbenzeno em etileno e benzeno	12
Equação 2.9: Cinética reacional de decomposição do etilbenzeno em metano e benzeno	13
Equação 2.10: Reação de decomposição do etilbenzeno em metano e benzeno	13
Equação 2.11: Cinética reacional da decomposição do etilbenzeno em metano e benzeno.....	13

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1: Propriedades físico-químicas do etilbenzeno	11
Tabela 2.2: Propriedades físico-químicas do estireno	13
Tabela 3.1: Lista de trocadores de calor e parâmetros	33
Tabela 3.2: Lista de colunas de destilação e parâmetros	35
Tabela 3.3: Lista de reatores PFR e parâmetros	35
Tabela 3.4: Lista de bombas utilizadas e parâmetros	35
Tabela 4.1: Correntes de utilidades na planta de produção de etilbenzeno	38
Tabela 4.2: Geração de utilidades na planta de produção de etilbenzeno	38
Tabela 4.3: Consumo de utilidades na planta de produção de etilbenzeno	38
Tabela 4.4: Correntes de utilidades na planta de produção de estireno	38
Tabela 4.5: Geração de utilidades na planta de produção de estireno	38
Tabela 4.6: Consumo de utilidades na planta de produção de estireno	38
Tabela 4.7: Consumo de utilidades nas colunas de destilação (produção de etilbenzeno)	39
Tabela 4.8: Consumo de utilidades nas colunas de destilação (produção de estireno)	40
Tabela 4.9: Consumo líquido e economia de utilidades nas plantas integradas	41

RESUMO

O presente trabalho tem o intuito de se verificar a viabilidade da integração das plantas de produção de etil benzeno e estireno, com intuito de economia no consumo de utilidades, em especial vapores de baixa e alta pressão. O estireno é um hidrocarboneto aromático, não saturado, de fórmula química $C_6H_5CHCH_2$. É um composto amplamente utilizado e de diversas aplicações, em especial elastômeros termoplásticos e tipicamente produzido a partir da reação de desidrogenação do etilbenzeno. Por ser um composto de vital importância econômica e de aplicação diária, análises técnicas e econômicas de sua produção se fazem altamente necessárias, com intuito de otimizar sua produção, reduzindo custos e aumentando o rendimento de suas plantas. Uma parte de suma importância em tais análises é a simulação do processo de geração de estireno, o que pode ser realizado por meio de softwares como o Unisim Design, que a partir da configuração adequada de listas de componentes, reações, correntes de alimentação e configuração de equipamentos, é capaz de gerar com precisão dados fundamentais do processo, como correntes de saída, consumo de utilidades, rendimento, dentre outros dados de interesse. Assim, o projeto visa realizar estudo dos benefícios de se integrar uma planta de produção de etilbenzeno à uma planta de produção de estireno, com foco na economia no consumo de vapores de baixa e alta pressão.

1. INTRODUÇÃO

A indústria química e suas derivações estão presentes no cotidiano de qualquer cidadão e nas mais diversas formas, seja na alimentação, na produção de combustíveis, no vestuário, na indústria farmacêutica, dentre outras. Dessa forma, o engenheiro químico executa vital papel no funcionamento da sociedade hoje, seja no dimensionamento de equipamentos industriais, pesquisa e criação de novos produtos, controle de qualidade ou auxiliando na operação de plantas industriais, garantindo o abastecimento de itens utilizados rotineiramente pela sociedade.

Assim, análises técnicas e econômicas são fundamentais para aperfeiçoamento ou até mesmo criação de novos processos industriais, visando otimizá-los, gerando menor custo e maior produtividade, com impacto final positivo na vida da sociedade. Dominando as etapas de produção de determinado composto, é possível construir um ambiente de simulação que permita, por modelos computacionais e conceitos termodinâmicos, cinéticos e reacionais, prever com relativa precisão, dados fundamentais para a concepção de um projeto industrial, como dimensionamento de reatores, trocadores de calor, bombas, colunas de destilação, correntes de produto esperadas, rendimentos reacionais, consumo de utilidades, dentre muitos outros.

Desse modo, a simulação de processos, por meio de softwares como o Unisim Design, se torna parte primordial de um projeto adequado e viável, ao gerar resultados que nortearão a viabilidade técnica e econômica do projeto, bem como sua execução e possíveis adaptações.

Objetivo geral:

- Avaliação de déficits e superávits de produção de vapores de baixa, média e alta pressão em plantas de produção de etilbenzeno e estireno

Objetivos específicos:

- Compreensão do fluxograma de processo para a produção de etilbenzeno e de estireno, correntes de processo, utilidades, equipamentos.
- Configuração e simulação das duas plantas industriais no Unisim Design.
- Cálculo de utilidades dos processos.

O presente trabalho tem o intuito de, inicialmente, descrever o processo de produção de etilbenzeno e estireno, condições e cinética reacional, bem como uma breve descrição de suas características físico-químicas. Em seguida, será abordada a configuração e simulação dos processos no software e seus principais resultados. Após concluída essa etapa, será verificada os possíveis benefícios da

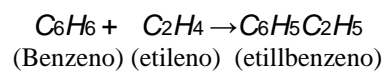
referida integração, e tendo como base a geração de vapores de baixa e alta pressão de cada unidade, será concluída a vantagem ou desvantagem de se unir os dois processos em uma mesma unidade fabril.

2. DESCRIÇÃO DOS PROCESSOS

A seguir, são apresentadas as reações que ocorrem nos processos de produção de etilbenzeno e estireno, parâmetros cinéticos e uma breve descrição do processo, que servirão como base para configurar o modelo computacional que irá construir a simulação das unidades de produção;

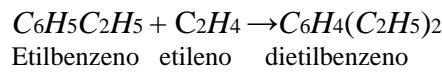
2.1 PRODUÇÃO DE ETILBENZENO:

A única razão para a produção de etilbenzeno se dá pela matéria prima para a produção de estireno, já que sua destinação está intimamente ligada ao consumo de estireno pela sociedade (Donald L. Burdick e William L. Leffler, 2010.) A reação de produção de etilbenzeno se dá pela reação direta entre benzeno e etileno, conforme equação abaixo:

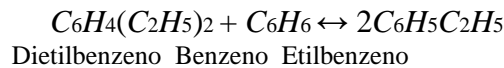


Equação 2.1: Formação do etilbenzeno

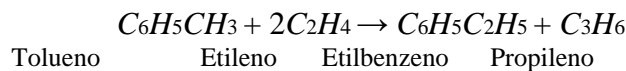
No entanto, também é notada a incidência de reações paralelas e não desejadas no processo, conforme descritas abaixo:



Equação 2.2: Reação de produção de dietilbenzeno



Equação 2.3: Decomposição em equilíbrio entre dietilbenzeno e etilbenzeno



Equação 2.4: Reação de formação de etilbenzeno a partir de tolueno

De modo geral, a cinética de todas as reações se dá pela seguinte fórmula geral:

$$-r_{i,o} = k_{o,i} e^{\frac{-E_i}{RT}} C_{\text{etileno}}^a C_{\text{etilbenzeno}}^b C_{\text{tolueno}}^c C_{\text{benzeno}}^d C_{\text{dietilbenzeno}}^e$$

Equação 2.5: Cinética geral das reações do processo

Os parâmetros são informados por Turton, de acordo com a figura abaixo:

<i>i</i>	E_i kcal/kmol	$k_{o,i}$	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>e</i>
1	22,500	1.00×10^6	1	0	0	1	0
2	22,500	6.00×10^5	1	1	0	0	0
3	25,000	7.80×10^6	0	0	0	1	1
4	20,000	3.80×10^8	2	0	1	0	0

Figura 2.1: Parâmetros cinéticos envolvidos na produção de etilbenzeno (TURTON, et. tal 2018.)

Onde,

$-r_i$ = taxa de velocidade da reação ($\text{kmol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1})$)

k_0 = fator pré-exponencial

E_0 = energia de ativação (kcal/kmol)

R = constante universal dos gases = 8,314 kJ/(mol.K)

T = temperatura (K)

C_i = concentração molar

Descrição do processo:

Uma corrente fresca de benzeno é alimentada à um vaso, onde é misturada à benzeno de uma corrente de reciclo do processo. Deste vaso, a corrente é bombeada à uma pressão de cerca de 2000 KPa e levada à um aquecedor, sendo elevada à uma temperatura de cerca de 400°C. O benzeno pré-aquecido é então misturada a uma parte da corrente de etileno, onde passarão por três reatores de leito empacotado, com alimentação e resfriamento entre a série. A reação é exotérmica e se dá na fase gasosa. Na saída do terceiro reator, temos uma corrente contendo produtos, subprodutos, benzeno e etileno não reagidos. Essa corrente do reator será resfriada em dois trocadores de calor, onde os vapores gerados serão utilizados na planta de produção de estireno. A corrente resfriada de saída dos trocadores de calor se encontra em duas fases, que serão separadas em um vaso. A corrente de condensado é alimentada à uma primeira torre de destilação, onde o produto de topo é predominantemente benzeno, que será recirculado como reagente do processo. Os produtos de fundo são alimentados a uma segunda coluna de destilação, onde o produto de topo é basicamente etilbenzeno puro, a ser enviado a unidade de produção de estireno.

O produto de fundo da segunda torre de destilação contém todo o dietilbenzeno e traços de etilbenzeno. Tal corrente será misturada ao benzeno recirculado, aquecida e enviada à um quarto

reator, onde o benzeno em excesso será reagido para a produção de mais etilbenzeno e benzeno não consumido. Um fluxograma do processo pode ser visualizado a seguir:

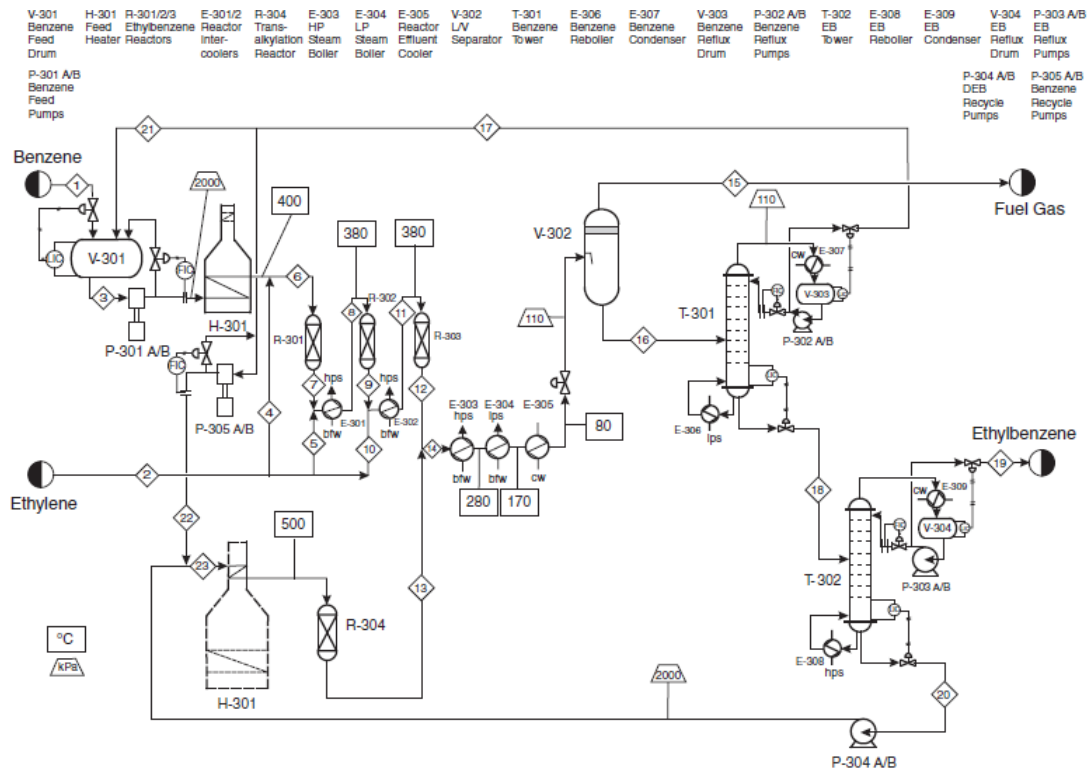


Figure B.2.1 Unit 300: Ethylbenzene Process Flow Diagram

Figura 2.2: Fluxograma de produção de etilbenzeno (TURTON et. al, 2018).

2.2 PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS DO ETILBEZENO

Nome do Produto	Etilbenzeno
Fórmula molecular	C ₈ H ₁₀
Família Química	Hidrocarboneto Aromático
Aparência	LÍQUIDO; SEM COLORAÇÃO; ODOR DE GASOLINA; FLUTUA NA ÁGUA; INFLAMÁVEL; PRODUZ VAPORES IRRITANTES
Ponto de fulgor	26,7 °C (V.A.); 15 °C (V.F.)
Temperatura de Ignição	9460,3 °C
Peso Molecular	106,17 (g/mol)

Ponto de Ebulição	136,2°C
Ponto de Fusão	-94,97°C
Densidade	0,867 A 20 °C (LÍQUIDO)

Tabela 2.1: Propriedades físico-químicas do etilbenzeno (CETESB, 2022.)

2.3 PRODUÇÃO DE ESTIRENO

A alimentação de etilbenzeno é misturada a etilbenzeno recirculado do processo, aquecida e posteriormente misturada a vapor superaquecido. O vapor é um inerte na equação e desloca o equilíbrio reacional para a direita, ao diluir a concentração dos componentes. Já que a reação de produção de estireno é altamente endotérmica, o vapor superaquecido também é responsável por fornecer energia para a reação. As reações de decomposição do etilbenzeno em benzeno e etileno, hidrodealquilação deste gerando metano e tolueno são indesejadas e também estão relacionadas abaixo. Os reagentes são então, alimentados a dois reatores de leito empacotado, com aquecimento intermediário. A corrente de produto é resfriada, com consequente geração de vapor e então enviada à um separador trifásico. Nesta etapa, os gases mais leves (hidrogênio, metano e etileno), água e a corrente orgânica são separadas em três correntes distintas. O hidrogênio separado é posteriormente purificado e enviado como alimentação para outro segmento da planta. A corrente de benzeno e etileno será aproveitada à uma fábrica petroquímica. Já a corrente desejada será destilada uma vez para remover benzeno e tolueno e alimentada à uma segunda torre de destilação, onde o etilbenzeno não reagido será removido e recirculado ao processo.

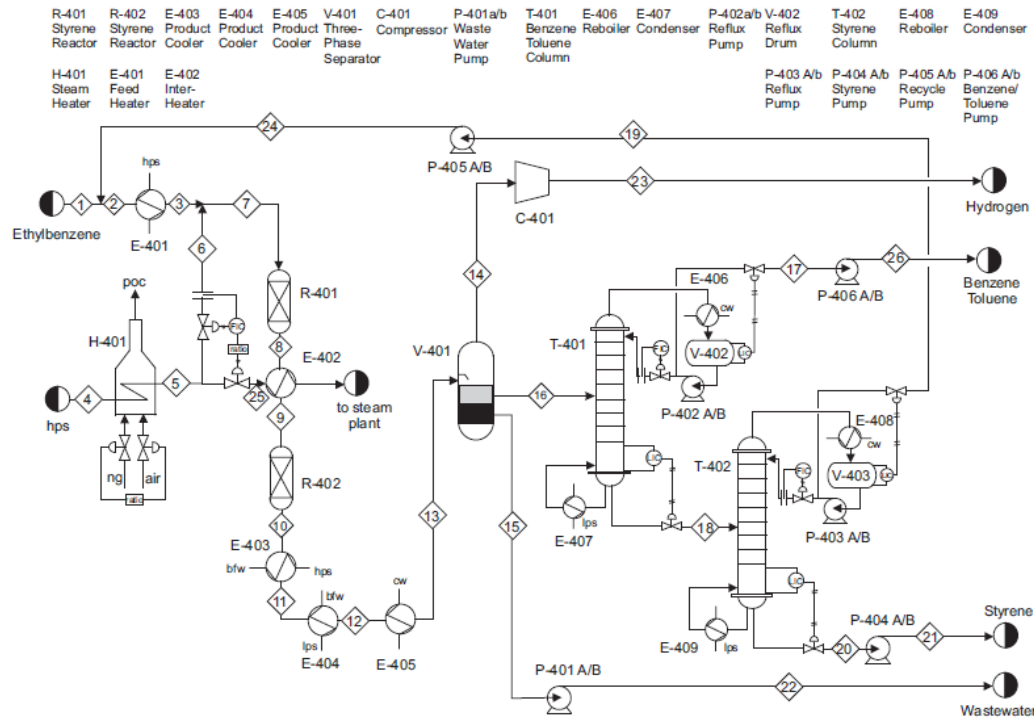
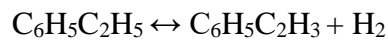


Figure B.3.1 Unit 400: Styrene Process Flow Diagram

Figura 2.3: Fluxograma de produção de estireno (TURTON et. al, 2018).

As reações acima descritas, bem como a cinética reacional envolvida na produção de estireno e as reações indesejadas, estão descritas abaixo.



Etilbenzeno Estireno Hidrogênio

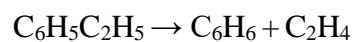
Equação 2.6: Formação de estireno

$$r_1 = 10,177 * 10^{11} \exp\left(-\frac{21708}{RT}\right) p_{eb}$$

Equação 2.7: Cinética de equilíbrio de formação do estireno, reação direta

$$r_2 = 20,965 \left(\frac{7804}{RT}\right) p_{estireno} * p_{hidrogênio}$$

Equação 2.8: Cinética de equilíbrio de formação do estireno, reação indireta

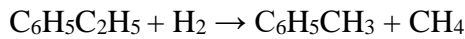


Etilbenzeno Benzeno Etileno

Equação 2.8: Reação de decomposição do etilbenzeno em etileno e benzeno

$$r_3 = 7,206 * 10^{11} \exp\left(-\frac{49675}{RT}\right) p_{eb}$$

Equação 2.9: Cinética reacional de decomposição do etilbenzeno em metano e benzeno



Etilbenzeno Hidrogênio Tolueno Metano

Equação 2.10: Reação de decomposição do etilbenzeno em metano e benzeno

$$r_4 = 1,724 * 10^6 \exp\left(-\frac{26857}{RT}\right) p_{\text{eb}} p_{\text{hidrogênio}}$$

Equação 2.11: Cinética reacional da decomposição do etilbenzeno em metano e benzeno

Onde:

$-r_i$ = taxa de velocidade da reação ($\text{kmol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1})$)

R = constante universal dos gases = 8,314 kJ/(mol.K)

T = temperatura (K)

p_i = pressão parcial do componente (kPa)

2.4 PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS DO ETILBEZENO

Nome do Produto	Estireno
Fórmula molecular	C8H8
Família Química	Hidrocarboneto Aromático
Aparência	Líquido aquoso; sem coloração a amarelo claro; Odor doce agradável; flutua na água; inflamável; produz vapores irritantes
Ponto de fulgor	33,9 °C
Temperatura de Ignição	490,3°C
Peso Molecular	104,15
Ponto de Ebulição	146,2°C
Densidade Relativa do Líquido	0,906 a 20°C
Ponto de fusão	-31°C

Tabela 2.2: Propriedades físico-químicas do estireno (CETESB, 2022).

3. SIMULAÇÃO

Para se iniciar a construção do modelo, foram estudados os fluxogramas de processos das unidades de produção de etilbenzeno e estireno. A fins de se facilitar a simulação, esta foi dividida em etapas. Primeiro, foi construída um fluxograma de processos de etilbenzeno. Os componentes foram listados e inseridos no ambiente computacional, bem como os modelos termodinâmicos adequados e suas reações, configuradas. Ao término do modelo, com obtenção de resultados satisfatórios, a unidade de produção de estireno foi igualmente simulada, porém em um outro ambiente computacional. Por fim, as duas simulações foram integradas em um terceiro modelo, e a produção de etilbenzeno foi ajustada para atender a demanda produtiva de estireno da simulação construída previamente e os aquecedores e resfriadores foram substituídos por trocadores de calor, permitindo o cálculo dos consumos de utilidades e análise de economia destas. Tal metodologia teve como intuito economizar recursos computacionais, facilitar a construção do modelo final e permitir uma visualização mais efetiva da integração, ajudando a identificar as correntes que poderiam gerar economias no processo.

3.1 Unisim Design Suite

Atualmente, existem uma série de programas que permitem a simulação de processos com grande acurácia. Nesse trabalho, o software utilizado é o UniSim® Design Suite versão R460.1 da empresa norte-americana Honeywell. Este é um software que permite o cálculo com precisão de propriedades físicas, de transporte, separação, cálculos cinéticos e reacionais, podendo ser utilizado em estado dinâmico ou estacionário (HONEYWELL, 2022).

3.2 PLANTA DE PRODUÇÃO DE ETILBENZENO

A fins de simulação, primeiro se optou pela construção da planta de etilbenzeno em um primeiro ambiente de simulação. Para tanto, foi necessária a configuração de todas as reações envolvidas no processo, com base nos dados descritos acima. Uma breve descrição das reações e suas configurações estão descritas a seguir, onde os parâmetros cinéticos inseridos foram aqueles informados no capítulo 2 deste trabalho.

A primeira reação descrita é a reação de produção de etilbenzeno, por meio da adição de benzeno e etileno, configurada como uma reação cinética.

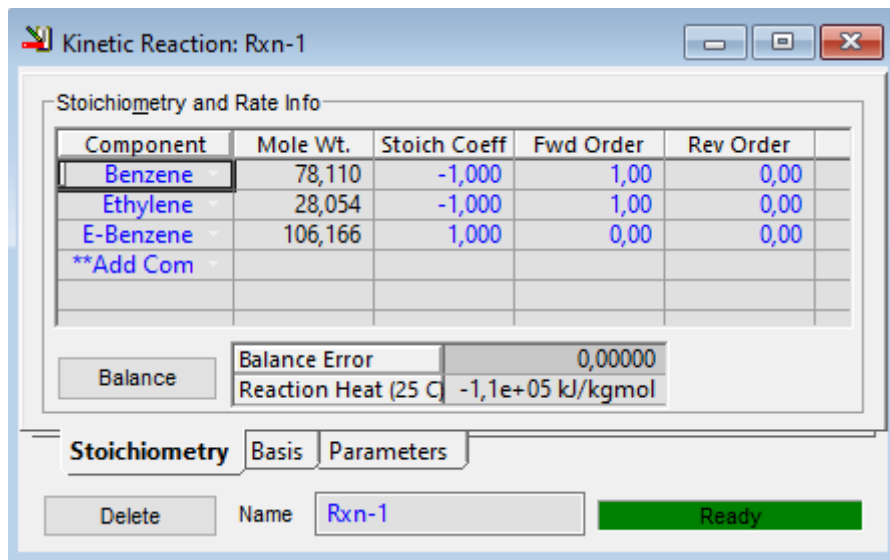


Figura 3.1: Estequiometria da reação cinética de produção de etilbenzeno

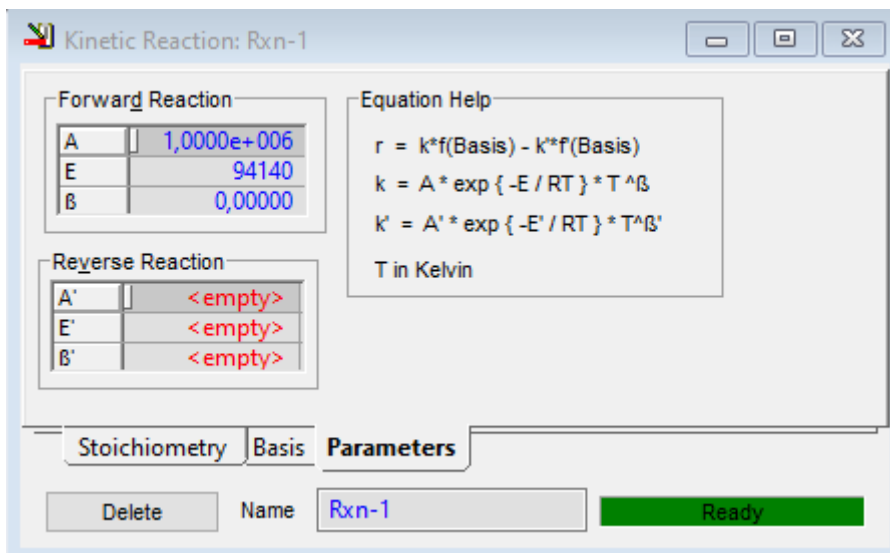


Figura 3.2: Parâmetros cinéticos da reação de produção de etilbenzeno

A seguir, é representada a reação indesejada de produção de dietilbenzeno, por meio da reação entre etilbenzeno e etileno, também configurada como uma reação cinética.

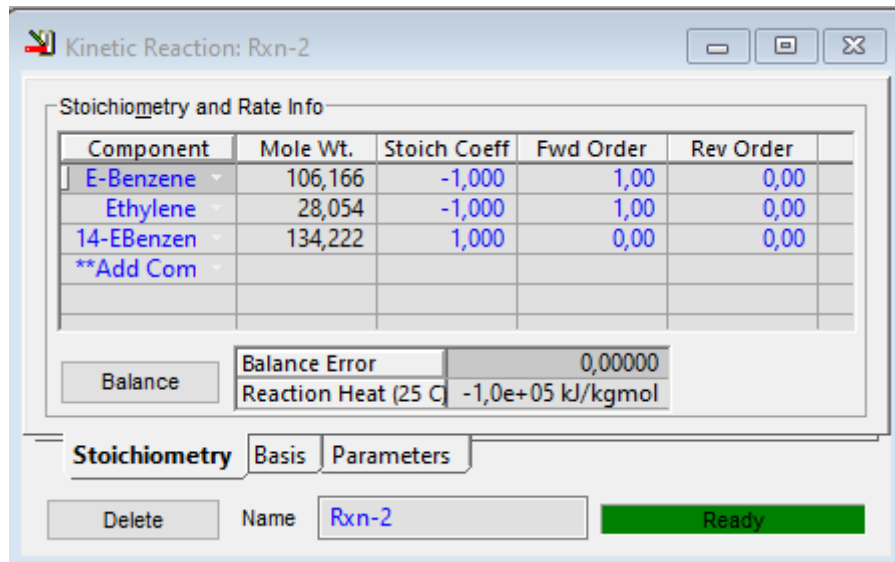


Figura 3.3: Estequiometria da reação de produção de dietilbenzeno

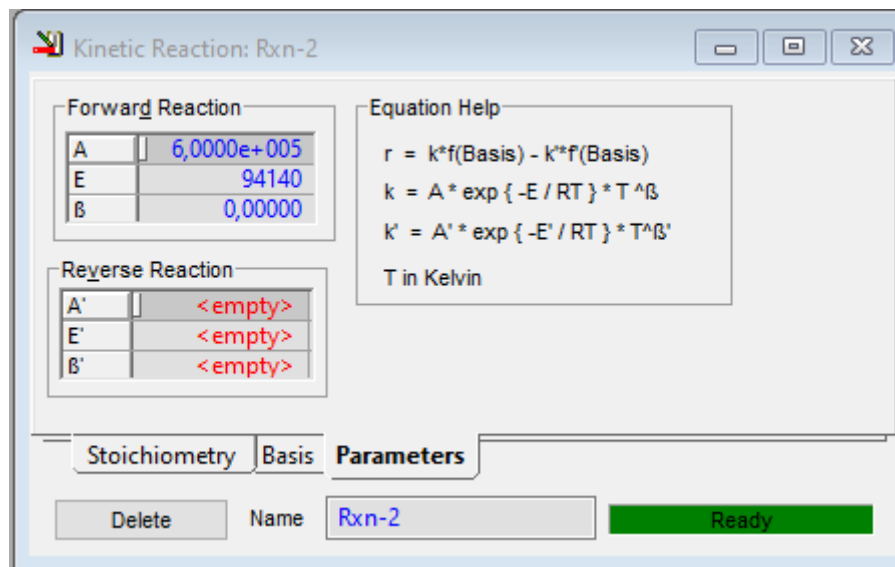


Figura 3.4: Parâmetros cinéticos da reação de produção de dietilbenzeno

Conforme mencionado no processo produtivo do etilbenzeno, uma reação de equilíbrio também é identificada e foi configurada conforme os parâmetros abaixo:

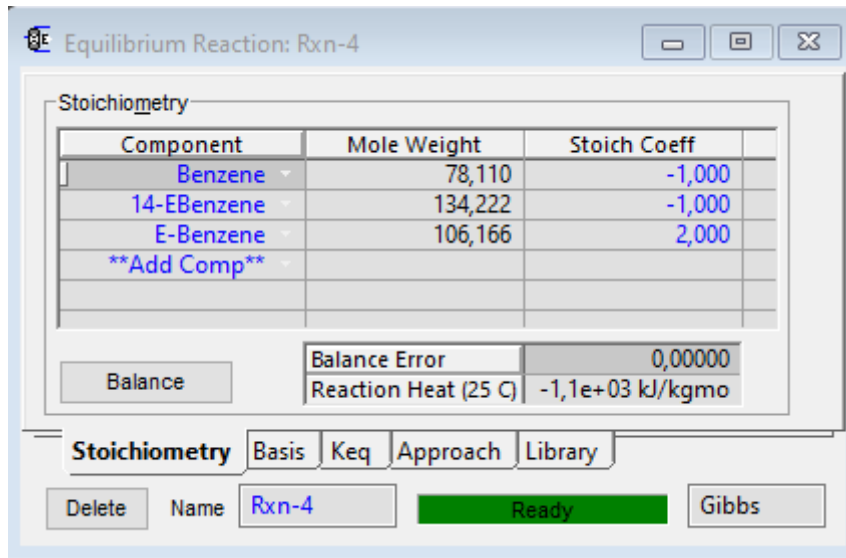


Figura 3.5: Equação de equilíbrio, estequiometria

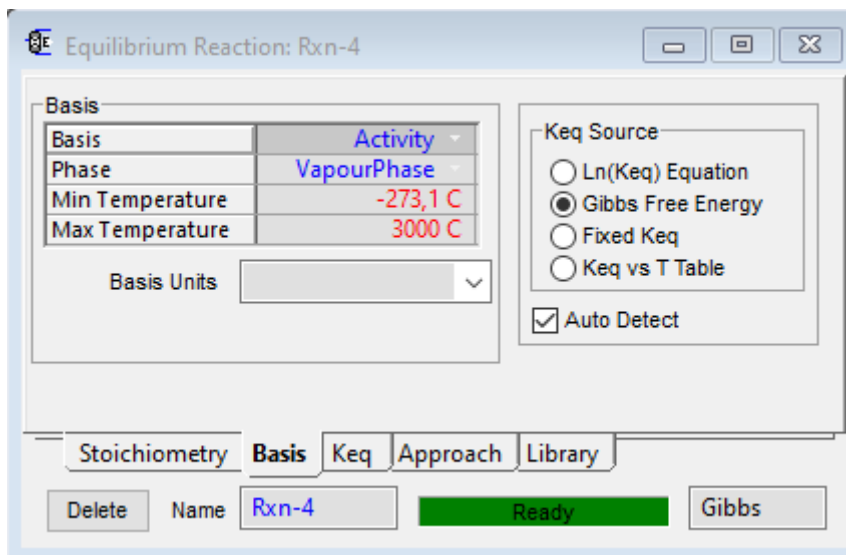


Figura 3.6: Equação de equilíbrio, cinética

Por fim, a reação cinética onde etilbenzeno é produzido por meio da reação de benzeno e etileno também foi configurada:

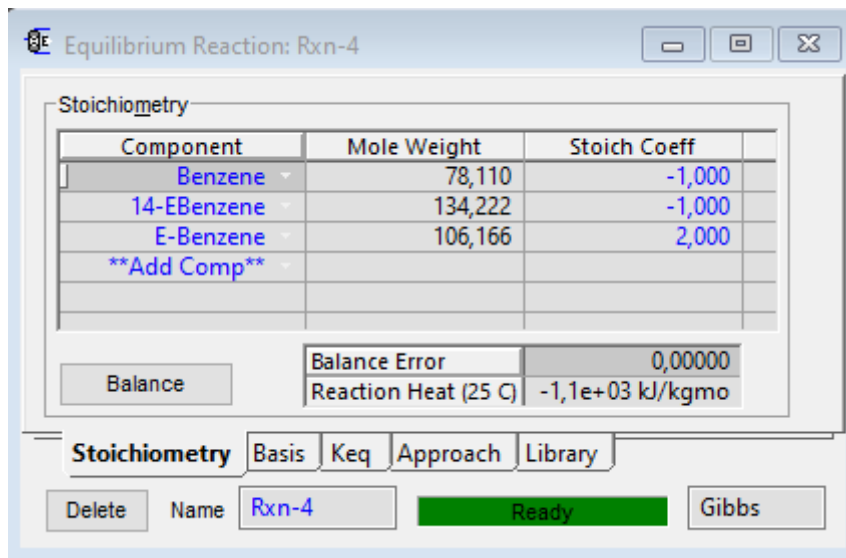


Figura 3.7: Estequiometria da produção de etilbenzeno, reação entre benzeno e etileno

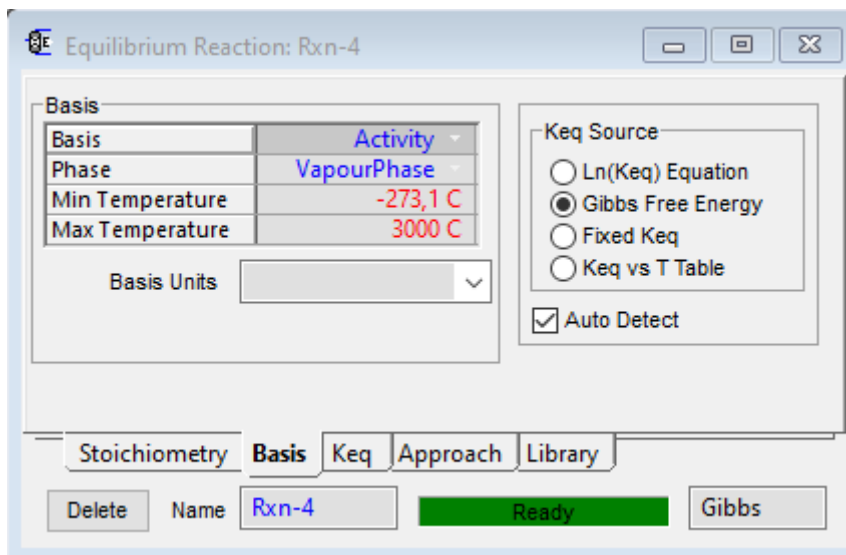


Figura 3.8: Cinética da produção de etilbenzeno, reação entre benzeno e etileno

O processo ocorre da seguinte forma: benzeno fresco é alimentado ao processo e misturado a benzeno recirculado (MIX-100). Após a mistura, a nova corrente é bombeada de 110KPa para 2000KPa, e enviada para um aquecedor (E-100), onde a mistura é aquecida até cerca de 400°C e misturada com uma parte da alimentação de etileno antes da entrada no primeiro reator PFR (PFR-100). A alimentação de etileno é dividida em três correntes, sendo acrescida entre os três reatores existentes no processo. A corrente de saída do primeiro reator (corrente 7) é então misturada à mais etileno (5) resfriada à uma temperatura de 380°C (E-101) e conduzida à um segundo reator (PFR-101). A saída do segundo reator (9) é misturada à última alimentação de etileno (10), no misturador MIX-103, resfriada novamente (E-102) e reagida no terceiro PFR (PFR-102). No processo de resfriamento das correntes, vapor é gerado, onde será estudada a integração à planta de estireno. A saída do terceiro

reator (12), contém produtos, subprodutos, benzeno não reagido e pequenas concentrações de etileno e outros não reagidos. Esse efluente do reator será resfriado nos equipamentos E-103, E-104 e E-105, com geração de vapores de alta e baixa pressão. Essa misturada saída do E-105 (corrente 14.3) é levada à um separador bifásico. Os gases mais leves (corrente 15) serão utilizadas como gases de queima e a corrente líquida é enviada à primeira torre de destilação, onde benzeno não reagido é retirado como produto de topo e recirculado ao processo (corrente 17). O produto de fundo é então enviado à segunda coluna (T-101), onde o etilbenzeno extraído (19) é retirado no topo e enviado para a produção de estireno. O produto de fundo, contendo basicamente dietilbenzeno e traços de etilbenzeno é enviado também como reciclo, onde é reagido em um reator de equilíbrio com o restante do benzeno visando diminuir a presença de dietilbenzeno ao processo. O reator gera uma corrente contendo benzeno não reagido e etilbenzeno.

A primeira parte da simulação, ou seja, a planta inicial de produção de etilbenzeno, pode ser visualizada abaixo.

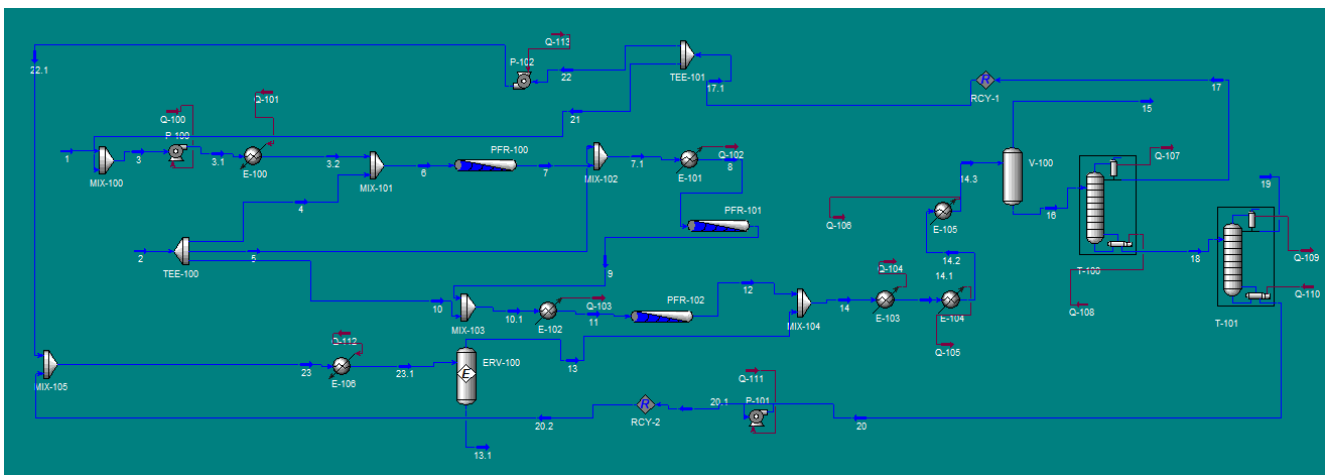


Figura 3.9: Fluxograma de processos obtido por meio da simulação pelo UniSim Design

O sumário de correntes retirado do Turton, que nortearam o ambiente de simulação pode ser na página a seguir:

Stream Number	1	2	3	4	5	6
Temperature (°C)	25.0	25.0	58.5	25.0	25.0	383.3
Pressure (kPa)	110.0	2000.0	110.0	2000.0	2000.0	1985.0
Vapor mole fraction	0.0	1.0	0.0	1.0	1.0	1.0
Total kg/h	7761.3	2819.5	17,952.2	845.9	986.8	18,797.9
Total kmol/h	99.0	100.0	229.2	30.0	35.0	259.2
Component Flowrates (kmol/h)						
Ethylene	0.00	93.00	0.00	27.90	32.55	27.90
Ethane	0.00	7.00	0.00	2.10	2.45	2.10
Propylene	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Benzene	97.00	0.00	226.51	0.00	0.00	226.51
Toluene	2.00	0.00	2.00	0.00	0.00	2.00
Ethylbenzene	0.00	0.00	0.70	0.00	0.00	0.70
1,4-Diethylbenzene	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Stream Number	7	8	9	10	11	12
Temperature (°C)	444.1	380.0	453.4	25.0	380.0	449.2
Pressure (kPa)	1970.0	1960.0	1945.0	2000.0	1935.0	1920.0
Vapor mole fraction	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
Total kg/h	18,797.9	19,784.7	19,784.7	986.8	20,771.5	20,771.5
Total kmol/h	234.0	269.0	236.4	35.0	271.4	238.7
Component Flowrates (kmol/h)						
Ethylene	0.85	33.40	0.62	32.55	33.17	0.54
Ethane	2.10	4.55	4.55	2.45	7.00	7.00
Propylene	1.83	1.81	2.00	0.00	2.00	2.00
Benzene	203.91	203.91	174.96	0.00	174.96	148.34
Toluene	0.19	0.19	0.0026	0.00	0.0026	0.00
Ethylbenzene	24.28	24.28	49.95	0.00	49.95	70.57
1,4-Diethylbenzene	0.87	0.87	4.29	0.00	4.29	10.30

Stream Number	13	14	15	16	17	18
Temperature (°C)	497.9	458.1	73.6	73.6	81.4	145.4
Pressure (kPa)	1988.0	1920.0	110.0	110.0	105.0	120.0
Vapor mole fraction	1.0	1.0	1.0	0.0	0.0	0.0
Total kg/h	4616.5	25,387.9	1042.0	24,345.9	13,321.5	11,024.5
Total kmol/h	51.3	290.0	18.6	271.4	170.2	101.1
Component Flowrates (kmol/h)						
Ethylene	0.00	0.54	0.54	0.00	0.00	0.00
Ethane	0.00	7.00	7.00	0.00	0.00	0.00
Propylene	0.00	2.00	2.00	0.00	0.00	0.00
Benzene	29.50	177.85	8.38	169.46	169.23	0.17
Toluene	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Ethylbenzene	21.69	92.25	0.71	91.54	0.92	90.63
1,4-Diethylbenzene	0.071	10.37	0.013	10.35	0.00	10.35

Stream Number	19	20	21	22	23
Temperature (°C)	139.0	191.1	82.6	82.6	121.4
Pressure (kPa)	110.0	140.0	2000.0	2000.0	2000.0
Vapor mole fraction	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Total kg/h	9538.6	1485.9	10,190.9	3130.6	4616.5
Total kmol/h	89.9	11.3	130.2	40.0	51.3
Component Flowrates (kmol/h)					
Ethylene	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Ethane	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Propylene	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Benzene	0.17	0.00	129.51	39.78	39.78
Toluene	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Ethylbenzene	89.72	0.91	0.70	0.22	1.12
1,4-Diethylbenzene	0.0001	10.35	0.00	0.00	10.35

Figura 3.10: Sumário de correntes do processo (TURTON, et. tal 2018).

Neste primeiro momento, com base no fluxograma e dados retirados de Turton, foram alimentados 99 kmol/h na corrente 1 (97 kmol/h de benzeno e 2kmol/h de tolueno) e 100 kmol/h na corrente de alimentação 2 (93 kmol/h de etileno e 7 kmol/h de etano). Após o término do processo, com a devida configuração de reatores, colunas de destilação e demais equipamentos do processo, foi obtido um produto de topo na saída da segunda coluna de destilação, visualizada na corrente 19, de 87,26981 kmol/h, sendo destes, 82,906 kmol/h de etilbenzeno, o produto de interesse.

Um sumário de todas as obtidas por meio da simulação pode ser visualizado na figura a seguir:

Material Streams													
	1	3	3.1	3.2	2	4	5	10	6	7	7.1	8	
Vapour Fraction	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
Temperature	C	25,00	41,48	43,23	400,0	25,00	25,00	25,00	25,00	383,4	449,5	429,2	380,0
Pressure	kPa	110,0	110,0	2000	2000	2000	2000	2000	2000	2000	2000	2000	1980
Molar Flow	kgmole/h	99,00	229,2	229,2	229,2	100,0	30,00	35,00	35,00	259,2	231,9	269,9	269,9
Mass Flow	kg/h	7761	1,796e+004	1,796e+004	1,796e+004	2819	845,8	988,8	988,8	1,881e+004	1,881e+004	1,980e+004	1,980e+004
Liquid Volume Flow	m3/h	8,800	20,43	20,43	20,43	7,400	2,220	2,590	2,590	22,65	21,56	24,15	24,15
Heat Flow	kJ/h	4,852e+006	1,145e+007	1,150e+007	2,993e+007	4,274e+006	1,282e+006	1,498e+006	1,498e+006	3,121e+007	3,121e+007	3,271e+007	3,050e+007
		9	10.1	11	12	14	14.1	14.2	14.3	16	15	17	18
Vapour Fraction		1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	0,0742	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000
Temperature	C	452,1	433,0	380,0	448,6	456,7	280,0	170,0	80,00	80,00	80,00	53,55	144,8
Pressure	kPa	1960	1960	1940	1920	1920	1900	130,0	110,0	110,0	110,0	110,0	110,0
Molar Flow	kgmole/h	234,9	289,9	269,9	237,5	269,7	269,7	269,7	269,7	249,7	20,01	146,4	103,4
Mass Flow	kg/h	1,980e+004	2,078e+004	2,078e+004	2,078e+004	2,420e+004	2,420e+004	2,420e+004	2,420e+004	2,299e+004	1212	1,147e+004	1,152e+004
Liquid Volume Flow	m3/h	22,87	25,46	25,46	24,17	28,10	28,10	28,10	28,10	26,33	1,772	13,08	13,25
Heat Flow	kJ/h	3,050e+007	3,200e+007	2,946e+007	2,946e+007	3,369e+007	2,409e+007	1,914e+007	7,153e+006	6,722e+006	4,310e+005	7,418e+006	2,977e+005
		20	19	17.1	22	21	20.1	23	23.1	22.1	20.2	13.1	13
Vapour Fraction		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000
Temperature	C	185,8	140,3	53,56	53,56	53,56	187,3	143,7	500,0	55,29	187,3	502,9	502,9
Pressure	kPa	110,0	110,0	110,0	110,0	110,0	2000	2000	1990	2000	2000	1990	1990
Molar Flow	kgmole/h	16,09	87,27	146,4	16,19	130,2	16,09	32,24	32,24	16,19	16,04	0,0000	32,24
Mass Flow	kg/h	2151	9365	1,147e+004	1289	1,020e+004	2151	3415	3415	1289	2146	0,0000	3415
Liquid Volume Flow	m3/h	2,488	10,77	13,08	1,447	11,63	2,488	3,928	3,928	1,447	2,481	0,0000	3,931
Heat Flow	kJ/h	-4,470e+005	8,553e+005	7,419e+006	8,208e+005	6,599e+006	-4,395e+005	3,862e+005	4,226e+006	8,248e+005	-4,383e+005	0,0000	4,226e+006

Figura 3.11: Sumário de correntes obtido pelo UniSim Design

3.3 PLANTA DE PRODUÇÃO DE ESTIRENO

Após a conclusão da construção da planta de etilbenzeno, o passo seguinte foi a conclusão da unidade de produção de estireno, construída de modo semelhante. A seguir, serão apresentadas as reações envolvidas no processo (com os parâmetros também configurados conforme capítulo 2), o fluxograma da planta de estireno, bem como o sumário de correntes desta.

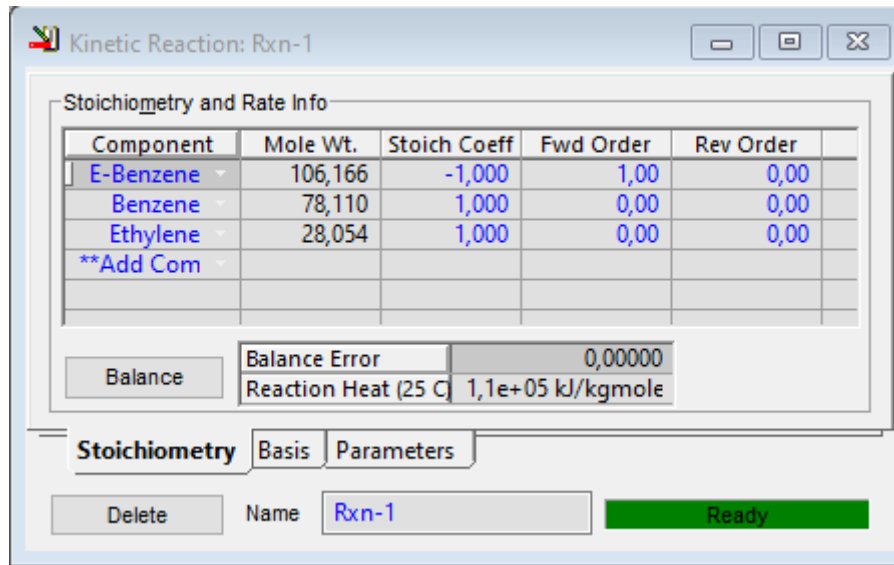


Figura 3.12: Estequiometria da reação de decomposição do etilbenzeno em benzeno e etileno.

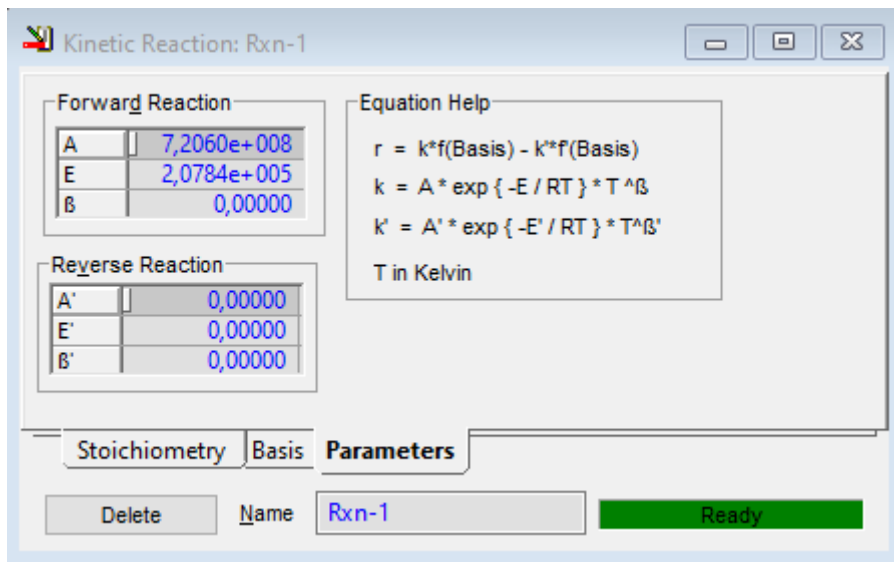


Figura 3.13: Cinética da reação de decomposição do etilbenzeno em benzeno e etileno.

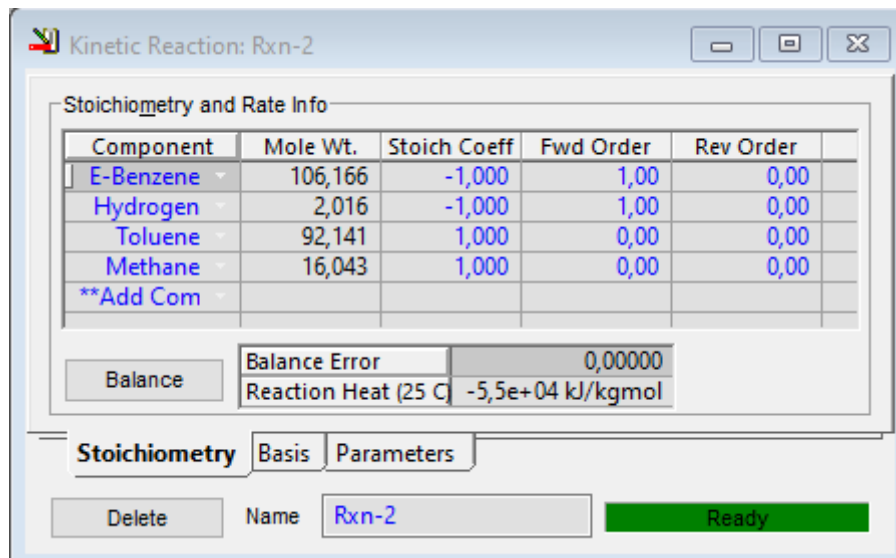


Figura 3.14: Estequiometria da reação de hidrodealquilação do etilbenzeno

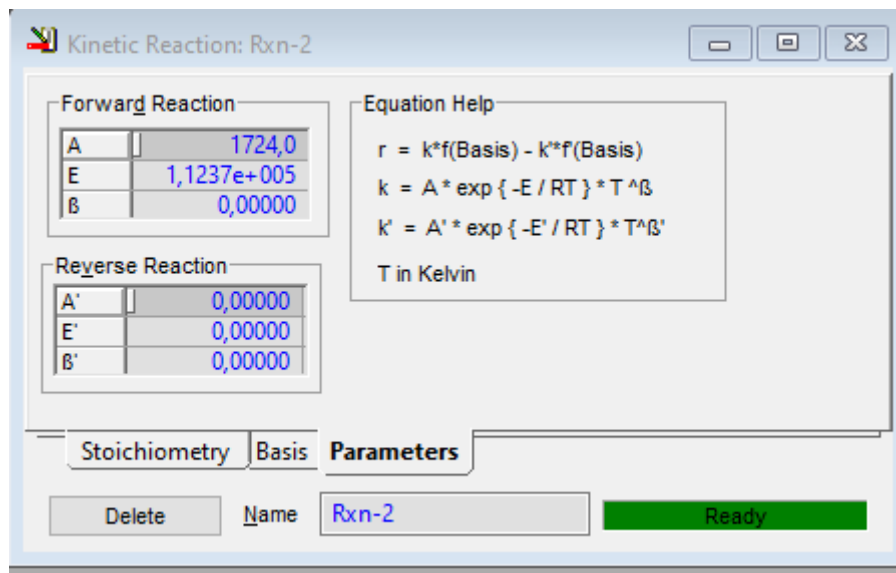


Figura 3.15: Cinética da reação de hidrodealquilação do etilbenzeno

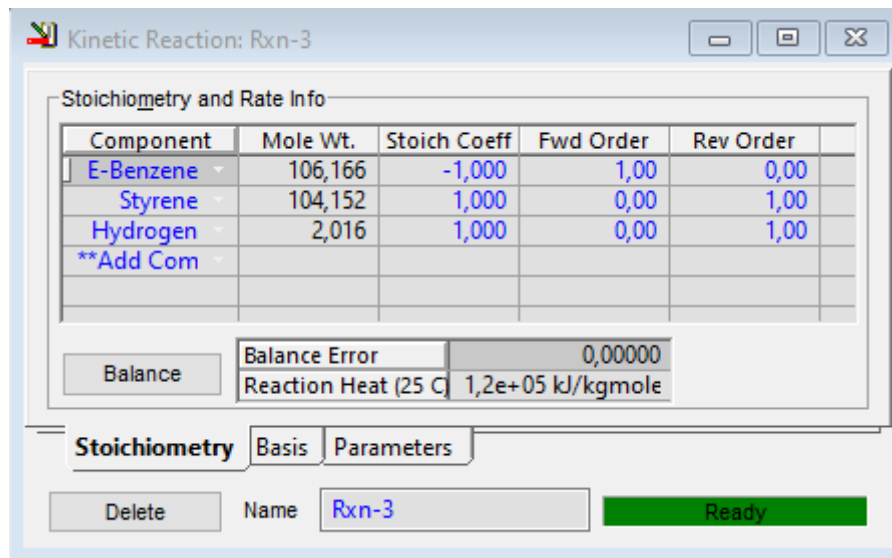


Figura 3.16: Estequiometria da reação de equilíbrio, produção de estireno.

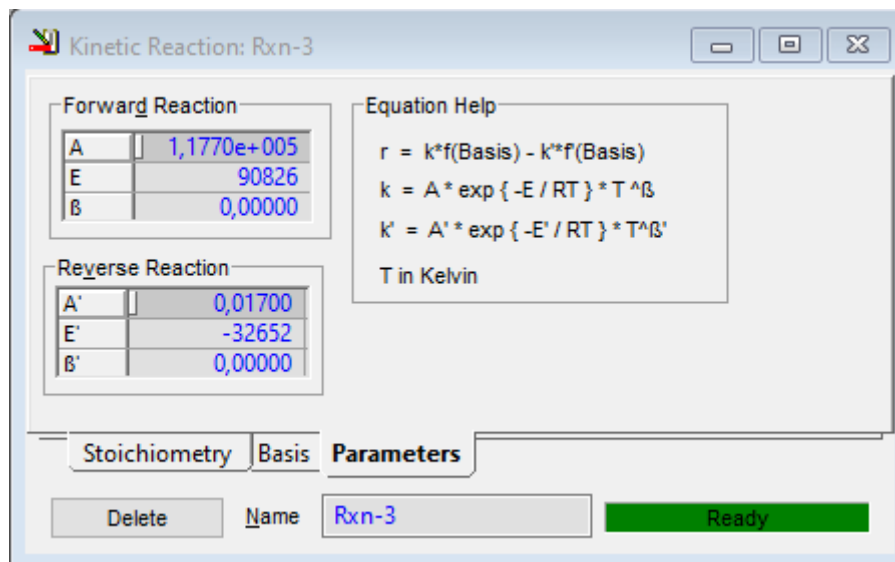


Figura 3.17: Cinética da reação de equilíbrio, produção de estireno.

O processo de produção de estireno a partir do etilbenzeno ocorre conforme a descrição a seguir: a alimentação fresca de etilbenzeno é misturada (MIX-100) a etilbenzeno recirculado, aquecido e misturado novamente à uma corrente de vapor saída da caldeira, que terá a função de fornecer energia à reação, já que a reação de formação de estireno é altamente endotérmica. A alimentação de vapor de alta pressão ao processo também tem o intuito de deslocar o equilíbrio em sentido de formação de estireno, pela diluição dos componentes. Conforme citado anteriormente, o processo envolvendo reações não desejadas que envolvem a formação de metano e tolueno e decomposição do etilbenzeno em benzeno e etileno. O efluente do primeiro reator (PFR-103) é alimentado à mais dois reatores PFR (PFR-104 e PFR-105), com aquecimento intermediário das correntes de saída, produzindo vapor de

alta pressão. O efluente do último reator (corrente 10) passa por uma série de trocadores de calor (E-403, E-404, E-405) onde ocorre a produção de vapores de baixa pressão por meio do resfriamento da corrente de saída do último reator. Essa corrente alimenta então um vaso separador trifásico, onde há a separação em três efluentes: corrente líquida 15, onde há basicamente água, corrente 23 contendo basicamente hidrogênio e água. A última corrente 16 é encaminhada à primeira torre de destilação, com intuito de se retirar tolueno e benzeno na corrente de topo, e etilbenzeno e estireno como produtos de fundo. Na simulação feita, observou-se um significativo arraste do etilbenzeno também como produto de topo. A corrente de fundo 17 foi então alimentada à segunda coluna de destilação, onde etilbenzeno foi retirado como produto de topo e recirculado ao processo, e o estireno foi obtido como produto de fundo (corrente 21-2) com pureza de 99,99%. O diagrama de processos da simulação finalizada é visualizado abaixo:

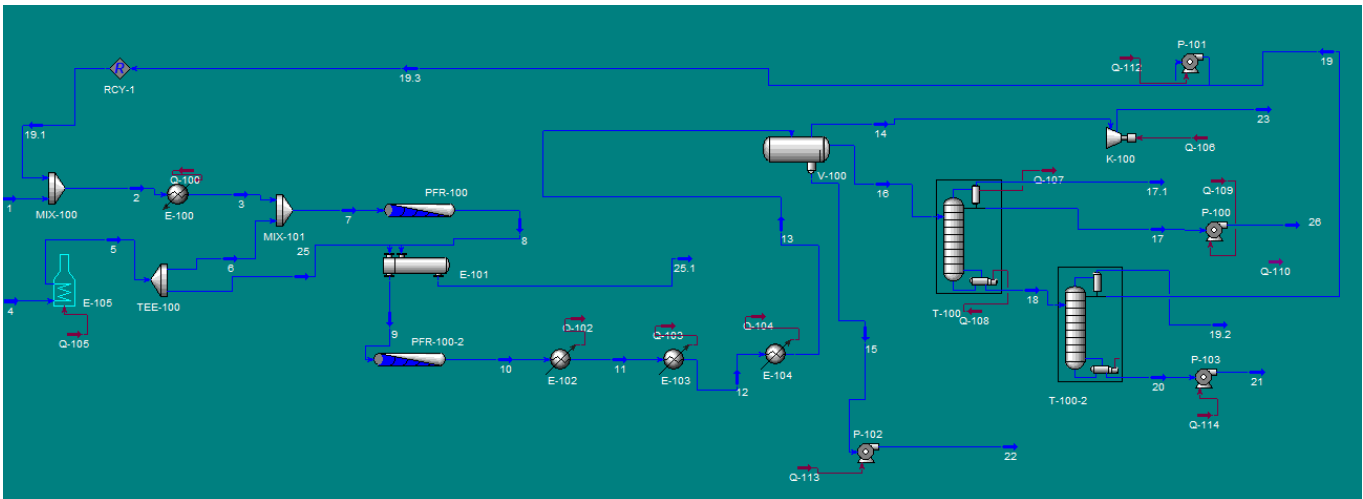


Figura 3.18: Fluxograma de processos obtido por meio da simulação pelo UniSim Design

As correntes retiradas de Turton que serviram como base para conclusão da simulação podem ser visualizadas a seguir:

Stream Number	1	2	3	4	5
Temperature (°C)	136.0	116.0	240.0	253.7	800.0
Pressure (kPa)	200.0	190.0	170.0	4237.0	4202.0
Vapor mole fraction	0.00	0.00	1.00	1.00	1.00
Total flow (kg/h)	13,052.2	23,965.1	23,965.1	72,353.7	72,353.7
Total flow (kmol/h)	123.42	226.21	226.21	4016.30	4016.30
Component Flowrates (kmol/h)					
Water	0.00	0.00	0.00	4016.30	4016.30
Ethylbenzene	121.00	223.73	223.73	0.00	0.00
Styrene	0.00	0.06	0.06	0.00	0.00
Hydrogen	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Benzene	1.21	1.21	1.21	0.00	0.00
Toluene	1.21	1.21	1.21	0.00	0.00
Ethylene	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Methane	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Stream Number	6	7	8	9	10
Temperature (°C)	722.0	566.6	504.3	550.0	530.1
Pressure (kPa)	170.0	160.0	150.0	135.0	125.0
Vapor mole fraction	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
Total flow (kg/h)	54,045.0	78,010.2	78,010.2	78,010.2	78,010.2
Total flow (kmol/h)	3000.00	3226.21	3317.28	3317.28	3346.41
Component Flowrates (kmol/h)					
Water	3000.00	3000.00	3000.00	3000.00	3000.00
Ethylbenzene	0.00	223.73	132.35	132.35	102.88
Styrene	0.00	0.06	91.06	91.06	120.09
Hydrogen	0.00	0.00	90.69	90.69	119.38
Benzene	0.00	1.21	1.28	1.28	1.37
Toluene	0.00	1.21	1.52	1.52	1.86
Ethylene	0.00	0.00	0.07	0.07	0.16
Methane	0.00	0.00	0.31	0.31	0.65

Stream Number	11	12	13	14	15
Temperature (°C)	267.0	180.0	65.0	65.0	65.0
Pressure (kPa)	110.0	95.0	80.0	65.0	65.0
Vapor mole fraction	1.00	1.00	0.15	1.00	0.00
Total flow (kg/h)	78,010.2	78,010.2	78,010.2	255.6	54,045.0
Total flow (kmol/h)	3346.41	3346.41	3346.41	120.20	3000.00
Component Flowrates (kmol/h)					
Water	3000.00	3000.00	3000.00	0.00	3000.00
Ethylbenzene	102.88	102.88	102.88	0.00	0.00
Styrene	120.09	120.09	120.09	0.00	0.00
Hydrogen	119.38	119.38	119.38	119.38	0.00
Benzene	1.37	1.37	1.37	0.00	0.00
Toluene	1.86	1.86	1.86	0.00	0.00
Ethylene	0.16	0.16	0.16	0.16	0.00
Methane	0.65	0.65	0.65	0.65	0.00
Stream Number	16	17	18	19	20
Temperature (°C)	65.0	69.9	125.0	90.8	123.7
Pressure (kPa)	65.0	45.0	65.0	25.0	55.0
Vapor mole fraction	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Total flow (kg/h)	23,709.6	289.5	23,420.0	10,912.9	12,507.1
Total flow (kmol/h)	226.21	3.34	222.88	102.79	120.08
Component Flowrates (kmol/h)					
Water	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Ethylbenzene	102.88	0.10	102.78	102.73	0.05
Styrene	120.09	0.00	120.09	0.06	120.03
Hydrogen	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Benzene	1.37	1.37	0.00	0.00	0.00
Toluene	1.86	1.86	0.00	0.00	0.00
Ethylene	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Methane	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Component Flowrates (kmol/h)					
Water	0.00	3000.00	0.00	0.00	1016.30
Ethylbenzene	0.05	0.00	0.00	102.73	0.00
Styrene	120.03	0.00	0.00	0.06	0.00
Hydrogen	0.00	0.00	119.38	0.00	0.00
Benzene	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Toluene	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Ethylene	0.00	0.00	0.16	0.00	0.00
Methane	0.00	0.00	0.65	0.00	0.00

Stream Number	26
Temperature (°C)	70.0
Pressure (kPa)	200.00
Vapor mole fraction	0.00
Total flow (kg/h)	289.5
Total flow (kmol/h)	3.34
Component Flowrates (kmol/h)	
Water	0.00
Ethylbenzene	0.10
Styrene	0.00
Hydrogen	0.00
Benzene	1.37
Toluene	1.86
Ethylene	0.00
Methane	0.00

Figura 3.19: Sumário de correntes do fluxograma de produção do estireno (Turton, et. tal 2018).

De modo semelhante, o sumário de correntes da simulação construída também foi extraído e está disposto abaixo:

Material Streams											
		1	19.3	19.1	3	7	8	9	10	11	12
Vapour Fraction		0,0000	0,0000	0,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
Temperature	C	136,0	91,36	91,36	240,0	587,3	518,3	550,0	535,3	267,0	180,0
Pressure	kPa	200,0	165,0	165,0	170,0	170,0	150,0	135,0	115,0	110,0	95,00
Molar Flow	kgmole/h	123,4	60,90	61,02	184,4	3184	3280	3280	3300	3300	3300
Mass Flow	kg/h	1,305e+004	6465	6479	1,953e+004	7,358e+004	7,358e+004	7,358e+004	7,358e+004	7,358e+004	7,358e+004
Liquid Volume Flow	m3/h	15,00	7,431	7,446	22,45	76,60	78,65	78,65	79,09	79,09	79,09
Heat Flow	kJ/h	1,335e+006	1,452e+004	1,455e+004	1,230e+007	-6,355e+008	-6,355e+008	-6,301e+008	-6,300e+008	-6,730e+008	-6,856e+008
		13	4	5	25	6	14	16	15	23	17
Vapour Fraction		0,0372	0,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	0,0000	0,0000	1,0000	0,0000
Temperature	C	25,00	253,7	722,0	722,0	722,0	722,0	25,00	25,00	129,0	102,0
Pressure	kPa	80,00	4237	170,0	170,0	170,0	60,00	80,00	80,00	140,0	60,00
Molar Flow	kgmole/h	3300	4016	4016	1016	3000	122,6	182,9	2995	122,6	2,857
Mass Flow	kg/h	7,358e+004	7,235e+004	7,235e+004	1,831e+004	5,405e+004	498,0	1,912e+004	5,395e+004	498,0	288,8
Liquid Volume Flow	m3/h	79,09	72,60	72,60	18,35	54,15	3,634	21,39	54,06	3,634	0,3316
Heat Flow	kJ/h	-8,452e+008	-1,074e+009	-8,673e+008	-2,195e+008	-6,478e+008	-1,048e+006	1,122e+007	-8,554e+008	-6,589e+005	3,393e+004
		18	17.1	26	19.2	19	20	2	22	21	25.1
Vapour Fraction		0,0000	1,0000	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000
Temperature	C	123,4	102,0	102,1	91,30	91,30	124,0	121,6	25,01	124,0	590,9
Pressure	kPa	60,00	60,00	200,0	25,00	25,00	55,00	165,0	215,0	200,0	170,0
Molar Flow	kgmole/h	177,0	3,000	2,857	1,000	60,90	115,1	184,4	2995	115,1	1016
Mass Flow	kg/h	1,856e+004	275,6	288,8	106,2	6465	1,199e+004	1,953e+004	5,395e+004	1,199e+004	1,831e+004
Liquid Volume Flow	m3/h	20,74	0,3162	0,3316	0,1220	7,431	13,19	22,45	54,06	13,19	18,35
Heat Flow	kJ/h	1,458e+007	1,588e+005	3,400e+004	3,920e+004	1,302e+004	1,415e+007	1,350e+006	-8,553e+008	1,415e+007	-2,249e+008

Figura 3.20: Sumário de correntes da produção de estireno obtido no UniSim Design.

3.4 PLANTAS INTEGRADAS

Por fim, após a conclusão em separado de cada uma das unidades de produção de etilbenzeno e estireno, foi criado um terceiro ambiente computacional e cada uma das plantas de produção foram inseridas nesse local. Estas foram conectadas por meio da corrente 19.11, inserida como alimentação de etilbenzeno para a produção de estireno, em substituição à corrente 1 da simulação inicialmente configurada. O diagrama finalizado pode ser visualizado abaixo:

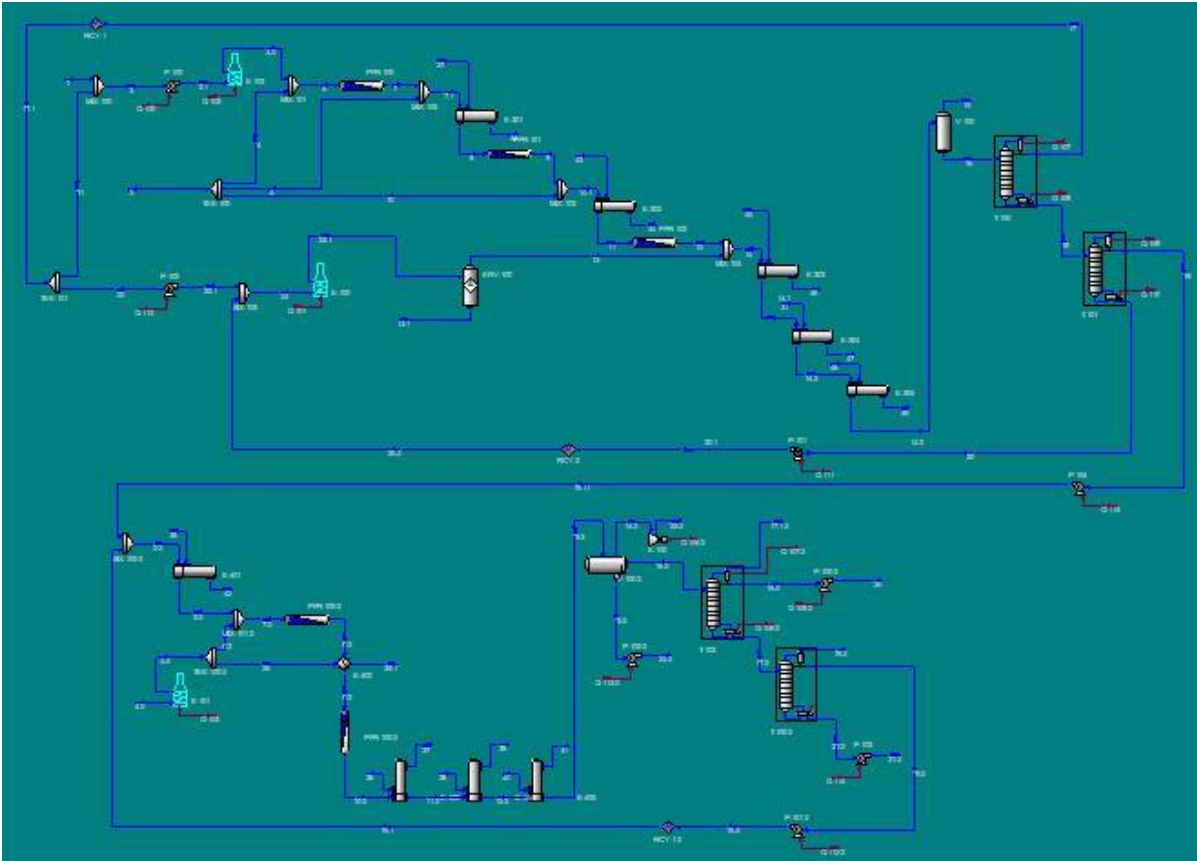


Figura 3.21: Fluxograma das plantas de produção de etilbenzeno e estireno unificadas

A lista de componentes gerais pode ser visualizada a seguir:

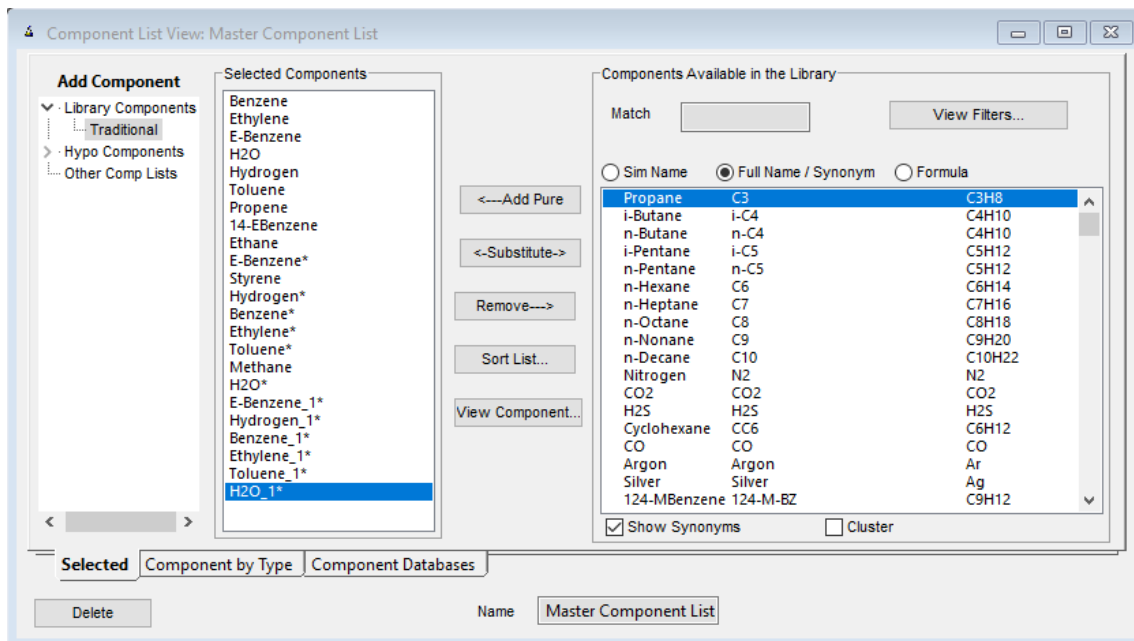


Figura 3.22: Lista geral de componentes da simulação unificada

Para os balanços de consumo de utilidades (vapores de baixa, média e alta pressão), foi utilizado o modelo termodinâmico ASME Steam, que fornece resultados precisos envolvendo cálculos de troca térmica de vapores em trocadores de calor. A escolha do referido modelo termodinâmico no ambiente computacional pode ser visualizada abaixo:

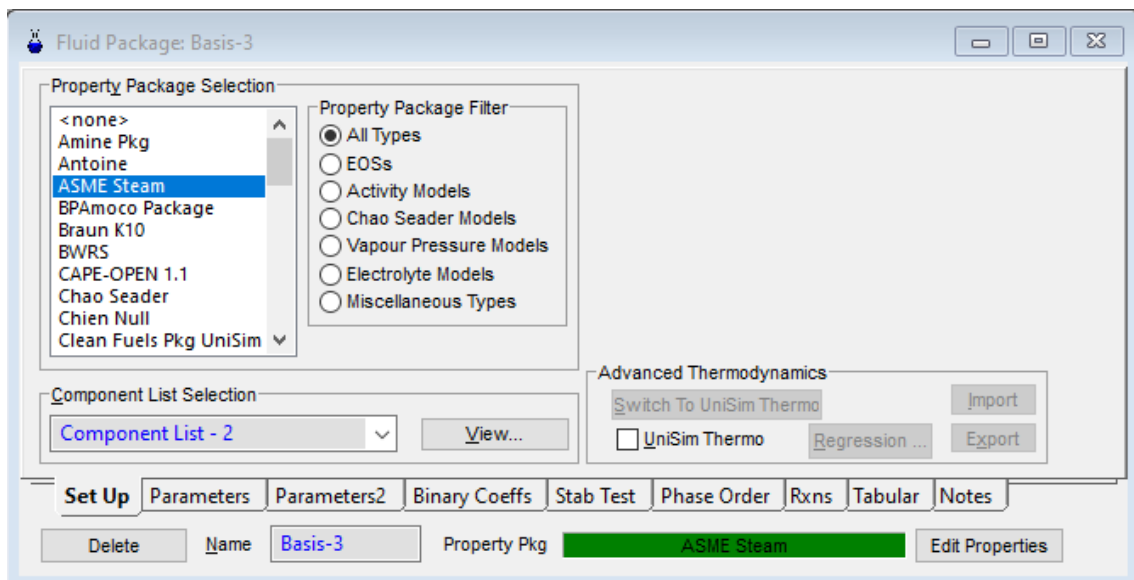


Figura 3.23: Pacote termodinâmico associados aos vapores e água de resfriamento

Para os componentes envolvidos no sistema reacional das produções de etilbenzeno e estireno, foi selecionado o modelo termodinâmico Peng-Robinson Stryjek Vera (PRSV) nas duas simulações

inicialmente construídas, que trouxe resultados satisfatórios. Tal seleção também pode ser visualizada a seguir:

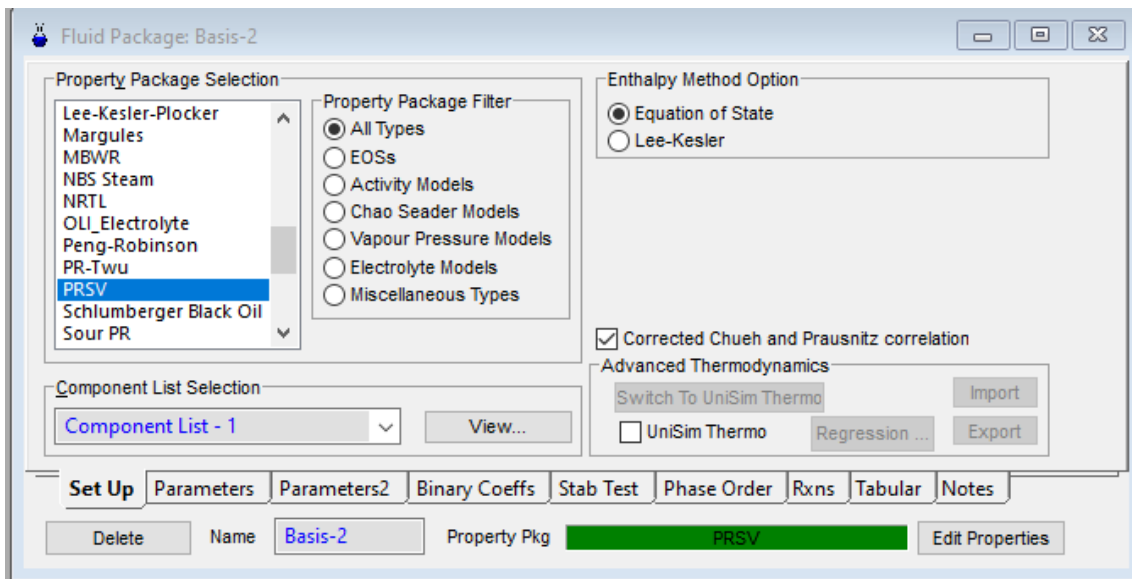


Figura 3.24: Pacote termodinâmico associado às correntes de processo

Após a união das duas unidades pela corrente 19.1, o simulador apresentou um erro de balanço, já que a produção de etilbenzeno, inicialmente, não era capaz de suprir a necessidade de reagentes para a corrente de estireno que foi estipulada. Desse modo, as alimentações de etileno e benzeno foram ajustadas para uma maior produção de etilbenzeno e, por consequência, uma maior vazão molar de estireno, permitindo a conclusão do balanço. As vazões de alimentação de benzeno foram de 142,29 kgmol/h e de etileno 134,85 kgmol/h, capazes de produzir uma corrente final de 130,89 kgmol/h, com etilbenzeno com 98,44% de pureza. Essa alimentação de etilbenzeno, por sua vez, gerou 113,78 kgmol/h de estireno, com 98,8% de pureza. Nas duas unidades de produção inicialmente configuradas, não foram inseridos trocadores de calor, apenas heaters e coolers. No UniSim Design, estes são equipamentos importantes para balanço de energia, já que informam valores de transferência de calor que devem ser adicionadas às correntes para que sua temperatura seja aumentada ou resfriada à um valor desejado. Como um dos principais intuítos deste trabalho é investigar a vantagem de se integrar as duas plantas visando o cálculo de economia de utilidades, os heaters e coolers foram substituídos por trocadores de calor efetivamente, configurando-se correntes de água ou vapor que alimentam os trocadores conforme informados nos fluxogramas retirados de Turton, e deixando o simulador fazer o cálculo de suas condições na entrada e saída, bem como a vazão molar requerida para se alcançar as temperaturas desejadas. Tabelas com os principais parâmetros dos trocadores de calor, bem como equipamentos de suma importância para o processo e uma breve introdução destes, estão dispostos a seguir:

Os trocadores de calor tubo e casco são amplamente utilizados na indústria química e de processos, devido às suas vantagens em relação a outros tipos de trocadores de calor. Os trocadores de calor do tipo tubo e casco podem operar com altas pressões e temperaturas, o que os torna ideais para aplicações em processos químicos e industriais. Além disso, eles são mais eficientes que os trocadores de calor de placa e outros tipos de trocadores de calor, pois podem trocar mais calor com o mesmo volume de fluido. Outra vantagem destes equipamentos é a sua construção robusta, que os torna mais resistentes a danos e corrosão. Eles também são mais fáceis de manter e limpar, o que os torna ideais para aplicações em que a qualidade do produto final é essencial.

	Trocadores de Calor		
	Variação de Temperatura no Tubo (°C)	Variação de Temperatura no Casco (°C)	Calor trocado (Kj/h)
E-301	-37,99	138,1	2,041*e+006
E-302	-26,07	138,1	1,56*e+006
E-303	-223,3	253,2	1,801*e+006
E-304	-110,00	43,67	5,743*e+006
E-305	-90,00	10,00	1,675*e+006
E-401	115,10	-	1,101*e+007
E-402	39,27	-157,60	6,716*e+006
E-403	-265,50	138,10	4,271*e+007
E-404	-80,00	43,67	1,570*e+008
E-405	-145,00	10,00	1,57*e+008

Tabela 3.1: Lista de trocadores de calor e parâmetros

As colunas de destilação de pratos são equipamentos fundamentais para a indústria química, sendo utilizadas para separar misturas com base na diferença de volatilidade dos seus componentes. O funcionamento da coluna de destilação de pratos é baseado em um processo físico-químico conhecido como destilação. A destilação é um processo de separação de misturas que utiliza a diferença de volatilidade dos seus componentes (volatilidade é a tendência de um líquido se transformar em vapor). A coluna de destilação de pratos é composta por uma série de pratos com função de promover o contato entre o líquido descendente e o vapor ascendente, até que o equilíbrio seja estabelecido. Dispostos verticalmente, cada prato contendo orifícios no centro que permitem a passagem do vapor. Os componentes mais voláteis são vaporizados com mais facilidade e, conseqüentemente, são separados com maior eficiência. Já os componentes menos voláteis ficam retidos nos pratos e são conduzidos de volta para a coluna, onde são vaporizados novamente. A coluna de destilação de pratos é um equipamento muito eficiente e versátil, que pode ser usado para separar diversos tipos de misturas e amplamente utilizada na indústria química, petroquímica e farmacêutica. As colunas necessárias para o funcionamento da simulação apresentada estão evidenciadas a seguir:

Colunas de Destilação

	Tipo	Número de Pratos	Alimentação (prato)	Diâmetro (m)
T-100	Condensador Total	45	19	1,7
T-101	Condensador Total	76	38	1,5
T-102	Condensador Parcial	61	30	3,0
T-103	Condensador Parcial	158	79	6,9

Tabela 3.2: Lista de colunas de destilação e parâmetros

Para a correta configuração das colunas de destilação no UniSim Design, é necessário a configuração de parâmetros chamados de specs, que nada mais são do que especificações, como por exemplo vazão molar de produto de topo ou produto de fundo, composição de correntes e etc., que caso especificados corretamente juntamente com o design da coluna de destilação, irão nortear o cálculo termodinâmico para que o equilíbrio especificado seja alcançado. Os specs utilizados nas colunas de destilação estão especificados abaixo:

- T-100: fração molar de 0,95 de benzeno no condensador e fração molar de 0,93 de etilbenzeno no refeedor.
- T-101: fração molar de 0,999 de etilbenzeno como produto de fundo e fração molar de 0,01 de dietilbenzeno como produto de topo.
- T-102: razão de refluxo de 40, vazão molar de 4kgmol/h de destilado retirado como produto de topo e etilbenzeno com fração molar de 0,4 retirado como produto de fundo;
- T-103: estireno com fração molar de 0,988 no refeedor e estireno com fração molar de 0,001 no condensador, visando maximizar sua pureza como produto final.

Tais especificações permitiram que as colunas de destilação apresentassem bons resultados de pureza de produtos e vazões molares satisfatórias.

O reator PFR é um tipo de reator em que a reação química ocorre em uma longa coluna vertical, permitindo um controle mais preciso da taxa de reação. Esses reatores são ideais para a produção de produtos químicos purificados, pois o controle da taxa de reação permite um melhor controle da qualidade do produto. Os reatores PFR também são mais eficientes em termos de energia, pois o calor gerado pela reação química é dissipado mais rapidamente ao longo da coluna. Isso permite que o reator funcione em um intervalo de temperatura mais estreito, o que significa que menos energia é necessária para manter o reator em funcionamento. Outro tipo de reator, o reator CSTR, é menos eficiente em termos de energia e menos preciso na produção de produtos químicos purificados. No entanto, os reatores CSTR são mais simples de se construir e podem ser usados para a produção de produtos químicos em massa. A relação de reatores PFR utilizados, bem como seus parâmetros estão dispostos abaixo:

Reatores PFR					
	Comprimento (m)	Diâmetro (m)	Volume Total (m ³)	Fração de Vazios	Queda de Pressão (Kpa)
PFR-100	11,00	1,72	25,56	-	0,00
PFR-101	12,00	1,85	32,26	-	20,00
PFR-102	12,00	1,97	36,577	-	20,00
PFR-103	9,26	1,854	25,00	0,4	20,00
PFR-104	9,26	1,854	25,00	0,43	20,00

Tabela 3.3: Lista de reatores PFR e parâmetros

A relação de bombas, utilizadas para deslocamento dos fluídos com incremento de pressão, também está relacionada a seguir:

Bombas			
	Varição de Pressão (Kpa)	Varição de Temperatura (°C)	Trabalho (Kj/h)
P-100	1890	0,9194	6,351+e+004
P-101	1890	1,04	1,072*e+004
P-102	1890	0,9518	1,329+e+004
P-103	90	0	2189
P-104	140	0	94,69
P-105	140	0	1441
P-106	145	0,07	2873
P-107	135	0	9685

Tabela 3.4: Lista de bombas utilizadas e parâmetros de processo

4. RESULTADOS COMPUTACIONAIS

O término da simulação computacional das plantas integradas de etilbenzeno e estireno permitiu calcular com precisão, vazões molares e composições das correntes de reagentes e produtos desejadas, bem como o consumo de utilidades.

4.1 PRINCIPAIS CORRENTES DO PROCESSO E PRODUÇÃO OBTIDA

Abaixo, estão relacionadas as principais correntes do processo, bem como suas vazões molares estimadas por meio do ambiente de simulação criado e configurado no UniSim Design.

Name	1	19	17.1	19.1	19-2	20-2	2-2	22-2	21-2	19.11	15	20.1	23-2
Vapour Fraction	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000	0,0000	1,0000
Temperature [C]	25,00	138,9	51,75	91,36	91,30	124,2	124,7	34,35	124,3	138,9	80,00	188,3	187,6
Pressure [kPa]	110,0	110,0	110,0	165,0	25,00	55,00	165,0	195,0	200,0	200,0	110,0	2000	140,0
Molar Flow [kgmole/h]	145,0	130,0	186,6	58,45	58,43	115,2	188,4	2988	115,2	130,0	28,70	22,65	131,9
Mass Flow [kg/h]	1,136e+004	1,382e+004	1,465e+004	6205	6203	1,203e+004	2,002e+004	5,382e+004	1,203e+004	1,382e+004	1708	3041	855,1
Liquid Volume Flow [m3/h]	12,89	15,88	16,73	7,132	7,130	13,25	23,01	53,93	13,25	15,88	2,543	3,516	4,015
Heat Flow [kJ/h]	7,071e+006	1,363e+006	9,191e+006	1,394e+004	1,249e+004	1,393e+007	1,380e+006	-8,512e+008	1,393e+007	1,366e+006	5,262e+005	-6,508e+005	-1,886e+006
Name	50	26	** New **										
Vapour Fraction	1,0000	0,0000											
Temperature [C]	115,1	115,2											
Pressure [kPa]	60,00	200,0											
Molar Flow [kgmole/h]	7,109	4,001											
Mass Flow [kg/h]	727,9	422,6											
Liquid Volume Flow [m3/h]	0,8362	0,4857											
Heat Flow [kJ/h]	3,030e+005	2,597e+004											

Figura 4.1: Principais correntes do processo, condições e vazões molares.

Name	1	17.1	20.1	19	15	19.1	23-2	50	26	21-2	19-2
Comp Mole Frac (Benzene)	0,981308	0,950001	0,000000	0,005522	0,486069	0,000000	0,001127	0,078242	0,018152	0,000000	0,000000
Comp Mole Frac (Ethylene)	0,000000	0,000010	0,000000	0,000000	0,000593	0,000000	0,000448	0,000092	0,000000	0,000000	0,000000
Comp Mole Frac (E-Benzene)	0,000000	0,036116	0,000100	0,984478	0,062457	0,999900	0,012888	0,903067	0,980569	0,000750	0,999900
Comp Mole Frac (H2O)	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,092474	0,014472	0,000049	0,000000	0,000000
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,877844	0,002695	0,000001	0,000000	0,000000
Comp Mole Frac (Toluene)	0,018692	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000004	0,000885	0,000466	0,000000	0,000000
Comp Mole Frac (Propene)	0,000000	0,005716	0,000000	0,000000	0,094695	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Comp Mole Frac (14-E-Benzene)	0,000000	0,000000	0,999900	0,010000	0,002200	0,000000	0,000031	0,000000	0,000000	0,011251	0,000000
Comp Mole Frac (Ethane)	0,000000	0,008157	0,000000	0,000000	0,353986	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Comp Mole Frac (E-Benzene*)	***	***	***	***	***	***	***	***	***	***	***
Comp Mole Frac (Styrene)	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000100	0,015117	0,000543	0,000763	0,987999	0,000100

Figura 4.2: Composições das principais correntes do processo

Assim, a partir da análise da simulação e das vazões molares e composições das correntes apresentadas, é possível concluir que a alimentação da corrente 1, com vazão molar de 145 kgmol/h e composta por 98,13% em fração molar de benzeno (reagente para a produção de etilbenzeno) e juntamente com a corrente 2 (vazão molar de 145 kgmol/h e composta de 93% em fração molar de etileno) após serem processada por toda a unidade, foi capaz de gerar a corrente 19, com fluxo molar de 130 kgmol/h, e composta por cerca de 98,45% de etilbenzeno puro. A unidade de produção de etilbenzeno também gerou duas correntes de reciclo. A primeira delas (17.1) é composta de uma vazão molar de 186,6 kgmol/h e composta por 95% de concentração molar de benzeno, sendo realimentado ao processo. A segunda corrente recirculada é a corrente 20.2, com vazão molar de

22,82 kgmol/h e composta basicamente por dietilbenzeno, que será reprocessado em um reator de equilíbrio (ERV-100). O etilbenzeno produzido (representado na simulação pela corrente 19) será bombeado (corrente 19.1) e servirá como alimentação para a unidade de produção de estireno. Novamente observando o sumário de correntes, observa-se que a alimentação de etilbenzeno foi capaz de gerar a corrente de saída 21-2, com vazão molar de 115,2 kgmol/h e composta por 98,88% de estireno, o produto final desejado. A unidade de produção de estireno também gerou uma corrente de reciclo (19.1), com vazão molar de 58,45 kgmol/h e composta basicamente de etilbenzeno puro, que será reprocessado.

4.2 ANÁLISE DE SUPERÁVITS E DÉFICITS DE UTILIDADES

Gastos com utilidades como água de resfriamento e vapores de baixa, média e alta pressão podem compor significativos gastos operacionais, impactando no custo final do produto desejado. Por tanto, identificar superávits e déficits destes é fundamental, ajudando na otimização do processo e redução de seu custo operacional. Esse trabalho objetiva avaliar a economia dessas utilidades, em especial vapores de alta e baixa pressão, para comprovar a vantagem em se integrar as duas plantas. A seguir, temos a classificação de cada uma das utilidades com base em sua pressão e temperatura:

- Vapor de Baixa Pressão: 600KPa (5barg); 160°C
- Vapor de Média Pressão: 1100KPa (10barg); 184°C
- Vapor de Alta Pressão: 4200Kpa (41barg); 254°C
- Boiling Feed Water (BFW): 170KPa; 115,2°C
- Água de Resfriamento: 30°C, com variação de temperatura de 10°C na saída.

Conforme citado anteriormente, ao unir as duas unidades de produção, os coolers e heaters foram substituídos por trocadores de calor do tipo tubo e casco, para permitir a análise de geração e consumo de vapores e água. Como as temperaturas das correntes de entrada e saída eram conhecidas, bem como as condições de pressão dos vapores ou água na entrada e saída dos trocadores de calor, foi possível calcular a vazão de utilidades necessária para aquecimento ou resfriamento das correntes, bem como a temperatura de bolha dos vapores de alta e baixa pressão.

Nas tabelas abaixo, observa-se a classificação das correntes de utilidades de cada uma das plantas, bem como seu consumo e geração de utilidades, que irão nortear a análise da economia de vapor de alta pressão.

Planta de Produção de Etilbenzeno		
Corrente	Classificação	Vazão molar (Kgmol/h)
27	BFW	48,93
34	Vapor de Alta Pressão	48,93
43	BFW	37,38
44	Vapor de Alta Pressão	37,38
45	BFW	447,77
46	Vapor de Alta Pressão	447,77
31	BFW	138,1
47	Vapor de Baixa Pressão	138,1
48	Água de Resfriamento	23220
49	Água aquecida	23220

Tabela 4.1: Correntes de utilidades na planta de produção de etilbenzeno

Geração de Utilidades		
Vapor de Alta Pressão (Kgmol/h)	Vapor de Baixa Pressão (Kgmol/h)	Água Aquecida (Kgmol/h)
1019,23	138,1	23220

Tabela 4.2: Geração de utilidades na planta de produção de etilbenzeno

Consumo de Utilidades	
BFW (Kgmol/h)	Água de Resfriamento (Kgmol/h)
1206,26	23220

Tabela 4.3: Consumo de utilidades na planta de produção de etilbenzeno

Planta de Produção de Estireno		
Corrente	Classificação	Vazão Molar (Kgmol/h)
4-2	Vapor de Alta Pressão	4016
36	BFW	1023
37	Vapor de Alta Pressão	1023
38	BFW	309,4
39	Vapor de Baixa Pressão	309,4
40	Água de Resfriamento	208500
41	Água Aquecida	208500

Tabela 4.4: Correntes de utilidades na planta de produção de estireno.

Geração de Utilidades		
Vapor de Alta Pressão (Kgmol/h)	Vapor de Baixa Pressão (Kgmol/h)	Água Aquecida (Kgmol/h)
1023	309,4	208500

Tabela 4.5: Geração de utilidades na planta de produção de estireno.

Consumo de Utilidades		
Vapor de Alta Pressão (Kgmol/h)	Água de Resfriamento (Kgmol/h)	BFW (Kgmol/h)
-4016	-208500	-1332,4

Tabela 4.6: Consumo de utilidades na planta de produção de estireno.

As tabelas acima representam o consumo e geração de utilidades nas correntes de processo. Outro dado importante a ser considerado na necessidade de utilidades da planta, é o consumo de vapores de

alta e baixa pressão, bem como água de resfriamento, nos refeedores e colunas de destilação da simulação. O UniSim Design não faz o cálculo direto desses consumos no ambiente das torres. No entanto, o fluxo de calor necessário ao funcionamento do equipamento é informado após a correta configuração desta. Por meio dos fluxogramas de processo do Turton, é possível saber quais destes equipamentos consomem vapor de baixa ou alta pressão, bem como água de resfriamento. Assumindo que à saída dos refeedores temos água saturada na pressão de alimentação (ou seja, desprezando queda de pressão nos equipamentos), que águas de resfriamento terão uma variação de temperatura de 10°C e configurando uma corrente de energia conforme a calculada pela torre, essa vazão pode ser calculada por meio da adição de coolers e heaters, que foram inseridos na mesma simulação, mas não integrados à unidade de produção.

Os equipamentos configurados para o cálculo das referidas vazões e os valores obtidos são visualizados na imagem e tabelas abaixo:

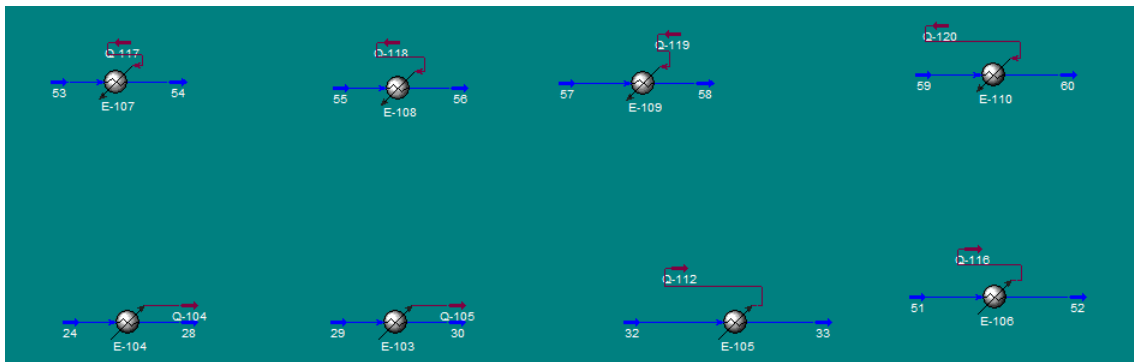


Figura 4.3: Equipamentos utilizados para cálculo de utilidades nos condensadores e refeedores das colunas de destilação.

Consumo de utilidades nas torres de destilação - Etilbenzeno		
Corrente	Classificação	Vazão Molar (Kgmol/h)
T-100 Refervedor	Vapor de Baixa Pressão	262,6
T-100 Condensador	Água de Resfriamento	11760
T-101 Refervedor	Vapor de Alta Pressão	215,3
T-101 Condensador	Água de Resfriamento	9106

Tabela 4.7: Consumo de utilidades nas colunas de destilação (unidade de produção de etilbenzeno).

Consumo de Utilidades nas Torres de Destilação - Estireno		
Corrente	Classificação	Vazão Molar (kgmol/h)
T-102 Refervedor	Vapor de Baixa Pressão	623,4
T-102 Condensador	Água de Resfriamento	23290
T-103 Refervedor	Vapor de Baixa Pressão	536,7
T-104 Condensador	Água de Resfriamento	33140

Tabela 4.8: Consumo de utilidades nas colunas de destilação (produção de estireno).

Após apresentar a necessidade de todas as utilidades na unidade de produção de etilbenzeno e estireno, incluindo correntes de processo e colunas de destilação, o foco será em vapores de alta e baixa pressão pois a planta apresenta simultaneamente consumo e geração destes. O consumo, geração e consumo líquido (consumo total descontado da geração da utilidade) de todo o processo está apresentado abaixo:

	Consumo Total (Kgmol/h)	Geração (Kgmol/h)	Consumo Líquido (Kgmol/h)	Economia
Vapor de Alta Pressão	4231,3	2042,23	2189,07	48%
Vapor de Baixa Pressão	1422,7	447,5	975,2	31%

Tabela 4.9: Consumo líquido e economia de utilidades nas plantas integradas.

5. CONCLUSÃO

Este trabalho teve como objetivo a análise dos consumos e gerações de utilidades (em especial vapores de baixa e alta pressão) de uma unidade de produção de estireno, a partir da fabricação de etilbenzeno, identificando déficits e superávits no processo. Com base no estudo dos fluxogramas das unidades, criação e configuração de um ambiente de simulação, incluindo reações, pacotes termodinâmicos, correntes de processos e equipamentos, os dados finais da simulação foram obtidos. Assim, por meio dessas informações, foi possível observar que, integrando-se as duas unidades (produção de etilbenzeno e estireno), é alcançada uma economia de 48,26% de vapores de alta pressão e 31,45% em vapores de baixa pressão, indicando um ganho operacional que se reverte em redução de custos no processo final. O resultado obtido corrobora a informação de que a grande maioria das unidades de produção de etilbenzeno trabalham em conjunto à de estireno, visando justamente a economia das referidas utilidades.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BURDICK, Donald L. e LEFFLER, William L. Petrochemicals in nontechnical language, p. 106-117, 2010.

FICHA DE INFORMAÇÃO DE PRODUTO QUÍMICO, sistemasinter.cetesb.sp.gov.br/, 2022. Disponível em:
https://sistemasinter.cetesb.sp.gov.br/produtos/ficha_completa1.asp?consulta=estireno. Acesso em: 01/08/2022.

FICHA DE INFORMAÇÃO DE PRODUTO QUÍMICO, sistemasinter.cetesb.sp.gov.br/, 2022. Disponível em:
https://sistemasinter.cetesb.sp.gov.br/produtos/ficha_completa1.asp?consulta=etilbenzeno. Acesso em: 01/08/2022.

HONEYWELL. UniSim[®] Design Suite, 2020. Página Inicial. Disponível em:
<https://www.honeywellprocess.com/en-US/online_campaigns/unisim-design/Pages/index.html>. Acesso em: 03 de agosto de 2022.

TURTON, Richard et al. **Analysis, synthesis and design of chemical processes**. Pearson Education, 2018.