



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

Aldimiro Paixão Domingos

PRODUÇÃO DE UREIA: AVALIAÇÃO TÉCNICA E ECONÔMICA

Uberlândia-MG

2018

Aldimiro Paixão Domingos

PRODUÇÃO DE UREIA: AVALIAÇÃO TÉCNICA E ECONÔMICA

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Programa de Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários à convalidação da disciplina Trabalho de Conclusão de Curso do curso de Engenharia Química.

**Orientador: Prof. Dr. Humberto Molinar
Henrique**

Uberlândia - MG

2018

Aldimiro Paixão Domingos

PRODUÇÃO DE UREIA: AVALIAÇÃO TÉCNICA E ECONÔMICA

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Programa de Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários à convalidação da disciplina Trabalho de Conclusão de Curso do curso de Engenharia Química.

Uberlândia, 21 de Dezembro de 2018.

Prof. Dr. Humberto Molinar Henrique
Orientador (FEQUI/UFU)

Profª. Dra. Érika Ohta Watanabe
(FEQUI/UFU)

Profª. Dra. Fabiana R. Xavier Batista
(FEQUI/UFU)

*Ao Pai que me amou e permitiu que tudo isso fosse possível.
Ao Filho que por nós sacrificou sua vida.
O temor a Deus é o começo de seu amor, e a ele é preciso acrescentar um princípio de fé.
Aos meus tão queridos e amados pais, avós e irmãs.*

Dedico.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente gostaria de agradecer a Deus todo poderoso por ter me concedido à vida e por sempre se empenhar em cuidar da mesma ao longo de todos esses anos que venho me dedicando em busca desta conquista, que não é somente minha, mas de toda minha família.

Quero de forma mais que especial agradecer ao meu mestre, amigo e companheiro, meu pai, Paixão João da Conceição Micas que tudo fez enquanto em vida, para que o meu sonho, nosso sonho da busca por uma formação de qualidade fosse alcançado, agradecer a minha mãe dona Isabel Manuel por todo o carinho e amor incondicional, as minhas irmãs, Eufrásia, Judite, Edna e Vânia por sempre acreditarem em mim e me darem força, de forma também mais que especial quero agradecer a Juelma Bizerra por todo suporte e amor, não podendo deixar de agradecer o tio Jaime, Fiel, e minha segunda mãe, Marcelina Matemba.

Agradeço ainda todas as contribuições que me foram passadas por colegas e amigos para que eu pudesse chegar até aqui, amigos e professores do ensino médio tais como, Aldair Miguel, Laurindo Tchinhama, Heitor Ambrosio, André Oliveira, Graciano Agostinho, Arcanjo Maló, Wilson Burity, José da Silva, Elisangela Ferreira, Marta Paulo, Mateus Steitas, Mequilde Wanderley, Profa. Isabel, Prof. Lukau e Prof. Avídeo.

Quero também agradecer aos amigos do ensino superior em Angola e no Brasil, que muito me ajudaram nesta trajetória, na pessoa do Rafael Yuri, Rubstein Rafael, Erisson Paulo, Marcela Eduarda, Gabriela Amarante, Andressa Cristine, Daniel Pimenta, Nathaniel Terra, Lionel Nzagi, Menakwanzambi, Abreu Roberto, Gomes entre outros não citados aqui.

Desta forma quero finalizar meus agradecimentos, agradecendo a Universidade Federal de Uberlândia, seu corpo docente e administrativo, em especial ao secretário Neuender por sempre ser muito prestativo, ao Prof. Dr. Carlos Henrique Ataíde por seus ensinamentos e oportunidade que me deu para trabalhar consigo no programa de iniciação científica, ao Prof. Dr. Irineu Petri Jr, a Profa. Érika Watanabe, ao Prof. Rubens Gedraite, e ao meu Orientador Prof. Dr. Humberto Molinar.

Em fim quero agradecer a todos que de maneira direta ou indireta me catapultaram para que hoje todos os meus sacrifícios e sonhos, se tornassem realidade.

O verdadeiro heroísmo consiste em persistir por mais um momento quando tudo parece perdido.

Frases inteligentes!

RESUMO

A demanda por alimentos tem crescido a cada ano, devido ao grande crescimento populacional e devido a escassez de nutrientes em solos de certas regiões, a busca por soluções para estes problemas faz com que os fertilizantes sejam cada vez mais requisitados devido a sua capacidade de fornecer ao solo os nutrientes para o seu melhor desenvolvimento. Esta demanda por fertilizantes resulta na necessidade da construção de novas indústrias ou na modificação das indústrias já existentes de modo a aumentar as suas capacidades produtivas, tanto a implantação de uma nova indústria, assim como a modificação das já existentes, requerem custos elevados que são os custos de capital e de operação. Existe uma classificação das estimativas de custo de capital que permite estimar o quanto custaria investir na construção de uma fábrica nova, assim como na modificação de fábricas já em operação. Estas estimativas podem ser realizadas desde as estimativas da ordem de grandeza até as estimativas mais detalhadas, cada uma envolvendo o seu grau de precisão e esforço. No presente trabalho serão abordadas as estimativas da ordem de grandeza, assim como o estudo de estimativa, de forma a estimar na ordem de $\pm 30\%$, o custo para se investir em uma fábrica de produção de ureia, e também dizer se é economicamente viável ou não tal investimento. Neste trabalho será abordado o once-through urea process, por ser um processo menos complexo e por demandar bem menos equipamentos. As principais variáveis no processo de produção da ureia são: Temperatura, pressão e a razão molar amônia para dióxido de carbono ($NH_3:CO_2$). Para que fosse possível a simulação deste processo, usou-se o simulador CHEMCAD, este último que requereu a alimentação de dois componentes (biureto e carbamato de amônio), que foram alimentados ao simulador após suas propriedades termodinâmicas terem sido determinadas usando os métodos de contribuição de grupo de Joback e Reid e coeficientes indeterminados. Após a simulação foi possível a obtenção de 77,70% em massa de ureia no produto final, para uma conversão de 95% no equilíbrio, desta forma produzindo-se 336.715,3461 ton/ano.

Palavras-chaves: Estimativa do custo capital. Estimativa do custo operacional. Ureia, fertilizantes. Análise técnica. Análise econômica. Produção.

ABSTRACT

The demand for food has grown every year due to the great population growth and due to the scarcity of nutrients in soils of certain regions, the search for solutions to these problems makes the fertilizers more and more requested due to their capacity to supply to the soil the nutrients for its better development.

This demand for fertilizers results in the need to build new industries or to modify existing industries in order to increase their productive capacities, both the implementation of a new industry and the modification of existing ones require high costs, which are the capital and operating costs. There is a classification of capital cost estimates that allows estimating how much it would cost to invest in the construction of a new plant, as well as in the modification of factories already in operation. These estimates can be made from estimates of order of magnitude to the most detailed estimates, each involving their degree of precision and effort. In the present work will be approached the estimates of the order of magnitude, as well as the estimation study, in order to estimate in the order of $\pm 30\%$, the cost to invest in a factory of urea production, and also to say if it is economically viable or not such investment. In this work, the once-through urea process will be approached because it is a less complex process and requires less equipment. The main variables in the urea production process are: Temperature, pressure and the ammonia molar ratio for carbon dioxide ($NH_3:CO_2$). In order to simulate this process, the CHEMCAD simulator was used, which required the feeding of two components (biuret and ammonium carbamate), which were fed to the simulator after its thermodynamic properties were determined using the contribution methods of group of Joback and Reid and indeterminate coefficients. After the simulation it was possible to obtain 77.70% by mass of urea in the final product, for a conversion of 95% in equilibrium, thus producing 336,715.3461 ton / year.

Key-words: Capital cost estimation. Operational cost estimation. Urea fertilizers. Technical analysis, Economic analysis. Production.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 Ilustração do sistema radicular.....	16
Figura 2 Estatísticas da demanda mundial de fertilizantes potássicos entre 2014-2022.....	19
Figura 3 Estatísticas da demanda mundial de fertilizantes de ureia entre 2014-2022.....	19
Figura 4 Comparação do consumo mundial de fertilizantes N-P-K entre 1961-1999.....	20
Figura 5 Uréia granulada.....	22
Figura 6 Uréia perolada.....	22
Figura 10 Ilustração da melhor faixa de trabalho do método de Joback.....	28

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 Qualidade dos fertilizantes minerais frente aos orgânicos.....	15
Tabela 2 Propriedades da ureia que são de interesse para o uso de fertilizantes.....	24
Tabela 3 Propriedades físicas do biureto calculadas pelos métodos de contribuição de grupos.....	29
Tabela 4 Propriedades físicas do carbamato de amônio obtidas do chemical properties handbook.....	30
Tabela 5 Resultados da constante de equilíbrio obtidos para a reação 4 onde ocorre a formação do carbamato com ΔH^0 independente da temperatura.....	31
Tabela 6 Dados da reação 4 onde ocorre a formação do carbamato de amônio e parâmetros obtidos para alimentação do simulador.....	32
Tabela 7 Resultados da constante de equilíbrio obtidos para a reação 5 onde ocorre a formação da ureia com ΔH^0 independente da temperatura.....	32
Tabela 8 Dados da reação 4 onde ocorre a formação do carbamato de amônio e parâmetros obtidos para alimentação do simulador.....	32
Tabela 9 Resultados da constante de equilíbrio obtidos para a reação representada na figura 6 onde ocorre a formação do biureto, substância indesejada no processo, com ΔH^0 independente da temperatura.....	33
Tabela 10 Dados da reação 5 onde ocorre a formação de ureia e parâmetros obtidos para alimentar o simulador.....	33
Tabela 11 Resultados dos calores das reações e energia livre envolvidas no processo de produção da ureia.....	34
Tabela 12 Resultados obtidos referentes a simulação no reator.....	42
Tabela 13 Resultados obtidos referentes a separação no primeiro flash.....	43
Tabela 14 Resultados obtidos referentes a separação no segundo flash.....	44

Tabela 15 Dados e resultados obtidos para a determinação do volume do reator.....	46
Tabela 16 Dados de custo de equipamento.....	46
Tabela 17 Dados do fator de módulo.....	47
Tabela 18 Dados de custo de equipamento.....	48
Tabela 19 Dados sobre fator de pressão.....	49
Tabela 20 Dados de custo de equipamento.....	50
Tabela 21 Dados sobre fator de pressão.....	50
Tabela 22 Dados de custo de equipamento.....	51
Tabela 23 Dados de custo de equipamento.....	52
Tabela 24 Resumo do custo total de capital (CAPEX).....	53
Tabela 25 Dados requeridos para o cálculo do número de operador por turno.....	54
Tabela 26 Valores assumidos para efeito de cálculos.....	55
Tabela 27 Dados de preços da ureia e dióxido de carbono.....	56
Tabela 28 Dados requeridos para estimar o custo de utilidade com eletricidade.....	58
Tabela 29 Dados de preço de venda da ureia por tonelada, capacidade produtiva da planta e receita.....	58
Tabela 30 Dados de preço das matérias-primas.....	61
Tabela 31 Dados de preço de venda da ureia pot tonelada, capacidade produtiva da planta e receita. ureia.....	62
Tabela 32 Cálculo da margem bruta e do break even considerando um cenário otimista ureia (USD \$317,45/ton e matéria-prima mais barata).....	63
Tabela 33 Fluxo de caixa considerando um cenário otimista ureia (USD \$317,45/ton.....	64
Tabela 34 Cálculo da margem bruta e do break even considerando um cenário pessimista ureia (USD \$317,45/ton e matéria-prima mais cara).....	64

LISTA DE ABREVIATURAS, SIGLAS E SÍMBOLOS.

n_A	é o número de átomos na molécula	
Δ_P	Contribuição em termos de pressão de cada grupo	[bar]
Δ_T	Contribuição em termos de temperatura de cada grupo	[K]
Δ_V	Contribuição em termos de volume de cada grupo	[m ³ /mol]
Δ_{T_b}	Contribuintes em termos de temperatura para o cálculo da temperature boiling point	
T_b	Temperatura normal de ebulição	[K]
P_c	Pressão crítica	[bar]
ΔG_f	Energia livre de gibbs de formação	[J/mol]
V_c	Volume crítico	[m ³ /mol]
ΔH_f	Entalpia de formação	[J/mol]
C_P	Capacidade calorífica	[J/molK]
T_m	Temperatura de fusão	[K]
T_c	Temperatura crítica	[K]
K_{eq}	Constante de equilíbrio da reação	
UNIDO	United Nations Industrial Development Organization	
IFDC	International Fertilizer Development Center	
AIAIA	Associação Internacional para Avaliação de Impactos.	
EETs	Técnica de estimativa de emissão	

SUMÁRIO

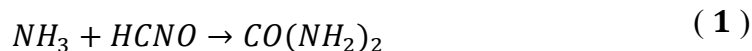
1 INTRODUÇÃO.....	13-21
2 A UREIA COMO FERTILIZANTE.....	22
2.1 Estrutura Molecular.....	22
<i>2.1.2 Diferentes nomenclaturas para ureia.....</i>	<i>23</i>
2.2 Propriedades Físicas.....	23-24
2.3 Propriedades Químicas.....	24
<i>2.3.1 Método de obtenção da ureia.....</i>	<i>24-25</i>
<i>2.3.2 Estabilidade e reactividade da ureia em condições específicas.....</i>	<i>26-27</i>
3 ESTIMATIVA DE PARÂMETROS NECESSÁRIOS PARA USO DO SIMULADOR CHEMCAD.....	28
3.1 Método de contribuição de grupos e mínimos quadrados.....	28
<i>3.1.2 Modificação de Joback do método de Lydersen.....</i>	<i>29</i>
3.2 Método do quadrado dos resíduos mínimos usando Excel.....	28-34
3.3 Cálculo do erro.....	34-35
4 PROCESSO INDUSTRIAL DE PRODUÇÃO DE URÉIA.....	36
4.1 Typical once – Through Urea Process.....	36-40
4.2 Descrição do processo de produção usando o simulador chemcad.....	40-41
4.3 Balanço material e estimativa de custos.....	41-64
5 CONCLUSÕES.....	65
6 RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	66
REFERÊNCIAS.....	67-69
APÊNDICES.....	70-77

1 INTRODUÇÃO

O crescimento considerável da população mundial acarreta consigo serias exigências, tal como, o aumento da capacidade produtiva de alimentos para atender a essa demanda crescente da população, (BRFértil, 2016). Nos últimos anos, a população mundial atingiu a impressionante marca de 7 bilhões de pessoas, com previsões de chegarmos a 9 bilhões em 2050. Em consequência deste crescimento, as produções de alimentos precisam ser cada vez maiores, sobretudo em países considerados em desenvolvimento ou terceiro mundo, onde a escassez de alimentos é acentuada.

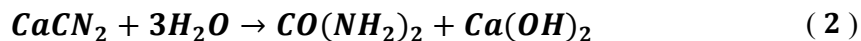
Estimativas revelam a necessidade de se produzir, nos próximos 40 anos, a mesma quantidade de alimentos produzidas nos últimos 8000 anos. E é nesse contexto que os fertilizantes se inserem como insumos essenciais, pois representam 50% da produção de alimentos no mundo. Devido a essa grande importância dos fertilizantes na produção dos alimentos, estudou-se no presente trabalho a avaliação técnica e econômica de um fertilizante em particular, que é a ureia. Assim como a necessidade de entender melhor a produção do fertilizante em questão, bem como sua aplicação no setor da agricultura.

Segundo dados da United Nations Industrial Development Organization -UNIDO e International Fertilizer Development Center - IFDC (1998), em “*fertilizer manual*”, a ureia foi identificada pela primeira vez por **Rouelle** no ano de 1773, quando foi isolada por meio do processo de cristalização a partir da urina. Foi preparada de forma sintética pela primeira vez em 1828 pelo cientista alemão **Friedrich Wöhler** a partir de amônia e ácido cianúrico conforme representada pela equação química (1) mostrada abaixo:



Esta preparação foi um marco na ciência, já que a ureia tornou-se o primeiro composto orgânico a ser preparado por síntese a partir de materiais inorgânicos. Anteriormente, acreditava-se que os compostos orgânicos poderiam ser produzidos somente por organismos vivos. O presente método de sintetizar a ureia a partir de amônia e dióxido de carbono é conhecido desde 1868, mas a produção comercial por esse método começou em 1922 na Alemanha, dez anos depois nos Estados Unidos e em 1935 na Inglaterra.

No entanto, houve alguma produção comercial no Canadá (pela DuPont) a partir de 1920 usando cianamida de cálcio de acordo com a equação (2) que é mostrada a seguir:



Os fertilizantes são definidos como qualquer material sólido ou líquido natural ou fabricado, que é adicionado ao solo para fornecer um ou mais nutrientes essenciais para o bom desenvolvimento e crescimento de uma planta [...]. É muito comum também os fertilizantes serem definidos de forma mais ampla, como sendo os produtos que melhoram os níveis de nutrientes disponíveis da planta e/ou as propriedades químicas e físicas do solo, aumentando direta ou indiretamente o crescimento, rendimento e qualidade da planta (GOWARIKER et al 2009).

O enriquecimento dos solos por fertilizantes orgânicos ou químicos é chamado de fertilização. A fertilização aumenta e mantém a produtividade da terra, enquanto que o índice de fertilidade expressa a suficiência relativa como percentagem da quantidade de nutrientes adequados para rendimentos ótimos. Quanto menor o índice de fertilidade, maior a resposta da cultura à fertilização. Para que as plantas se desenvolvam normalmente, alguns fatores são indispensáveis: temperatura, luz, ar, água, nutrientes, etc. Os nutrientes são elementos químicos essenciais ao desenvolvimento das plantas, tais como: Carbono (C), hidrogênio (H) e oxigênio (O) que constituem 90 a 96% dos tecidos vegetais (AGRIPOINT, 2012). Entretanto, não são considerados no estudo da fertilidade do solo, pois são prioritariamente fornecidos pelo ar e pela água. Para a fertilidade do solo os nutrientes são classificados como (AGRIPOINT, 2012):

- **Macronutrientes primários:** Nitrogênio (N), fósforo (P) e potássio (K).
- **Macronutrientes secundários:** Cálcio (Ca), magnésio (Mg) e enxofre (S).
- **Micronutrientes:** Boro (B), ferro (Fe), zinco (Zn), manganês (Mn), cobre (Cu), Molibdênio (Mo) e cloro (Cl).

Os nutrientes absorvidos em grandes quantidades pelas culturas são considerados macronutrientes, enquanto que aqueles absorvidos em quantidades menores são considerados micronutrientes. No entanto, todos são essenciais e a deficiência de apenas um deles, pode prejudicar o desenvolvimento normal das culturas e conseqüentemente, sua produção. A subdivisão entre macronutrientes primários e secundários é apenas uma questão de marketing industrial, dado o advento das formulações N-P-K. Mas, não há qualquer relação com a importância dos nutrientes, uma vez que são todos essenciais e absorvidos em grandes quantidades.

Desta forma, a categorização dos fertilizantes torna-se imperiosa. DIAS e FERNANDES (2006) classificam os fertilizantes em três tipos. O primeiro tipo são os fertilizantes minerais cuja natureza é fundamentalmente mineral, natural ou sintético, sendo obtido por processo físico, químico ou físico-químico, sendo estes capazes de fornecer nutrientes para as plantas. Já o segundo tipo são os fertilizantes organominerais, definidos como produto resultante da mistura física ou combinação de fertilizantes minerais e orgânicos. Por fim, os fertilizantes orgânicos, produto de natureza fundamentalmente orgânica, obtido por processo físico, químico, físico-químico ou bioquímico, natural ou controlado, com base em matérias-primas de origem industrial, urbana ou rural, vegetal ou animal, enriquecido ou não de nutrientes minerais.

Dentre os fertilizantes supracitados destacam-se os fertilizantes orgânicos, como a ureia. De acordo com BHASKAR e DAS (2007), a ureia é um importante fertilizante nitrogenado, sua utilização está aumentando constantemente, sendo o fertilizante nitrogenado preferido em todo mundo.

Os fertilizantes minerais e orgânicos apresentam diferenças quanto à qualidade, conforme é mostrado na Tabela 1 abaixo:

Tabela 1: Qualidade dos fertilizantes minerais frente aos orgânicos

CARACTERÍSTICAS	FERTILIZANTES MINERIAS ORGÂNICOS	FERTILIZANTES
Fonte dos Nutrientes	Esterco animal e Resíduo da colheita	Nitrogênio do ar e minerais do solo
Concentração dos Nutrientes	Baixa	Alta
Disponibilidade dos nutrientes	Variável	Imediata
Qualidade	Frequentemente Inconsistente	Determinável e consistente

Fonte: (Dias e Fernandes 2006).

Alguns critérios que permitem analisar a qualidade do fertilizante são listados na sequência:

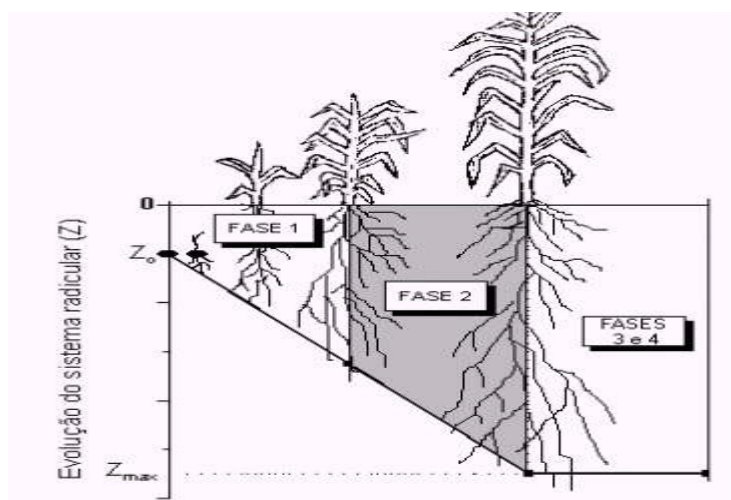
- **Granulometria:** forma e tamanho das partículas. Tem importância na previsão da velocidade de dissolução do fertilizante. Além disso, a uniformidade dos grãos permite boa regulação dos equipamentos de aplicação, o que não compromete a distribuição dos fertilizantes na área de plantio.

- **Consistência:** resistência física dos grãos. A armazenagem e o transporte dos fertilizantes dependem da boa consistência das partículas, para a qual contribui bastante a uniformidade da granulometria.
- **Fluidez:** refere-se à facilidade de livre escoamento do fertilizante, ou seja, sua capacidade de distribuição mecânica no local da aplicação.
- **Densidade:** relaciona-se diretamente com a fluidez e é um atributo importante, principalmente no caso de fertilizantes líquidos.

Os fertilizantes podem se apresentar de diversas formas para o consumo final: em grãos, em pó, misturados ou não etc. A mistura geralmente consiste em reunir diversos ingredientes para atender às necessidades de N, P e K na formulação desejada. O processo pode ser realizado com pó, farelo ou grânulos, geralmente de forma rudimentar e sem grande conteúdo tecnológico.

MAGALHÃES e SILVA (1991) relataram que a aplicação do fertilizante deve ser feita de modo a garantir o maior aproveitamento dele pela cultura e diminuir o risco de efeito salino que pode provocar elevação exagerada na pressão osmótica. Dentre outras variáveis há duas a serem consideradas: O processo de contato entre o elemento e a raiz, e a profundidade do sistema radicular efetivo, isto é, a percentagem de raízes que têm capacidade de maior absorção de nutrientes. Apesar da variação em cada tipo de solo, a profundidade efetiva do sistema radicular é, em geral, mais dependente da espécie de planta (Figura 1).

Figura 1: Ilustração do sistema radicular



Fonte: Sistema radicular..

A alta profundidade do sistema radicular independe do sistema de cultivo, não é somente uma questão de quantidade aplicada do fertilizante, mas principalmente da localização apropriada do nutriente. Os nutrientes são diferentes nas suas características físico-químicas, e tanto a sua localização quanto a sua distribuição no solo, em relação à semente, levam o processo de contato nutriente-raiz no estágio inicial de crescimento do sistema radicular. Isso resultará em grande efeito no volume de solo explorado, em maior absorção de água e nutrientes e, conseqüentemente, em elevada produtividade.

Segundo PROVIPEC (2012), os fertilizantes têm uma ampla aplicação para o desenvolvimento dos solos. Para isso, deve-se analisar a qualidade do terreno, pois determinará as disponibilidades dos nutrientes para as culturas. De posse dos resultados é possível determinar quais os nutrientes necessários para uma determinada cultura.

Uma forma corriqueira de determinar a fertilidade é estabelecer a relação Carbono/Nitrogênio no solo, que informará as disponibilidades de nitrato disponíveis para as culturas, bem como indica o estado de decomposição de matéria orgânica na terra.

As bactérias, ao decomporem a matéria orgânica no solo, se nutrem de nitratos. Quando a relação C/N é maior que 30¹, as bactérias fazem uso do nitrato disponível no solo, empobrecendo-o. Nesse caso deve-se fertilizar agregando nitratos. Entretanto alguns cultivos suportam relação C/N maiores.

Um dos fertilizantes que segue com todos estes processos de utilização no solo é a ureia podendo ser aplicada em diversos setores. A ureia é utilizada em três segmentos, pecuária, indústria e na agricultura.

- Na pecuária, como suplemento protéico na alimentação de ruminantes.
- Na indústria como matéria-prima para fabricação de diversos produtos.
- Na agricultura, como fertilizante.

Os bovinos, caprinos, ovinos necessitam de uma alimentação adequada e equilibrada de proteínas, energia, sais minerais, vitaminas e etc; para atender o seu desenvolvimento e produção. A ureia pecuária é então utilizada como complemento alimentar de animais chegando a substituir pastagens ou gramíneas mais nobres, especialmente em certos períodos do ano.

¹ Ocorre um empobrecimento de nitrato presente no solo, logo há uma necessidade de reposição por fertilizantes nitrogenados.

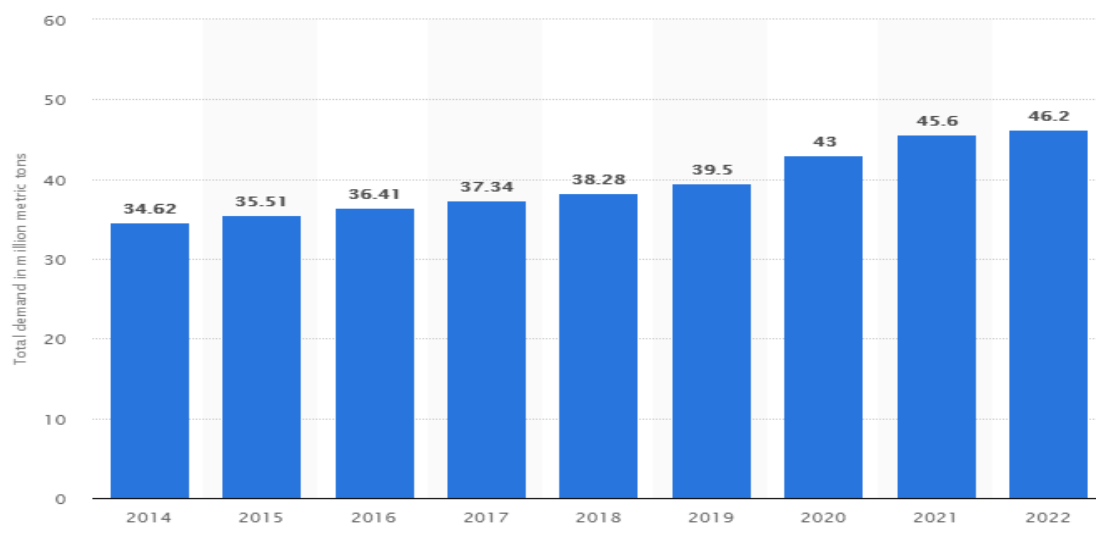
De acordo com, CANABRAVA et al. (2013) a ureia industrial é utilizada na fabricação de melamina, resinas sintéticas, plásticos diversos, impermeabilizantes, dentre outros, além de serem empregadas na indústria alimentícia. Pode-se destacar ainda a utilização da ureia industrial na fabricação de resinas ureia-formaldeído que podem ser utilizadas para:

- Fabricar adesivos de madeira
- Modelar objetos
- Aumentar a resistência do papel
- Evitar enrugamento de tecidos
- Impermeabilizar solos
- Fabricar tintas auto-motivas
- Produzir fármacos, alimentos e cosméticos

O mercado global de fertilizantes é muito fragmentado e fatores como a conscientização entre os agricultores, os termos de crédito e o rendimento das culturas desempenham um papel importante na crescente demanda por fertilizantes. Neste mercado, há pouca diferenciação nos produtos, os custos fixos são muito altos e os fixos de troca são muito baixos, levando a um mercado muito competitivo. Fatores como o aumento da população, o crescimento econômico global, o potencial global do setor agrícola e os preços das matérias-primas de insumos são a força motriz por trás do crescimento da indústria global de fertilizantes (MARKET LITMUS, 2018).

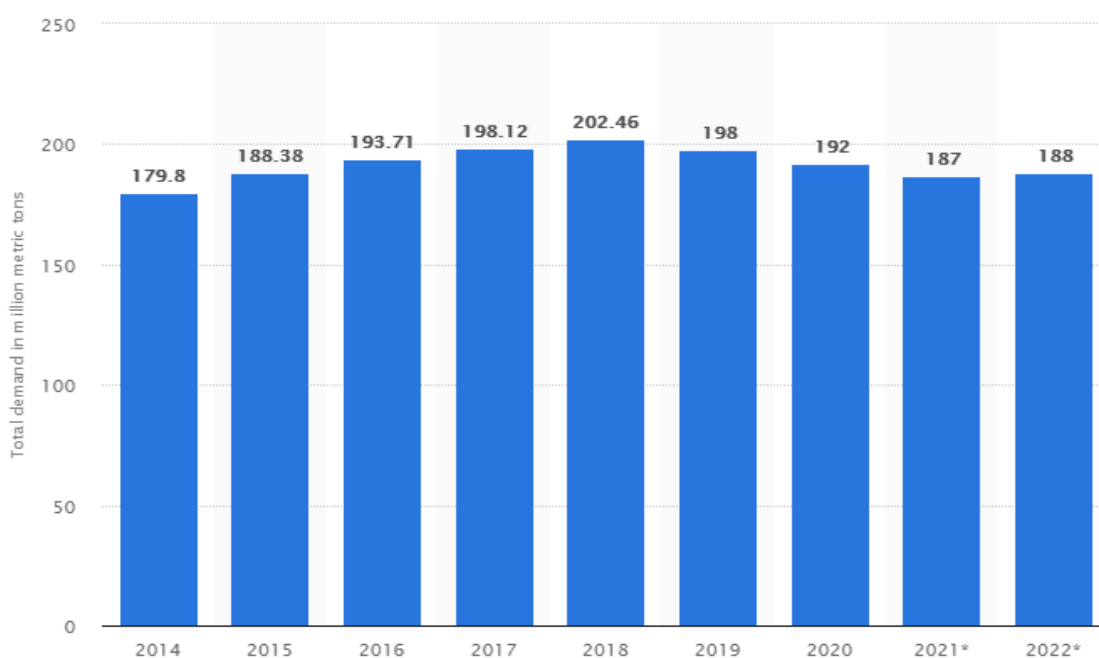
Há uma previsão de demanda global total de fertilizantes potássicos, assim como de fertilizantes de ureia de 2014 a 2022. Estas estatísticas mostram que em 2022, a demanda global por fertilizantes a base de potássio deverá atingir cerca de 46,2 milhões de toneladas, enquanto que a demanda por fertilizantes de ureia irá atingir cerca de 188 milhões de toneladas, de acordo com as Figuras 2 e 3 mostradas a seguir. Estes números mostram que há uma demanda muito alta para os fertilizantes de ureia, e também a necessidade de esforços para aumento da capacidade produtiva desta importante substância que é a ureia. (THE STATISTICS PORTAL, 2018).

Figura 2: Estatísticas da demanda mundial de fertilizantes potássicos entre 2014-2022



Fonte: Forecasted total urea fertilizer demand worldwide from 2014 to 2022 (in million metric tons)

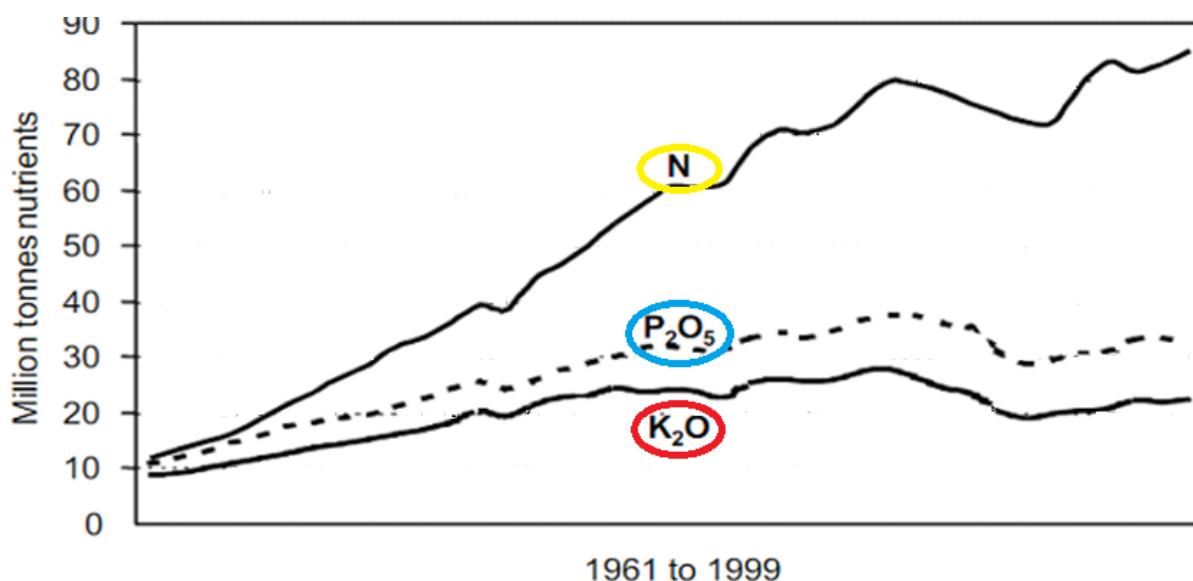
Figura 3: Estatísticas da demanda mundial de fertilizantes de ureia entre 2014-2022



Fonte: Forecasted total urea fertilizer demand worldwide from 2014 to 2022 (in million metric tons)

De forma comparativa tem-se a Figura 4, que ilustra o crescimento ou o aumento no consumo de três fertilizantes N-P-K, entre os anos 1961 e 1999, verificando-se de forma muito clara um crescimento acentuado dos fertilizantes nitrogenados, este é um dos motivos que justifica sua contínua produção em grande escala.

Figura 4: Comparação do consumo mundial de fertilizantes N-P-K entre 1961-1999



Fonte: K.G. Soh International Fertilizer Industry Association Paris (2018)

De modo geral, o presente trabalho pretende realizar um estudo de estimativa para prever a viabilidade econômica do processo de produção de ureia. Neste trabalho, será utilizado o simulador CHEMCAD para simular o once-through urea process, esta que foi a forma de produção de ureia escolhida neste trabalho, assim sendo, o mesmo simulador também será utilizado para prever os custos de investimento, ou seja, o cálculo do *capex* e *opex* com os dados que serão obtidos da simulação. Este processo de produção de ureia é considerado a forma mais simples e econômica de produção deste fertilizante, consistindo basicamente do bombeamento da amônia líquida e compressão do dióxido de carbono para um reator que opera a uma temperatura de 453 K e pressão de 200 atm, posteriormente ocorre a separação do efluente resultante em dois estágios, sendo o primeiro um separador de alta pressão e o segundo de baixa, sendo a ureia obtida neste último estágio numa fração mássica de 77,70.

Assim sendo, o trabalho está dividido em quatro partes. A primeira parte, de caráter introdutório que é o capítulo 1, expõe uma análise histórico conceitual sobre a ureia.

A segunda parte que é o capítulo 2, analisa os aspectos técnicos da ureia, no caso suas propriedades físico-químicas dentre outras; em seguida temos a terceira parte que é o capítulo 3, que procura focar mais no uso do simulador CHEMCAD como ferramenta para estimar a viabilidade econômica para a produção de ureia; e por fim temos o capítulo 4 descreverá o processo produtivo, especificamente o typical one-through urea process, escolhido como processo de estudo para o presente trabalho.

2 A UREIA COMO FERTILIZANTE

A ureia ou carbamida é um fertilizante nitrogenado sólido usado para melhorar o rendimento dos cultivos. Disponível nas formas peroladas (menor), em termos de tamanho, e granulada (maior), a ureia contém 46% de nitrogênio, concentração que reduz custos de transporte, de armazenagem, de aplicação e da adubação propriamente dita (PETROBRAS, 2014). As formas mais comumente encontradas da ureia são mostradas nas Figuras 5 e 6 abaixo:

Figura 5: ureia granulada (maior)



Fonte: MFRURAL (2018)

Figura 6: Ureia perolada (menor)

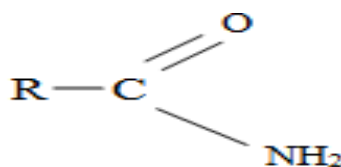


Fonte: MFRURAL (2018)

2.1 Estrutura Molecular

As amidas são compostos que possuem em sua estrutura um nitrogênio ligado diretamente a um grupo carbonila, que é o carbono da dupla ligação com o oxigênio. Teoricamente é como se um dos hidrogênios da amônia fosse substituído por um grupo acila (REDEOMNIA, 2018). Assim sendo as amidas possuem a seguinte fórmula estrutura ilustrada na Figura 7:

Figura 7: Fórmula geral das amidas.

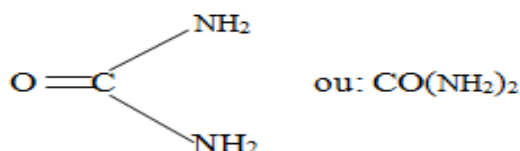


Fonte: Própria autoria.

De acordo com BHASKAR e DAS (2007), a fórmula química NH_2CONH_2 indica que a ureia pode ser considerada a amida do ácido carbâmico NH_2COOH , ou a diamida do ácido carbônico $CO(OH)_2$. Segundo o REDEOMNIA (2018), a amida que possui maior

importância comercial é, na verdade uma diamida do ácido carbônico, que é a ureia. Esta importante diamida é constituída por quatro átomos de elementos diferentes, tendo quantitativamente um átomo de carbono, um átomo de oxigênio, quatro átomos de hidrogênio e dois átomos de nitrogênio. A ureia apresenta a seguinte fórmula de estrutura, abaixo representada pela Figura 8:

Figura 8: Ureia (amida disustituída)



Fonte: Própria autoria.

2.1.2 Diferentes nomenclaturas para ureia

Segundo KROSCWITZ e HOWE-GRANT (1995), apud (GREENPEACE, 2000), existem inúmeras nomenclaturas atribuídas a esse composto, mas dentre todos, os mais conhecidos são os mostrados a seguir:

- Nomenclatura **IUPAC** – 1,1 diamino metanal
- Nomenclatura usual – Carbamida, ácido carbamídico, diamina carbonil, isoureia.
- Nomenclatura Comercial – Ureia.

Assim como toda substância, a ureia também apresenta determinadas propriedades físicas e químicas que a caracterizam.

2.2 Propriedades Físicas

De acordo com dados da “United Nations Industrial Development Organization” UNIDO e “International Fertilizer Development Center” IFDC (1998), foram destacadas algumas das propriedades físicas da ureia conforme mostradas na Tabela 2 que se segue:

Tabela 2: Propriedades da ureia que são de interesse para o uso de fertilizantes.

Molecular weight	60,06
Nitrogen content, %	46,6
Color	white
Specific gravity	1,335
Melting point, °C	132,7
Solubility in water, parts per 100 parts of water by weight at	
0 °C	66,7
20 °C	108,0
40 °C	167,0
60 °C	251,0
80 °C	400,0
100 °C	733,0
Critical relative humidity at	
20 °C	81%
30 °C	73%
Specific heat at 20 °C, Cal/g°C	0,320
Heat of solution in water (endothermic), Cal/g	-57,8

Fonte: (fertilizer manual 1998, pag. 258)

A ureia é uma substância com estado de agregação sólido, possui uma característica inodora, como também um leve odor de amônia (NH_3). Em algumas literaturas afirmam que ela apresenta-se como substância incolor mas deve-se frisar que ela é um sólido cristalino de cor branca. A ureia contém um ponto de ebulição não aplicável, mas um ponto de fusão equivalente a 132,7 °C.

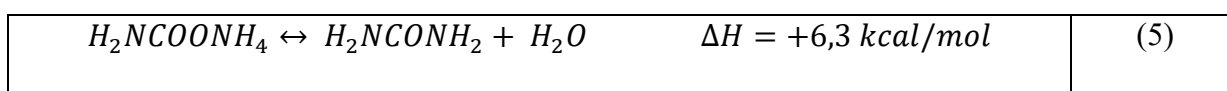
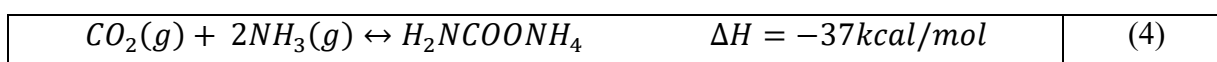
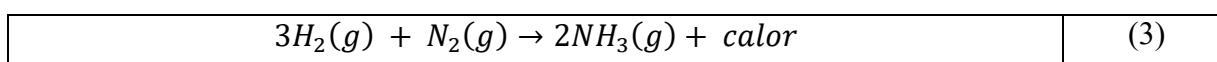
2.3 Propriedades Químicas

No que se refere às propriedades químicas do composto em questão, serão estudados seus métodos de obtenção, a sua estabilidade, reatividade e suas consequências quando combinada com outras substâncias.

2.3.1 Métodos de obtenção

Segundo EHOW (2017), a ureia é um produto residual formado naturalmente por proteína metabolizada em humanos, bem como outros mamíferos, anfíbios e alguns peixes. A ureia sintética é produzida comercialmente a partir de amônia e dióxido de carbono. A ureia, (NH_2CONH_2), é expelida na urina como principal produto final de nitrogênio, resultante do metabolismo das proteínas. Utiliza-se em grande escala como fertilizante e como matéria-prima, na fabricação de plásticos de ureia-formaldeído e de produtos farmacêuticos.

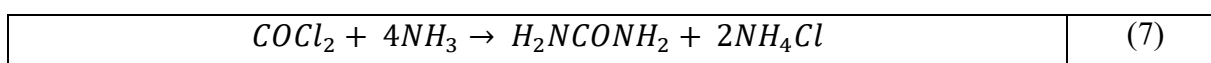
De acordo com DAVEY et al. (2006), a ureia é obtida por síntese industrial inicialmente com a utilização do gás metano (CH_4) que, sob alta temperatura, decompõe-se em hidrogênio molecular (H_2) monóxido de carbono (CO) e dióxido de carbono (CO_2). Por sua vez o hidrogênio, juntamente com o nitrogênio do ar, formam a amônia (NH_3). A amônia na presença do gás carbônico do ar forma o carbamato de amônio (NH_4COONH_2). Finalmente, o carbamato de amônio é decomposto em ureia e água, sendo as reações envolvidas descritas pelas equações químicas 3, 4 e 5 abaixo:



De acordo com SCIENCEDIRECT (2001), a ureia pode ainda ser obtida por hidrólise da cianamida cálcica, conforme é representada pela seguinte equação química (6) abaixo:



Temos também a possibilidade de preparar a ureia por reação de fosgênio com um excesso de amoníaco representada pela equação química (7) seguinte:

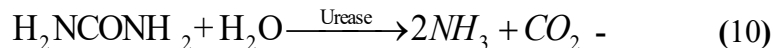
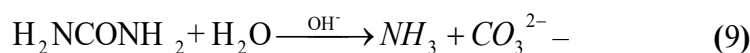
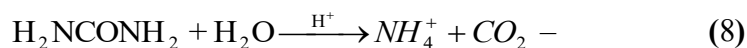


Embora existam inúmeras reações para a obtenção da ureia, o presente trabalho teve seu foco na rota de obtenção desenvolvida por DAVEY et al. (2006). Nesta rota ocorre a formação do carbamato de amônio ($H_2NCOONH_4$) em uma das etapas, e também do biureto ($H_2NCONHCONH_2$) embora este último não tenha sido mostrado, ele é formado devido a uma reação adversa.

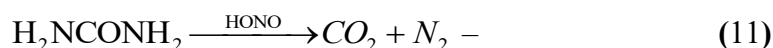
2.3.2 Estabilidade e reactividade da ureia em condições específicas

Reatividade química: São características que as substâncias possuem quando combinadas com outras substâncias podendo ou não reagir (DICTIONARY, 2018).

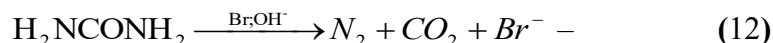
Segundo SASIL (2008), a ureia é quimicamente estável sob condições e temperatura ambiente normal, enquanto armazenado ou usado. A ureia é fracamente básica e forma sais com os ácidos fortes. O fato da ureia ser uma base mais forte do que as amidas ordinárias, atribui-se à estabilização do cátion por meio de ressonância, em temperaturas elevadas o gás de amônia pode ser liberado. A ureia é hidrolisada em presença de ácidos, bases ou da enzima urease (que se pode extrair do feijão produzidas por muitas bactérias, como o *micrococcus urease*). Estas equações químicas 8, 9 e 10 podem ser vistas na sequência:



A ureia reage com o ácido nitroso (HNO_2) com a formação de dióxido de carbono (CO_2) e nitrogênio (N_2); esta reação constitui uma forma útil de destruir o excesso de ácido nitroso nas diazotações, com base na equação 11 que se segue:



A ureia decompõe-se em nitrogênio (N_2) e carbonato por ação dos hipocloritos, de acordo com a equação 12 mostrada abaixo:



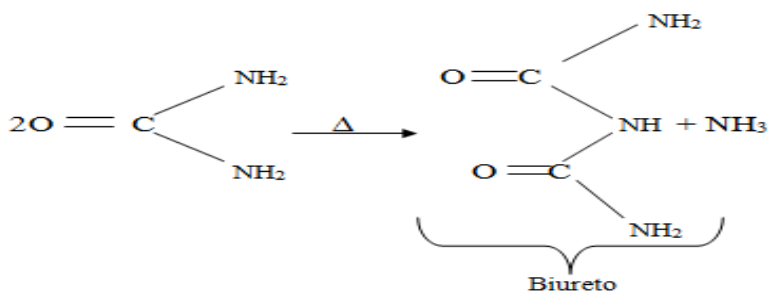
Estabilidade: Este produto (ureia) é instável em presença de um agente exterior, ou seja, ela não pode ser exposta à certas temperaturas devido ao risco de decomposição.

A ureia aquecida na presença de hidróxidos reage formando amoníaco (NH_3) e dióxido de carbono (CO_2). Existem condições a evitar quando se trabalha com a ureia que é o manuseamento de materiais ou substâncias incompatíveis, como por exemplo: O hipoclorito

de cálcio ou hipoclorito de sódio, pois podem formar o tricloreto de nitrogênio que é uma substância explosiva.

A propósito da aplicação foliar da ureia é conveniente lembrar que este fertilizante na fase de secagem, é susceptível, se não houver um conveniente controle da temperatura a formar uma pequena quantidade de biureto de acordo com a reação química ilustrada na Figura 9. O biureto é fitotóxico para a fertilização foliar e a ureia não deve ter mais de cerca de 0,25% de biureto. Aliás mesmo que para aplicação normal, o teor de biureto não deve exceder cerca de 1%. A reação responsável pela formação deste composto é como se segue na Figura 9:

Figura 9: ilustração da reação de formação do biureto com aquecimento da ureia



Fonte: Própria autoria.

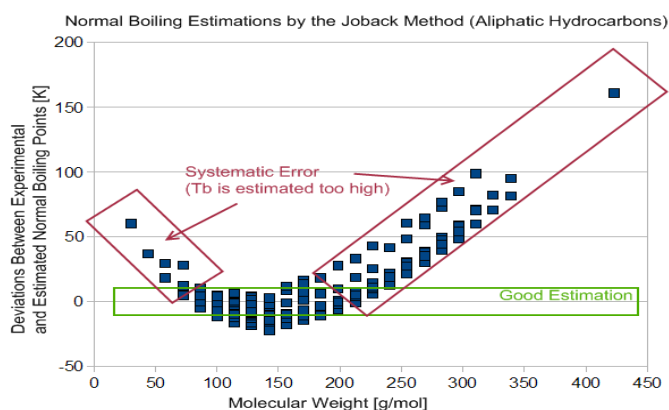
3 ESTIMATIVA DE PARÂMETROS NECESSÁRIOS PARA USO DO SIMULADOR CHEMCAD

3.1 Método de contribuição de grupos e mínimos quadrados

Devido à necessidade de propriedades do carbamato de amônio assim como do biureto, utilizou-se os métodos de contribuição de grupos de Joback e Reid, assim como o método de determinação de parâmetro usando mínimos resíduos quadrado pois não se encontravam disponíveis na literatura nem no simulador chemcad.

De acordo com REID et al. (1987), propriedades críticas como a temperatura, pressão e o volume crítico representam três constantes de componentes puro amplamente utilizados, mas as medições experimentais recentes são quase inexistentes. Excelente compilação de propriedades críticas está disponível em um relatório do Laboratório Nacional de Física de Ambrose. Dentre os vários métodos de contribuição de grupo, o método Ambrose leva ao menor erro, mas é um pouco mais complicado em seu uso do que o método de Joback. Este último foi o escolhido neste trabalho para a determinação das propriedades críticas do biureto sendo que para o carbamato de amônio foi utilizado o método dos mínimos resíduos quadrados. É importante ressaltar que embora o método de Joback apresente erros maiores em seus cálculos quando comparado ao de Ambrose, ele apresentou bons resultados para espécies de massa molecular média, na faixa de 95 a 200 g/mol, como ilustrado na Figura 10 abaixo:

Figura 10: Ilustração da melhor faixa de trabalho pelo método de Joback



Fonte: (BANK, 2008) Systematic Errors of the Joback Method (Normal Boiling Point)

3.1.2 Modificação de Joback do método de Lydersen

De acordo com REID et al. (1987), um dos primeiros métodos de contribuição de grupo de muito sucesso para estimar as propriedades críticas foi desenvolvido por Lydersen em 1955. Desde então, uma quantidade maior de valores experimentais foram relatados e técnicas estatísticas foram desenvolvidas para determinar as contribuições ótimas do grupo. Joback reavaliou os valores das contribuições de grupo, e sendo assim propôs suas relações para os cálculos de T_b , T_c , T_m , P_c , V_c , ΔG_f , ΔH_f e C_p .

Neste método, as unidades das propriedades críticas, energia livre, entalpia e capacidade calorífica são: Kelvin, bar, J/mol, cm^3/mol e J/molK, respectivamente. A seguir são mostrados na Tabela 3 abaixo, os resultados obtidos usando as equações de A.1 a A.5 e a equação A.8 do apêndice A assim como os dados de contribuição de grupos contidos nas Tabelas B.1 e B.2 do apêndice B:

Tabela 3: Propriedades físicas do biureto calculadas pelos métodos de contribuição de grupos

Biureto				
T_b	T_c	T_m	P_c	V_c
548,13	711,60	431,34	14,30	0,932
$\Delta G_f(\text{J/kmol})$	$\Delta H_f(\text{J/kmol})$	X	X	X
$-69,59 * 10^6$	$-188,72 * 10^6$	X	X	X
$C_p(\text{J/molK})$				
A	B	C	D	E
27,56	0,3378	$-1,83 * 10^{-4}$	$2,70 * 10^{-8}$	0

Fonte: Própria autoria

3.2 Método do quadrado dos resíduos mínimos usando Excel

Devido a dificuldades em se obter as propriedades físicas necessárias do carbamato de amônio, recorreu-se a uma base de dados GROUP (2018), e ao *chemical properties handbook*, onde foi possível obter várias destas propriedades tornando possível a determinação de parâmetros necessários para realizar a simulação neste trabalho. estes

últimos foram obtidos usando o método dos mínimos resíduos quadrados para a determinação dos parâmetros, com base nos dados obtidos da base de dados do (GROUP, 2018) e da literatura. Com os parâmetros, ajustou-se as equações dos modelos propostas pelo simulador para o cálculo das propriedades físicas do carbamato. As equações polinomiais sofreram um ajuste no grau do polinômio.

Para equações mais sofisticadas recorreu-se ao método de determinação de parâmetros de forma que fossem possíveis de ser calculadas todas as variáveis que se fizessem necessárias para o melhor desempenho do simulador, uma dessas equações é mostrada na Figura C.1 do apêndice C. Os resultados obtidos são mostrados na Tabela 4 a seguir:

Tabela 4: Propriedades físicas do carbamato de amônio obtidas do chemical properties handbook

Carbamato de amônio				
$T_b(K)$	$T_c(K)$	$P_c(bar)$	$V_c(\frac{cm^3}{mol})$	X
333	539,83	44,51	0,303	X
$\Delta G_f(J/kmol)$	$\Delta H_f(J/kmol)$	X	X	X
-448,06	-645,05	X	X	X
$C_p(J/molK)$				
A	B	C	D	E
57,394	$8,054 \times 10^{-2}$	$2,429 \times 10^{-4}$	$-2,759 \times 10^{-7}$	$8,179 \times 10^{-11}$

Fonte: Chemical properties handbook.

Com base nos dados apresentados na Tabela B.3 do apêndice B foi possível determinar os valores das constantes de equilíbrio, bem como os calores de reação independente da temperatura, assim como os valores das constantes de equilíbrio em função da temperatura. Estes resultados foram calculados usando as equações de A.11 a A.15 do apêndice A numa faixa de temperatura de 298K a 500K e são mostrados nas Tabelas 5 a 11 conforme segue abaixo:

Tabela 5: Resultados da constante de equilíbrio obtidos para a reação 4 onde ocorre a formação do carbamato com ΔH^0 independente da temperatura.

Temp(K)	$\Delta G^0(\frac{J}{mol})$	R(J/molK)	$T_0(K)$	$k(T_0)$	$\Delta H^0(\frac{J}{mol})$	$k(T)$
298	-2,046E+04	8,314	298	3,862E+03	-1,592E+05	3,862E+03
323						2,676E+01
348						3,789E-01
373						9,493E-03
398						3,779E-04
423						2,202E-05
448						1,762E-06
453						1,100E-06
473						1,842E-07
498						2,415E-08
500						2,071E-08

Fonte: Própria autoria.

Tabela 6: Dados da reação 4 onde ocorre a formação do carbamato de amônio e parâmetros obtidos para o simulador.

Temp(K)	Ln(k1)	k1	Ln(keq)Chemcad	keq(Chemcad)	Quadrado da dif.
298	8,259E+00	3,862E+03	8,424E+00	4,554E+03	2,718E-02
323	3,245E+00	2,566E+01	3,238E+00	2,548E+01	4,641E-05
348	-1,116E+00	3,277E-01	-1,203E+00	3,004E-01	7,554E-03
373	-4,940E+00	7,155E-03	-5,048E+00	6,422E-03	1,169E-02
398	-8,317E+00	2,442E-04	-8,410E+00	2,226E-04	8,636E-03
423	-1,132E+01	1,215E-05	-1,138E+01	1,148E-05	3,258E-03
448	-1,400E+01	8,335E-07	-1,401E+01	8,239E-07	1,340E-04
453	-1,450E+01	5,048E-07	-1,450E+01	5,038E-07	4,172E-06
473	-1,640E+01	7,539E-08	-1,636E+01	7,814E-08	1,284E-03
498	-1,856E+01	8,669E-09	-1,848E+01	9,389E-09	6,359E-03
500	-1,873E+01	7,361E-09	-1,864E+01	7,998E-09	6,886E-03
X	X	X	X	X	7,302E-02
Parâmetros Chemcad					
X	A	B	C	D	E
X	-5,858E+01	1,997E+04	0	0	0

Tabela 7: Resultados da constante de equilíbrio obtidos para a reação 5 onde ocorre a formação da uréia com ΔH^0 independente da temperatura.

Temp(K)	$\Delta G^0(\frac{J}{mol})$	R(J/molK)	$T_0(K)$	$k(T_0)$	$\Delta H^0(\frac{J}{mol})$	$k(T)$
298	1,391E+04	8,314	298	3,642E-03	2,545E+04	3,642E-03
323						8,067E-03
348						1,594E-02
373						2,874E-02
398						4,813E-02
423						7,583E-02
448						1,136E-01
453						1,225E-01
473						1,630E-01
498						2,255E-01
500						2,311E-01

Fonte: Própria autoria

Tabela 8: Dados da reação 4 onde ocorre a formação do carbamato de amônio e parâmetros obtidos para o simulador.

Temp(K)	Ln(k2)	K2	Ln(keq)Chemcad	keq(Chemcad)	Quadrado da dif.
298	-5,615E+00	3,642E-03	-5,659E+00	3,484E-03	1,964E-03
323	-4,637E+00	9,690E-03	-4,535E+00	1,073E-02	1,033E-02
348	-3,476E+00	3,094E-02	-3,377E+00	3,414E-02	9,670E-03
373	-2,189E+00	1,121E-01	-2,157E+00	1,157E-01	1,007E-03
398	-8,133E-01	4,434E-01	-8,565E-01	4,246E-01	1,867E-03
423	6,263E-01	1,871E+00	5,341E-01	1,706E+00	8,507E-03
448	2,115E+00	8,289E+00	2,020E+00	7,537E+00	9,048E-03
453	2,418E+00	1,122E+01	2,329E+00	1,026E+01	7,940E-03
473	3,644E+00	3,824E+01	3,603E+00	3,669E+01	1,714E-03
498	5,209E+00	1,830E+02	5,282E+00	1,967E+02	5,257E-03
500	5,336E+00	2,08E+02	5,420E+00	2,260E+02	7,090E-03
X	X	X	X	X	6,440E-02
Parâmetros Chemcad					
X	A	B	C	D	E
X	5,342E+02	-1,469E+04	-9,678E+01	2,042E-01	0

Fonte: Própria autoria.

Tabela 9: Resultados da constante de equilíbrio obtidos para a reação representada na Figura 6 em que ocorre a formação do biureto, substância indesejada no processo, com ΔH^0 independente da temperatura

Temp(K)	$\Delta G^0(\frac{J}{mol})$	R(J/molK)	$T_0(K)$	$k(T_0)$	$\Delta H^0(\frac{J}{mol})$	$k(T)$
298	3,083E+05	8,314	298	9,044E-55	5,974E+04	9,044E-55
323						5,847E-54
348						2,891E-53
373						1,154E-52
398						3,869E-52
423						1,125E-51
448						2,903E-51
453						3,465E-51
473						6,776E-51
498						1,453E-50
500						1,539E-50

Fonte: Própria autoria

Tabela 10: Dados da reação 5 em que ocorre a formação de ureia e parâmetros obtidos para alimentar o simulador

Temp(K)	Ln(k3)	K3	Ln(keq)Chemcad	keq(Chemcad)	Quadrado da dif.
298	-1,244E+02	9,044E-55	-1,243E+02	1,017E-54	1,381E-02
323	-1,227E+02	5,058E-54	-1,227E+02	4,948E-54	4,880E-04
348	-1,215E+02	1,692E-53	-1,216E+02	1,585E-53	4,265E-03
373	-1,207E+02	3,763E-53	-1,208E+02	3,547E-53	3,507E-03
398	-1,202E+02	6,001E-53	-1,203E+02	5,804E-53	1,118E-03
423	-1,201E+02	7,260E-53	-1,201E+02	7,218E-53	3,426E-05
448	-1,201E+02	6,944E-53	-1,201E+02	7,040E-53	1,885E-04
453	-1,201E+02	6,710E-53	-1,201E+02	6,820E-53	2,640E-04
473	-1,203E+02	5,413E-53	-1,203E+02	5,530E-53	4,534E-04
498	-1,208E+02	3,516E-53	-1,208E+02	3,577E-53	2,914E-04
500	-1,208E+02	3,372E-53	-1,208E+02	3,427E-53	2,659E-04
X	X	X	X	X	2,469E-02
Parâmetros Chemcad					
X	A	B	C	D	E
X	-4,716E+02	-1,666E+01	6,935E+01	-1,604E-01	0

Fonte: Própria autoria

Tabela 11: Resultados dos calores das reações e energia de Gibbs envolvidas no processo de produção da uréia.

Reação 4 formação do carbamato de amônio	
$\Delta G^0_R (\frac{J}{mol})$	$\Delta H^0_R (\frac{J}{mol})$
-2,046E+04	-1,592E+05
Reação 5 formação da uréia	
$\Delta G^0_R (\frac{J}{mol})$	$\Delta H^0_R (\frac{J}{mol})$
1,391E+04	2,545E+04
Reação da figura 5.2 formação do biureto	
$\Delta G^0_R (\frac{J}{mol})$	$\Delta H^0_R (\frac{J}{mol})$
3,083E+05	5,974E+04

Fonte: Própria autoria

Após a obtenção das propriedades físicas, proceder-se-à a avaliação dos devios cometidos calculando-se o erro para algumas propriedades e em pontos específicos.

3.3 Cálculo do erro

Para o biureto, realizou-se o cálculo do erro baseado na temperatura de fusão encontrada ao longo das pesquisas realizadas e por ser o dado que se encontrava disponível, sendo que para o carbamato os erros foram calculados usando os resultados obtidos em relação às equações propostas pelo modelo do CHEMCAD e no banco de dados do GROUP (2018). Os resultados ilustrados abaixo são referentes ao erro relativo calculado pela Equação 13 abaixo:

- Erro relativo em relação a temperatura crítica do biureto

$$\text{Erro relativo (\%)} = \left| \frac{T_{m \text{ literatura}} - T_{m \text{ experimental}}}{T_{m \text{ literatura}}} \right| \times 100\% \quad (13)$$

$$\text{Erro relativo (\%)} = \left| \frac{458 - 431,34}{458} \right| \times 100\% = 14,4\%$$

- Erro relativo percentual em relação ao carbamato de amônio
- Erro quanto a viscosidade de líquido

$$\textit{Erro relativo} (\%) = \left| \frac{0,468246 - 0,476007199}{0,468246} \right| \times 100\% = 1,66\%$$

Embora os outros erros relativos não tenham sido mostrados ao longo deste trabalho, devido ao fato de serem vários em detrimento das diferentes propriedades calculadas, pode-se dizer que os erros encontrados foram satisfatórios e, portanto aceitáveis.

4 PROCESSO INDUSTRIAL DE PRODUÇÃO DE URÉIA

4.1 Typical once – through urea process

Segundo MOHAMMED et al. (2015), o processo “once through ureia” é um processo convencional em que o carbamato não convertido é decomposto em amônia e dióxido de carbono através do aquecimento da mistura de efluentes reagentes de síntese de ureia a baixa pressão. A amônia e o dióxido de carbono são separados da solução de ureia e utilizados para produzir sais de amônio pela absorção de amônia.

BHASKAR e DAS, (2007) relatam que a amônia líquida é bombeada através de uma bomba pistão de alta pressão e o dióxido de carbono gasoso é comprimido através de um compressor até a síntese da ureia numa pressão do reator em que a relação molar de alimentação de amônia para dióxido de carbono seja de 2/1 ou de 3/1. O reator geralmente opera em uma faixa de temperatura entre 175 a 190°C. O efluente do reator é separado a uma pressão em torno de 2 atm e o carbamato decomposto é separado do produto final em um trocador de calor do tipo casco tubo aquecido a vapor. O gás úmido, separado da solução de 85-90% de ureia e contendo cerca de 0,6 toneladas de amônia no estado gasoso por tonelada de ureia produzida geralmente são enviados para processos adjacentes de produção de nitrato de amônio ou sulfato de amônio com o propósito de serem recuperados. Em média, uma conversão de 60% é atingida com a conversão de carbamato de amônio em ureia. O excesso de calor é removido do reator por meio de uma bobina produtora de vapor de baixa pressão em uma quantidade de cerca de 280.000cal/kg de ureia produzida.

- **Vantagens**

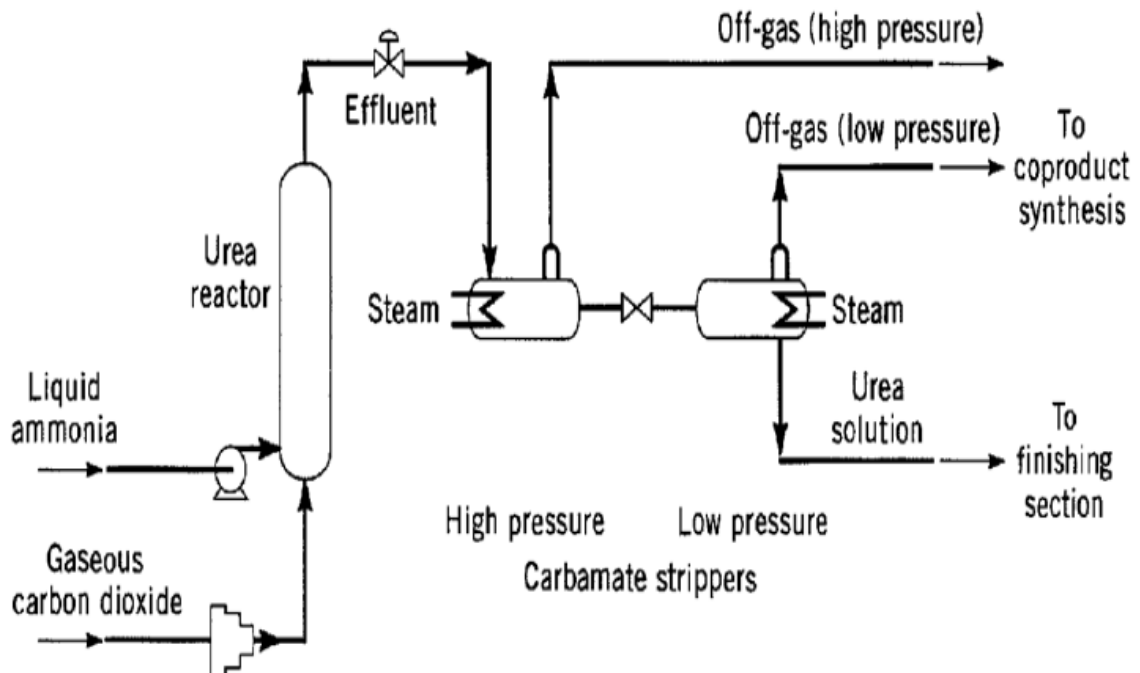
- Processo simples

- **Desvantagens**

- Grande quantidade de sal de amônia formada como produto
- A conversão total de dióxido de carbono é baixa
- Alto custo de produção
- Alto custo de energia
- Poluição ambiental alta

O processo supracitado pode ser ilustrado como segue na Figura 11:

Figura 11: Typical Once-Through Urea Process



Fonte: (MOHAMMED et al. 2015)

- **Processo em geral**

Amônia e dióxido de carbono no estado gasoso são comprimidos separadamente e alimentados à alta pressão (180 atm) para uma autoclave ou reator como mostrado na Figura 8, que deve ser resfriado posteriormente devido à natureza altamente exotérmica da reação. Uma mistura líquida de ureia, carbamato de amônio, água e (amônia + dióxido de carbono) não reagidos é produzida. Este efluente líquido é reduzido a 27 atm e alimentado para um evaporador de flash contendo um separador de gás-líquido e condensador. Amônia, dióxido de carbono e água não reagidos são assim removidos e reciclados. Uma solução aquosa de ureia e carbamato é passada para o tambor de ensaio atmosférico onde ocorre novamente a decomposição do carbamato. Os gases de escape desta etapa podem ser reciclados ou enviados para a unidade de amônia para a fabricação de fertilizantes químicos.

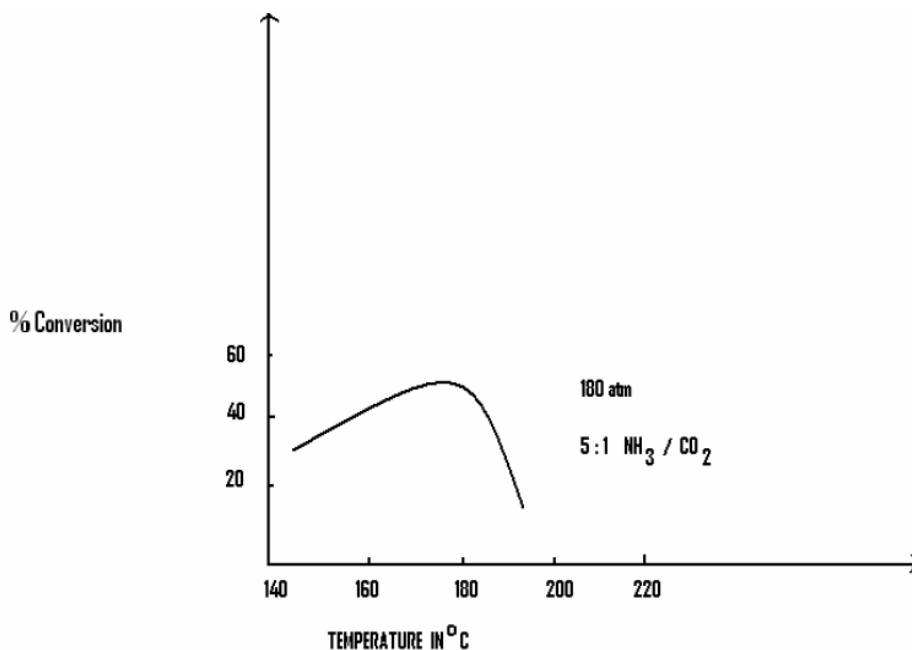
A solução aquosa de ureia a 80% pode ser utilizada como tal ou enviada para um evaporador a vácuo para obter ureia fundida contendo menos de 1% de água. A massa fundida

é então pulverizada em uma torre de perfuração. Para evitar a formação de biureto e mantê-lo abaixo de 1%, a temperatura deve ser mantida logo acima do ponto de fusão para tempos de processamento de 1-2 segundos nesta fase da operação.

- **Variáveis que afetam as reações na autoclave**
- **Temperatura**

De acordo com BHASKAR e DAS (2007), a temperatura do processo (185°C) favorece o rendimento de equilíbrio a uma dada pressão (180 atm). A conversão de carbamato de amônio em ureia aumenta gradualmente à medida que a temperatura aumenta. No entanto, após uma determinada temperatura, dependendo da pressão, a conversão diminui com o aumento da temperatura. A pressão correspondente a esta temperatura que geralmente está na faixa de 175-185°C é conhecida como pressão de decomposição que é cerca de 180 atm. Esta relação entre a conversão e a temperatura pode ser ilustrada com base na Figura 12 que se segue:

Figura 12: Comportamento da conversão em função da variação da temperatura no processo



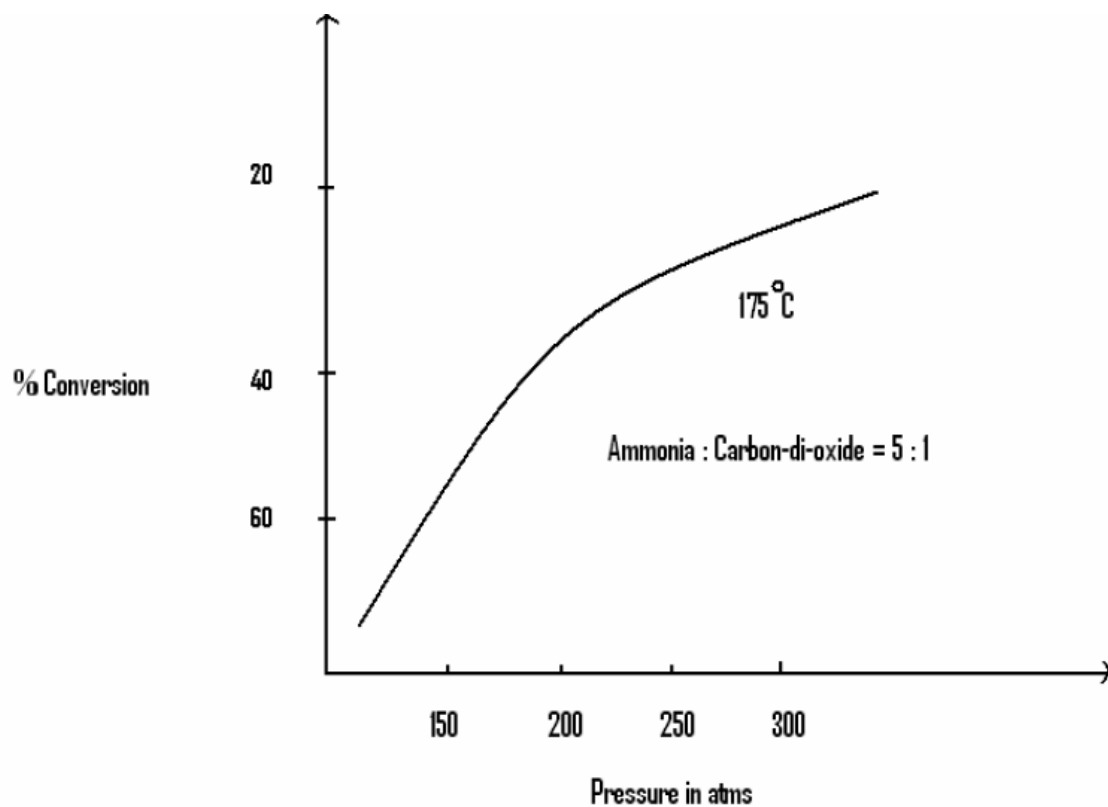
Fonte: (BHASKAR e DAS, 2007)

- **Pressão**

A reação principal é suficientemente lenta à pressão atmosférica. No entanto, começa quase instantaneamente a uma pressão da ordem de 100 atm e temperatura de 150°C. Há

redução de volume na reação geral e, portanto, alta pressão favorece a reação direta. Esta pressão é selecionada de acordo com a temperatura de forma que seja mantida a relação amônia-dióxido de carbono. Este comportamento da reação é ilustrado de acordo a Figura 13 que segue:

Figura 13: Comportamento da conversão em função da variação da pressão no processo



Fonte: (BHASKAR e DAS 2007)

- **Concentração**

Quanto maior a concentração dos reagentes, maior será a conversão da reação direta de acordo com a lei da ação da massa. Dióxido de carbono é o reagente limitante, assim, uma maior relação entre amônia e dióxido de carbono favorecerá a conversão. Como a desidratação de carbamato resulta em ureia, quanto menor a relação água e dióxido de carbono isso também favorecerá a conversão. A ingestão de água para o reator deve, portanto, ser mínima.

- **Tempo de residência**

Como a reação da ureia é lenta e leva cerca de 20 minutos para atingir o equilíbrio, um tempo suficiente deve ser fornecido para se obter uma maior conversão. O reator é projetado para acomodar estas condições com relação aos outros parâmetros de temperatura, pressão e concentração.

- **Formação de biureto**

Um problema enfrentado durante o processo de produção de ureia consiste na formação de biureto, que não é um composto desejável porque afeta negativamente o desenvolvimento de certas plantas. Assim sendo, seu teor em ureia não deve ser superior a 1,5% em peso.

4. 2 Descrições do processo de produção usando o simulador chemcad.

Após a obtenção das as informações necessárias para que o simulador pudesse ser utilizado como ferramenta suporte, procedeu-se a alimentação do banco de dados deste simulador (*CHEMCAD*).

Para o processo de produção de ureia estudado ao longo deste trabalho, primeiramente alimentou-se a matéria-prima amônia (NH_3) a uma temperatura de 298 K e pressão de 9,9 atm aproximadamente. A amônia é bombeada para um misturador de modo que a corrente contendo esta substância alcançasse uma pressão de 200 atm. O dióxido de carbono, outra matéria-prima deste processo, é alimentado a uma temperatura e pressão de 298 K e 63,5 atm respectivamente. Este dióxido de carbono é também alimentado a um misturador, assim como a amônia, mas neste caso usando um compressor, com o objetivo de alcançar uma pressão também igual a 200 atm. O misturador utilizado mistura estas duas correntes e alimenta o

reator numa pressão e temperatura de 200 atm e 336 K. Em alguns processos o misturador realiza a mistura de três correntes, porém no presente estudo, o misturador realiza somente a mistura de duas correntes já que a terceira corrente é referente ao reciclo do carbamato de amônio, fato que não é considerado no processo em questão. O reator utilizado nesta simulação opera a uma temperatura de 458 K (185°C), produzindo uma taxa de efluente líquido de $93334,5751 \frac{kg}{h}$, sendo que a ureia representa aproximadamente 49% deste efluente, os demais compostos nesta corrente são H_2O , CO_2 , NH_2COONH_4 , NH_3 e $NH_2CONHCONH_2$, sendo o biureto formado devido a uma reação indesejada. Este efluente passa por uma válvula e experimenta uma queda de pressão antes de entrar no separador flash multipropósito.

De acordo com o **FULL REPORT UREA**, o dióxido de carbono e a amônia reagem primeiro e uma conversão de 95% do equilíbrio é alcançada. Baseado nesta informação trabalhou-se no decorrer deste trabalho com conversões iguais a do equilíbrio. Para as reações envolvidas utilizou-se o simulador atribuindo-se conversões de 95%, 95% e 2% para cada reação de acordo com a ordem implementada no simulador (reação 1, reação 2 e reação 3). A reação de formação do carbamato de amônio é uma reação rápida, mas não é a determinante deste processo, a reação determinante deste processo é a que consiste na conversão do carbamato de amônio em ureia, sendo que a conversão para esta reação varia entre 40% - 70% de acordo com o informado pelo **FULL REPORT UREA**. Parte do efluente do reator é removido na parte superior do primeiro separador como (off gas high pressure) e a solução restante segue para um segundo separador cujo objetivo é a decomposição do carbamato e posterior separação da solução de ureia. O efluente removido na parte superior deste separador é denominado (off gas low pressure), estes gases podem ser conduzidos para outras unidades e a solução de ureia retirada na parte inferior deste separador pode ou não ser concentrada em outro equipamento dependendo da finalidade de uso da uréia. Algumas imagens referentes ao simulador encontram-se ilustradas no apêndice (C).

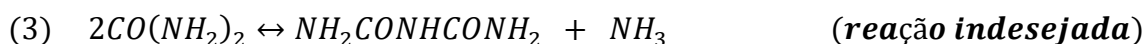
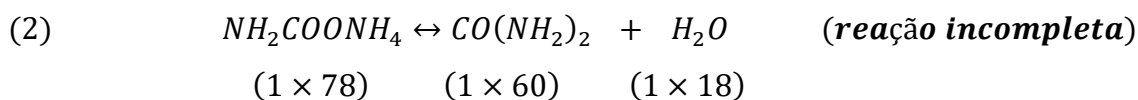
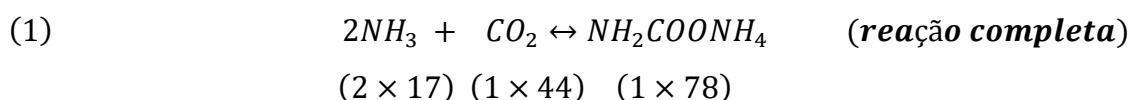
4. 3 Balanço material e estimativa de custos

- **Balanço material**

No que diz respeito ao balanço material, este foi desenvolvido selecionando uma capacidade de produção de aproximadamente 500 mil $\frac{ton}{ano}$, considerando que 1 ano tenha considerado 345 dias de operação da fábrica e assumindo que esta fábrica opera continuamente e prevê uma parada programada de 20 dias. Os cálculos necessários para este

balanço material foram realizados usando o simulador **CHEMCAD**, baseado nas 4 equações químicas mostradas na sequência. Deve-se ressaltar somente a questão da não aplicação do reciclo neste caso. As Tabelas 12, 13 e 14 mostram os resultados obtidos no reator e nos dois separadores usados ao longo deste trabalho:

- **Reações envolvidas**



- **Resultados obtidos pelo balanço material no reator usando o simulador.**

Tabela 12: Resultados obtidos referentes à simulação no reator.

Entrada			Saída		
Espécies	Taxa (kg/h)	Fração mássica	Espécie	Taxa (kg/h)	Fração mássica
NH_3	40177,1391	0,430	NH_3	6156,341	0,066
CO_2	53158,6834	0,570	CO_2	9034,246	0,097
Total	93335,8225	1	$CO(NH_2)_2$	44846,015	0,480
-	-	-	NH_2COONH_4	18785,519	0,201
-	-	-	H_2O	13727,000	0,147
-	-	-	$NH_2CONHCONH_2$	785,453	0,008
-	-	-	Total	93334,575	1

Fonte: Própria autoria.

- **Resultados obtidos no balanço material pelo separador flash 1.**

Na Tabela 13 que segue, são apresentadas informações sobre o balanço material no primeiro separador, sendo todas as taxas dadas em *kg/h*, e as frações apresentadas são mássicas.

Tabela 13: Resultados obtidos referentes a separação no primeiro flash.

						Saída		
Entrada			Topo			Base		
Espécie	Taxa	Fraç	Espéc	Taxa	Fraç	Espéc	Taxa	Fraç
	(<i>kg/h</i>)			(<i>kg/h</i>)			(<i>kg/h</i>)	
<i>amônia</i>	6156,341	0,066	<i>amônia</i>	2729,975	0,108	<i>amônia</i>	3426,366	0,050
<i>dióx. Car.</i>	9034,246	0,097	<i>dióx. carb.</i>	8337,319	0,328	<i>dióx. car</i>	696,9270	0,010
<i>ureia</i>	44846,02	0,480	<i>ureia</i>	4563,690	0,180	<i>ureia</i>	40282,33	0,593
<i>carb. amô.</i>	18785,52	0,201	<i>carb. amôn</i>	7029,383	0,277	<i>carb. amô</i>	11756,14	0,173
<i>água</i>	13727,00	0,147	<i>água</i>	2367,785	0,093	<i>água</i>	11359,22	0,167
<i>biureto</i>	785,4527	0,008	<i>biureto</i>	354,541	0,014	<i>biureto</i>	430,9114	0,006
Total	93334,58	1	Total	25382,69	1	Total	67951,89	1

Fonte: Própria autoria.

- **Resultados obtidos no balanço material pelo separador flash .2**

Usa-se um segundo separador flash com o objetivo de melhorar a separação do efluente proveniente do separador flash 1 e assim aumentar a composição do produção final, sendo este último constituído majoritariamente por ureia, representada por uma fração de aproximadamente 66%, como já foi dito em parágrafos anteriores esta composição do produto final desejado pode ser melhorada em dependência da finalidade que se deseja dar a esta corrente final, podendo-se chegar a um produto com teor de água de até 1%, que no caso seria a chamada ureia fundida.

Tabela 14: Resultados obtidos referentes a separação no segundo flash.

Saída								
Entrada			Topo			Base		
Espécie	Taxa	Fraç	Espéc	Taxa	Fraç	Espéc	Taxa	Fraç
	(kg/h)			(kg/h)			(kg/h)	
<i>amônia</i>	3426,366	0,050	<i>amônia</i>	3417,637	0,239	<i>amônia</i>	8,7287	0,0002
<i>dióx. car.</i>	696,927	0,010	<i>dióx. car.</i>	675,2761	0,047	<i>dióx. car.</i>	21,6509	0,0004
<i>ureia</i>	40282,33	0,593	<i>ureia</i>	5132,533	0,359	<i>ureia</i>	35149,791	0,6600
<i>carb. amô.</i>	11756,14	0,173	<i>carb. amô.</i>	3857,289	0,270	<i>carb. amô.</i>	7898,8469	0,1472
<i>água</i>	11359,14	0,167	<i>água</i>	1213,691	0,085	<i>água</i>	10145,523	0,1888
<i>biureto</i>	430,9113	0,006	<i>biureto</i>	1,1460	0,0001	<i>biureto</i>	429,7653	0,0080
Total	67951,89	1	Total	14297,57	1	Total	53654,304	1

Fonte: Própria autoria.

- **Estimativa de custos**

Para a avaliação destes custos todos os dados foram baseados no TURTON et al. (2009). Após os estudos para o uso do simulador utilizando-se os balanços de massa necessários, a estimativa do custo dos equipamentos apresentados no fluxograma do processo será realizada. Os cálculos que serão mostrados na sequência não permite uma estimativa detalhada, mas sim, uma estimativa de ordem de grandeza (**Estimativa de classe 5**). Assim sendo, estes cálculos nos permitirão saber os custos de capital e de operação, CAPEX e OPEX respectivamente, para o processo em questão.

O custo de capital refere-se aos custos associados à construção de uma nova fábrica ou a modificações em uma fábrica de produtos químicos já existentes. Existem cinco classificações geralmente aceitas de estimativa de custo de capital mais encontradas nas indústrias de processo, de acordo como mostrado na sequência:

- Estimativa detalhada
- Estimativa definitiva
- Estimativa preliminar
- Estudo de estimativa
- Estimativa de ordem de grandeza.

Para este trabalho as estimativas feitas são mais próximas da estimativa de ordem de grandeza e estudo de estimativa.

Assim sendo, os custos de capital relacionado ao CAPEX retratarão somente os gastos realizados com a compra dos equipamentos mais relevantes para o processo considerado, enquanto o OPEX retratará os custos realizados com utilidades no caso água de resfriamento e energia elétrica, assim como os salários com funcionários e os custos com a compra de matéria-prima. Deste modo serão descritos abaixo os principais equipamentos e seus custos, sendo estes calculados na condição base ($P = 1\text{bar} = 0,0\text{bar}_g$ e material de aço carbono) e, posteriormente corrigidos com o fator de pressão ou de material ou ainda pelos dois fatores caso se faça necessário. Para equipamentos cuja capacidade ultrapasse as dispostas em TURTON et al. (2009), estes terão seus custos calculados usando a regra dos seis décimos.

- **Reator.**

O reator em questão foi considerado um PFR devido às condições operacionais e a necessidade de produção contínua dada a capacidade selecionada para o processo em questão. De acordo com CHAUHAN et al. (2014-2016). O valor de $\tau = 20,822\text{min} = 0,347\text{h}$ foi reportado, sendo a capacidade de produção usada no trabalho do mesmo autor próxima a do presente trabalho. Este valor para o tempo de residência foi utilizado para o cálculo do volume conforme as Equações 14; 15 e 16 a seguir:

- $$\tau = \frac{V(m^3)}{F(\frac{m^3}{h})} \quad (14)$$

- $$\rho = \frac{P(atm) \times M(\frac{kg}{kmol})}{R(\frac{atm \times L}{mol \times K}) \times T(K)} \quad (15)$$

- $$F = \frac{m(\frac{kg}{h})}{\rho(\frac{kg}{m^3})} \quad (16)$$

Em que a taxa é dada em kg/h , a densidade em kg/m^3 , a temperatura em $^{\circ}C$ e entre parênteses em K , a massa molecular (MM) é dada em $kg/kmol$, a vazão volumétrica em m^3/h e por fim o volume que é dado em m^3 .

Para o cálculo dos custos utilizou-se as informações de operação do reator, temperatura 548 K e pressão 200 atm, assim como alguns dados reportados por TURTON et al. (2009), estes são mostrados na Tabela 15 que segue:

Tabela 15: Dados e resultados obtidos para a determinação do volume do reator.

Dados requeridos para os cálculos						
Taxa mássica	Taxa mássica	Densidade	Densidade	Temperatura	MM	MM
NH_3	CO_2	NH_3	CO_2	no reator	NH_3	CO_2
40177,14	53158,68	618	234,32	185 (458)	17	44
Resultados obtidos						
Vazão	Vazão	Vazão	Volume			
volumétrica	volumétrica	volumétrica				
		total				
65,01	226,86	291,87	101,28			

Fonte: Própria autoria.

Tabela 16: Dados de custo de equipamento

Tipo de equipamento	Descrição do equipamento	K_1	K_2	K_3	Volume (m^3)	Tamanho mínimo	Tamanho máximo
Reator	Autoclave	4,5587	-0,7014	0,002	101,28	1,0	15,0

Fonte: TURTON et al. (2009)

- **Custo na condição base (C_P^0)**
- $\log_{10} C_P^0 = K_1 + K_2 \times \log_{10} A + K_3 \times (\log_{10} A)^2$ (17)

Neste caso verifica-se que o volume do reator excede a capacidade máxima permitida de acordo com os dados da Tabela, o que faz necessário o uso da regra dos seis décimos neste caso. Logo será calculado o valor do custo na capacidade máxima permitida de acordo com os dados tabelados e posteriormente este será corrido, os procedimentos são como ilustrados na sequência:

$$C_P^0 = \$ 5452,0016$$

Tendo o valor do equipamento na condição base, é possível realizar-se o custo do módulo, como é ilustrado na Equação 18 a seguir:

- $C_{BM} = C_P^0 \times F_{BM}$ (18)

Em que F_{BM} , é o fator que corrige o custo do equipamento tendo em conta uma pressão diferente da condição base assim como um material diferente da condição base a Equação 19 para o cálculo deste fator é mostrada na sequência:

$$\bullet \quad F_{BM} = B_1 + F_P \times F_M \times B_2 \quad (19)$$

Para o caso do reator em específico, temos os seguintes dados de TURTON et al. (2009), da Tabela A.7 apêndice A, mostrados na Tabela 17 que segue:

Tabela 17: Dados do fator de módulo.

Tipo de equipamento	Descrição do equipamento	F_{BM}
Reator	Autoclave	4,0

Fonte: TURTON et al. (2009)

Assim sendo, realizou-se a correção do custo do equipamento (reator) na condição base para a real condição de operação tem-se:

$$C_{BM}(2001) = 4 \times 5452,0016 = \$ 21808,0064$$

Este custo do módulo engloba o custo de instalação realizado em relação a um CEPCI do ano de 2001 que de acordo com TURTON et al. (2009, igual a 394. Portanto, tem-se a necessidade ainda de uma correção em relação a esse índice. Neste trabalho, a correção utilizou um CEPCI do ano de 2017 que é aproximadamente igual a 567,5 como citado em algumas referências, o valor corrigido é ilustrado de acordo com a Equação 20 a seguir:

$$C_{BM}(2017) = C_{BM}(2001) \times \left(\frac{567,5}{394} \right) = \$ 31411,280 \quad (20)$$

Usando a regra dos seis décimos ilustrada pela equação (21) abaixo, tem-se que o custo é:

$$\frac{Custo_{2017(101,28)}}{Custo_{2017(45)}} = \left(\frac{101,28}{15} \right)^{0,6} \quad (21)$$

$$Custo_{2017(80,41)} = Custo_{2017(45)} \times \left(\frac{101,28}{15} \right)^{0,6} = \$98797,2987$$

- **Bomba centrífuga**

Para o cálculo do custo da bomba centrífuga, os procedimentos seguiram padrões muito semelhantes aos realizados para o reator. Algumas informações foram diferentes, como a capacidade referente à potência da bomba, que fornecida pelo simulador como 595,7103kW, e neste caso, a potência da bomba foi superior a capacidade máxima representada na Tabela 18. Portanto, seu custo foi calculado seguindo a regra dos seis décimos assim como no caso do reator.

Tabela 18: Dados de custo de equipamento

Tipo de equipamento	Descrição do equipamento	K_1	K_2	K_3	Potência (kW)	Tamanh mínimo	Tamanho máximo
Bomba	Centrífuga	3,3892	0,00536	0,1538	595,7103	1	300

Fonte: TURTON et al. (2009)

- **Custo na condição base (C_P^0)**

$$C_P^0 = \$ 22192,90$$

Assim como no caso do reator fez-se necessário uma correção devido às condições operacionais, Equações 18, 19 e 22 seguintes:

- $C_{BM} = C_P^0 \times F_{BM}$ (18)

- $F_{BM} = B_1 + F_P \times F_M \times B_2$ (19)

- $\text{Log}_{10} F_P = C_1 + C_2 \times \text{Log}_{10} P + C_3 \times (\text{Log}_{10} P)^2$ (22)

A última equação nos permite calcular o fator de pressão F_P , desde que se tenham os dados necessários e o cuidado de usar a pressão em barg, ($1\text{bar} = 0,0\text{barg}$). Os dados para este cálculo foram retirados de TURTON et al. (2009), da Tabela A.2 do apêndice A, e usando uma pressão de 201 barg, os mesmos são mostrados na Tabela (19) abaixo:

Tabela 19: Dados sobre fator de pressão

Tipo de equipamento	Descrição do equipamento	C_1	C_2	C_3	Pressão (barg)	Tamanh mínimo	Tamanho máximo
Bomba	Centrífuga	-0,3935	0,3957	-0,00226	201	10	100

Fonte: TURTON et al. (2009)

Desta forma, fez-se possível o cálculo do fator de pressão:

$$F_P = 3,205$$

Para calcular o fator de material, é requerido o número de identificação do equipamento, e o valor é 37 (*Pump, centrifugal, cast iron*). Assim, sendo o valor do fator de material encontrado foi $F_M = 1$. Os valores de B_1 e B_2 , são 1,89 e 1,35, respectivamente. De posse de todos os dados necessários, realizou-se então a determinação do custo do módulo como mostrado a seguir:

$$F_{BM} = B_1 + F_P \times F_M \times B_2 = 1,89 + 3,205 \times 1 \times 1,35 = 6,217$$

$$\begin{aligned} C_{BM}(2001) &= C_P^0 \times F_{BM} = \$ 22192,90 \times 6,217 \\ &= \$137973,28 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_{BM}(2017) &= C_{BM}(2001) \times \left(\frac{567,5}{394} \right) \\ &= \$ 198730,55 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Custo_{2017(595,7103)} &= 198730,55 \times \left(\frac{595,7103}{300} \right)^{0,6} \\ &= \$299925,1931 \end{aligned} \quad (21)$$

- Compressor
- Custo na condição base (C_P^0)

Tabela 20: Dados de custo de equipamento (retirados do Apêndice A).

Tipo de equipamento	Descrição do equipamento	K_1	K_2	K_3	Potência (kW)	TamANH mínimo	TamANH máximo
Compressor	Centrífugo, axial, e alternativo	2,2897	1,3604	-0,1027	1025,4237	450	3000

Fonte: TURTON et al. (2009)

O custo na condição base após aplicação dos dados mostrados na Tabela 20 anterior é mostrado na sequência:

$$C_P^0 = \$ 238355,44$$

Faz-se necessário a correção deste valor pelos fatores tanto de pressão assim como de material. O custo resultante desta correção é novamente dependente das equações mostradas como segue:

$$\bullet \quad C_{BM} = C_P^0 \times F_{BM} \quad (18)$$

$$\bullet \quad F_{BM} = B_1 + F_P \times F_M \times B_2 \quad (19)$$

$$\bullet \quad \text{Log}_{10}F_P = C_1 + C_2 \times \text{Log}_{10}P + C_3 \times (\text{Log}_{10}P)^2 \quad (22)$$

Os dados requeridos para a realização destes cálculos são como mostrados na Tabela 21 a seguir:

Tabela 21: Dados sobre fator de pressão

Tipo de equipamento	Descrição do equipamento	C_1	C_2	C_3	Pressão (barg)	TamANH mínimo	TamANH máximo
Compressor	Centrífugo, axial e alternativo	0	0	0	201	-	-

Fonte: TURTON et al. (2009)

Neste caso particular, se substituirmos os dados da Tabela 21 na equação que permite o cálculo do fator de pressão tem-se como resultado $F_p = 1$. De acordo com a referência utilizada para os cálculos de custos, não se encontram disponíveis os valores de B_1 e B_2 que se fazem necessário para a determinação destes resultados. Mas de acordo com o número de identificação do equipamento foi possível a obtenção do valor de $F_{BM} = 5,8$, admitindo stainless steel (aço inoxidável). De posse deste valor realizou-se o cálculo do custo do módulo como mostrado na sequência:

$$C_{BM}(2001) = C_P^0 \times F_{BM} = \$ 238355,44 \times 5,8 = \$ 1381753,95$$

Como já é de pra Che necessita-se agora a correção deste valor pelo índice CEPCI, e essa correção é realizada na sequência:

$$C_{BM}(2017) = C_{BM}(2001) \times \left(\frac{567,5}{394} \right) = \$ 1990216,67$$

$$Custo_{(1025,4237)} = Custo_{(3000)} \times \left(\frac{1025,4237}{3000} \right)^{0,6} = \$1045128,323$$

- **Tanques flash**

De acordo com o processo em questão há uma necessidade de melhorar a fração de ureia no produto final. Para tal são usados dois tanques flash que operam em condições diferentes, para efeito de estimativa de custos. Como o segundo flash opera em condições mais brandas do que o primeiro, admitir-se-á que o volume do segundo é 70% o volume do primeiro, logo as capacidades (volume), serão $12,33m^3$ e $8,63 m^3$, respectivamente. Assim como foi feito nos cálculos anteriores também proceder-se-á de igual modo no caso dos tanques flash.

- **Tanque flash 1**

Tabela 22: Dados de custo de equipamento

Tipo de equipamento	Descrição do equipamento	K_1	K_2	K_3	Volume (m^3)	TamANH mínimo	TamANH máximo
Vasos de processo	Horizontal	3,5565	0,3776	0,0905	12,33	0,1	628

Fonte: TURTON et al. (2009)

- **Custo na condição base (C_P^0)**

$$\text{Log}_{10}C_P^0 = K_1 + K_2 \times \text{Log}_{10}A + K_3 \times (\text{Log}_{10}A)^2 \quad (17)$$

$$C_P^0 = \$ 11916,83$$

Este valor assim como nos demais calculados anteriormente precisa ser corrigido, e esta correção é dada na sequência, mas para tal necessitamos novamente das equações anteriormente vistas, e são mostradas novamente na sequência:

- $C_{BM} = C_P^0 \times F_{BM} \quad (18)$

- $F_{BM} = B_1 + F_P \times F_M \times B_2 \quad (19)$

- $\text{Log}_{10}F_P = C_1 + C_2 \times \text{Log}_{10}P + C_3 \times (\text{Log}_{10}P)^2 \quad (22)$

Como já foi dito anteriormente, a última equação nos permite calcular o fator de pressão, mas esta pressão deve ser expressa em *barg*, no caso em questão, a pressão adotada foi a da entrada do flash ($27 \text{ atm} = 26,36 \text{ barg}$). Assim sendo são mostrados na Tabela 23 abaixo os dados requeridos para o cálculo:

Tabela 23: Dados sobre fator de pressão

Tipo de equipamento	Descrição do equipamento	C_1	C_2	C_3	Pressão (<i>barg</i>)	Tamanho mínimo	Tamanho máximo
Vaso de processo	Horizontal			1	26,36	-	-

Fonte: TURTON et al. (2009)

As Tabelas disponíveis no apêndice A do livro já supracitado não apresenta dados neste caso, assim, recorreu-se ao número indicador do equipamento. O valor do módulo F_{BM} foi igual a 2. De acordo com este valor foi realizada a correção do custo na condição base como segue:

$$C_{BM}(2001) = C_P^0 \times F_{BM} = \$ 11916,83 \times 2 = \$ 23833,66$$

$$C_{BM}(2017) = C_{BM} \times \left(\frac{567,5}{394} \right) = \$ 34328,94$$

- **Tanque flash 2**

Tabela 24: Dados de custo de equipamento

Tipo de equipamento	Descrição do equipamento	K_1	K_2	K_3	Volume (m^3)	TamANH mínimo	TamANH máximo
Vasos de processo	Horizontal	3,5565	0,3776	0,0905	8,63	0,1	628

Fonte: TURTON et al. (2009)

$$C_P^0 = \$ 9943,73$$

$$C_{BM}(2001) = C_P^0 \times F_{BM} = \$ 9943,73 \times 2 = \$ 19887,46$$

$$C_{BM}(2017) = C_{BM} \times \left(\frac{567,5}{394} \right) = \$ 28645,01$$

- **Válvula manual**

O fluxograma representado para este processo mostra a necessidade de duas válvulas para alívio de pressão, para este caso obteve-se uma média dos valores apresentados no (VALVE, 2012), como o valor obtido foi obtido de uma referência publicada em 2012, então será usado um CEPCI de 2012 e corrigido para o CEPCI de 2017 assim como foi feito para os demais equipamentos, o valor obtido antes e após a correção são mostrados a seguir:

$$C_{BM}(2012) = \$ 240,09$$

$$C_{BM}(2017) = C_{BM} \times \left(\frac{567,5}{584,6} \right) = \$ 233,07$$

- **Misturador**

Os custos relacionados ao misturador não serão considerados devido ao fato de que as duas correntes que alimentam o reator não necessitam ser misturadas antes de entrarem para o reator. Um misturador foi utilizado, pois o simulador não fornece uma opção de alimentação direta ao reator.

Na sequência é apresentada a tabela (25) ilustrando um resumo dos custos de capital convertidos em Reais (R\$) e em Kwanza (KZ), sendo este último o símbolo da moeda de Angola.

Tabela 25: Resumo do custo total de capital (CAPEX).

Equipamento	Número de Equipamentos	Preço (USD \$) $C_{BM}(2017)$	Preço (R\$)	Preço (KZ)
Reator	1	98797,2887	381456,7131	30614189,97
Tanque flash (1,2)	2	62973,95	243142,6641	19513657,65
Bomba	1	299925,1931	1158012,329	92937437,48
Compressor	1	1045128,323	4035244,49	323852581,8
Válvula	2	233,07	899,8841699	72221,10394
Total		1507058,0	5818756,757	466990142,3

Fonte: Própria autoria.

De posse dos resultados mostrados na Tabela 25 anterior é possível calcular o custo total do módulo, mas não se deve contabilizar a válvula neste caso, somente os demais equipamentos, tendo em conta esta consideração, o custo total do módulo resultante foi calculado somando os custos de todos os equipamentos envolvidos.

$$C_{TM} = 98797,2887 + 62973,95 + 299925,1931 + 1045128,323 \quad (23)$$

$$C_{TM} = \$1506824,755$$

Dando sequência aos cálculos envolvendo custos, serão agora calculados os custos referentes à aquisição de matéria-prima, gastos com mão de obra entre outros aspectos necessários para a determinação do OPEX, os cálculos são mostrados a seguir:

- **Custo de trabalho operacional**

O custo de trabalho operacional é referente ao número de trabalhadores por turno, e é calculado com base na seguinte expressão:

$$N_{OL} = (6,29 + 31,7 \times P^2 + 0,23 \times N_{np})^{0,5} \quad (24)$$

Para esta determinação, faz-se necessário o valor de N_{np} , e este é calculado de acordo com a Tabela 27 seguinte:

Tabela 26: Dados requeridos para o cálculo do número de operador por turno.

Tipo de equipamento	Número de equipamento	N_{np}
Reator	1	1
Compressor	1	1
Tanque flash	2	2
Bomba	1	0
Válvula	2	0
Total	7	4

Fonte: Própria autoria.

Agora de posse do valor de N_{np} , é possível determinar o número de operadores por turno, esse cálculo é realizado como segue:

$$N_{OL} = (6,29 + 31,7 \times (0)^2 + 0,23 \times (4))^{0,5} = 2,69$$

O tempo de operação admitido para a suposta fábrica no trabalho em questão foi de 345 dias por ano, assim sendo é possível a realização do cálculo do fator de fluxo, este último é calculado de acordo com a relação mostrada a seguir:

$$SF = \frac{\text{número de dias que a fábrica opera por ano}}{365} \quad (25)$$

Para o caso presente, o valor do fator de fluxo (stream factor) é:

$$SF = \frac{345}{365} = 0,945$$

Para os demais cálculos faz-se necessário admitir algumas hipóteses, e estas são as seguintes:

De acordo com o CATHO, (2018), o salário médio mensal de um operador industrial no Brasil é em torno de R\$2.528,26 (USD \$654,82), foi considerado este posto de trabalho somente para questões de cálculo, baseado neste valor foram realizados os cálculos referentes à mão de obra operacional.

Tabela 27: Valores assumidos para efeito de cálculos.

Dia útil para 1 operador	<u>4 turnos</u>
Planta opera	<u>operador × semana</u>
Tempo de operação diária da planta	3turnos/dia
Tempo de operação anual da planta	24/dia
1 ano	8280h/ano
1 ano	48semanas/ano
Operadores necessários por turno	<u>345dias/ano</u>
	<u>2,69 operadores</u> $\cong$ <u>3 operadores</u>
	<u>turno</u> <u>turno</u>
Custo de mão de obra	USD \$ 90.340/ano
Número de turnos por ano	1095turnos/ano
Paradas programadas	3 semanas/ano

Fonte: Própria autoria.

- Cálculos tendo em conta somente um trabalhador.

$$\text{Número de semanas por ano} = \frac{345\text{dias}}{1\text{ano}} \times \frac{1\text{ semana}}{7\text{dias}} = \frac{49,3\text{ semanas}}{\text{ano}} \cong 49$$

$$\begin{aligned} \text{Número de turnos por operador por ano} &= \frac{49\text{semanas}}{\text{ano}} \times \frac{4\text{turnos}}{\text{operador} \times \text{semana}} \\ &= \frac{196\text{turnos}}{\text{operador} \times \text{ano}} \end{aligned}$$

$$1\text{ ano} = 51\text{ semanas} \quad \text{Total de semanas de operação} = 51 - 3 = 49\text{ semanas}$$

$$\text{férias} = 3\text{ semanas}$$

$$\text{turnos de 8 horas por semana}$$

$$\text{Número de turnos por ano} = \frac{365\text{dias}}{1\text{ano}} \times \frac{3\text{ turnos}}{1\text{dia}} = 1095\text{ turnos/ano}$$

Para ter-se noção do número total de operadores necessários na fábrica, é necessário calcular-se o F_{OL} , este cálculo é realizado como segue:

$$F_{OL} = \frac{1095\text{turnos}}{\text{ano}} \times \frac{1\text{operador} \times \text{ano}}{196\text{turnos}} = 5,59\text{ operadores} \quad (27)$$

$$\text{Número total de operadores na fábrica} = 5,59 \times 2,69 = 15 \quad (28)$$

De acordo com todas as informações até este momento obtidas e calculadas, é possível determinar-se o custo total de operação, assim o cálculo é como segue na Equação 29 abaixo:

$$C_{OL} = F_{OL} \times \text{Salário} \quad (29)$$

$$C_{OL} = 15 \times 7857,84 \frac{\text{USD } \$}{\text{ano}} = 117.867,6 \frac{\text{USD } \$}{\text{ano}}$$

- **Custos de utilidades**

O presente processo tem a necessidade da água de resfriamento devido ao fato da reação de formação do carbamato de amônio ser exotérmica e gerar uma quantidade de calor considerável. Além disso, faz necessário o controle da temperatura no reator para não afetar o rendimento da reação, visto que para temperatura e pressão acima de 190°C (463K) e 200 atm respectivamente ocorre uma mudança no comportamento da conversão deste processo. Em relação ainda aos custos de utilidade tem-se a necessidade de energia elétrica e matéria-prima.

Os cálculos necessários para uma avaliação dos custos com utilidades são descritos na sequência:

- **Custos com matéria-prima**

Em relação às matérias-primas utilizadas neste processo tem-se uma necessidade de amônia e dióxido de carbono para uma produção de aproximadamente 500 mil toneladas por ano. Desta forma os cálculos foram realizados tendo em conta dados do FARMFUTURES, (2018) e do INSTITUTE, (2010), sendo a industrial de fertilizante de característica sazonal, o preço da amônia foi adquirido no período em que o valor era mais baixo, e em contra partida o preço de venda da ureia no período em que este é mais alto, como mostrado na Tabela 29 abaixo:

- $\text{Taxa mássica} \left(\frac{\text{kg}}{\text{h}} \right) \text{NH}_3 = 40177,14 \times \frac{24\text{h}}{1\text{dia}} \times \frac{345\text{dias}}{1\text{ano}} \times \frac{1\text{ton}}{1000\text{kg}} = 332666,802 \frac{\text{ton}}{\text{ano}}$
- $\text{taxa mássica} \left(\frac{\text{kg}}{\text{h}} \right) \text{CO}_2 = 53158,68 \times \frac{24\text{h}}{1\text{dia}} \times \frac{345\text{dias}}{1\text{ano}} \times \frac{1\text{ton}}{1000\text{kg}} = 4401153,8704 \frac{\text{ton}}{\text{ano}}$

Tabela 28: Dados de preços da ureia e dióxido de carbono.

<i>Espécie</i>	<i>USD \$/1000kg(2017 – 2018)</i>
CO_2	20
NH_3	172,00

Fonte: (GLOBAL CCS INSTITUTE e FARMFUTURES, 2018-2018).

$$\text{Dióxido de carbono: } C_{RM} = 4401153,8704 \frac{\text{ton}}{\text{ano}} \times \frac{\text{USD } \$20}{1\text{ton}} = 88023077,41 \frac{\text{USD } \$}{\text{ano}}$$

$$\text{Amônia: } C_{RM} = 332666,802 \frac{\text{ton}}{\text{ano}} \times \frac{\text{USD } \$ 172}{\text{ton}} = 57218689,94 \frac{\text{USD } \$}{\text{ano}}$$

- **Custos com eletricidade**

Os custos com eletricidade são aqui calculados tendo-se em conta as potências do equipamento. Os custos para plantas com distribuição elétrica são realizados tendo em conta alguns dados importantes como mostrados na Tabela 29 que segue:

Tabela 29: Dados requeridos para estimar o custo de utilidade com eletricidade.

<i>Substação elétrica</i>	<i>Distribuição elétrica(V)</i>	<i>Custo USD \$ /GJ)</i>	<i>Custo /capacidade(USD $\frac{\\$}{kWh}$)</i>
		16,8	0,06kWh
	110		
	220		
	440		

Fonte: TURTON et al. (2009).

Dos equipamentos disponíveis no processo em questão, tem-se uma bomba cuja potência é de 595,7103 kW e um compressor de potência 1025,4237 kW, assim sendo, a soma da potência de cada um destes equipamentos resulta na potência total que nos permite calcular o consumo ou custo de energia gasto, estes cálculos são então realizados a seguir:

$$\begin{aligned} \text{Consumo de energia} &= 0,06 \times \frac{\text{USD } \$}{\text{kWh}} \times \frac{345 \text{ dias}}{1\text{ano}} \times \frac{(24 \times 1621,134)\text{kWh}}{1\text{dia}} \\ &= 805379,3712 \frac{\text{USD } \$}{\text{ano}} \end{aligned} \quad (30)$$

Para concluir os cálculos voltados a parte de utilidade, resta calcular os custos com a água de resfriamento.

A variação de temperatura escolhida para estes cálculos foi $\Delta T = 10^\circ C$ e o preço retirado da tabela do livro foi $\frac{USD \$14,8}{1000 \times m^3}$.

- **Vazão ou taxa de água**

$$m \times C_p \times \Delta T = 9,5907 \times \frac{10^7 kJ}{h} \quad (31)$$

$$\dot{m} = \frac{9,5907 \times 10^7 kJ/h}{4180 \frac{J}{kg \times K} \times \frac{1 kJ}{1000 J} (40 - 30) K}$$

$$\dot{m} = 2,294 \times 10^6 \frac{kg}{h}$$

- **Custo com água de resfriamento**

Custo água de resfriamento

$$= 2,294 \times 10^6 \times \frac{kg}{h} \times \frac{24 h}{1 dia} \times \frac{345 dias}{1 ano} \times \frac{1 m^3}{1000 kg} \times \frac{USD \$14,8}{1000 m^3} \quad (31)$$

$$\text{Custo água de resfriamento} = 281115,936 \frac{USD \$}{ano}$$

Assim sendo, o custo total com utilidades é calculado somando-se os custos com eletricidade e água de resfriamento, o resultado obtido é apresentado em seguida:

$$\text{Custo total com utilidades (água de resf. e energia)} = \frac{USD \$}{ano} 1086495,307$$

São realizados na sequência avaliações dos custos de operação tendo em conta a depreciação em um caso e não tendo em conta em outro:

- **Custos de operação com depreciação**

$$COM = 1,23 \times (C_{RM} + C_{WT} + C_{UT}) + 2,73 \times C_{OL} + 0,280 \times FCI \quad (32)$$

Neste cálculo não será levado em conta à questão do tratamento de resíduos, representado por C_{WT} . Em alguns casos os custos com matéria-prima é feito a parte, e é representado por C_{RM} , neste trabalho, estes custos já foram contabilizados dentro do primeiro termo do segundo membro da Equação 32, e os custos com equipamentos, custos fixos são representados por FCI .

$$COM = 0,280 \times 1507058 + 2,73 \times 117867,6 + 1,23 \times (145241767,4 + 1086495,307)$$

$$COM = \frac{USD \$}{ano} 180727517,9$$

- Custos sem depreciação

$$COM_d = 1,23 \times (C_{RM} + C_{WT} + C_{UT}) + 2,73 \times C_{OL} + 0,180 \times FCI \quad (33)$$

$$COM_d = 0,180 \times 1507058 + 2,73 \times 117867,6 + 1,23 \times (145241767,4 + 1086495,307)$$

$$COM_d = USD \$ 180576812,1$$

Após a realização de todos os cálculos, resta saber até que ponto o processo ou investimento em questão apresenta viabilidade, conhecer em que ponto as receitas empatam os custos, ou então o também conhecido (*Break Even*), ponto este em que os investimentos feitos passam a estar totalmente liquidados, todos os cálculos referentes a estas informações são realizados na sequência:

Após terem sido obtidos os resultados relacionados aos custos, fez-se necessário o cálculo da margem bruta do processo para conhecer a viabilidade do investimento, este cálculo da margem bruta é ilustrado de acordo com a Equação 34 na sequência:

$$Margem\ bruta = Receita - (custos\ com\ matéria - prima) \quad (34)$$

$$Margem\ bruta = 92695400 - 145241767,4 = \$ (-52546367,4)$$

Com base neste resultado da margem bruta pode-se afirmar que o investimento não seria lucrativo visto que os custos superam a receita. Para um cenário como este, o melhor seria não realizar o investimento ou então a empresa teria que reavaliar algumas variáveis dentro do investimento, tais como valor de venda do produto, valor de compra das matérias-primas, estas seriam algumas atitudes a serem tomadas frente a um cenário como este.

Vamos agora avaliar um cenário em que seria favorável um investimento desta natureza, onde os custos com matéria prima são menores e o valor de venda do produto final manteve-se o mesmo, e com uma taxa de produção que também favoreça o investimento.

Na sequência serão calculados os pontos de equilíbrio tanto para a situação de margem bruta negativa como para a situação de margem bruta positiva. De acordo com o resultado da margem bruta, foi possível verificar que o investimento apresenta viabilidade. Com base no

UREA FULL REPORT, o ponto de equilíbrio ou **Break Even**, é calculado de acordo com a Equação 35 que segue:

$$\text{Ponto de equilíbrio(Break Even)} = \frac{\text{Custos fixos}}{\text{margem de contribuição}} \quad (35)$$

- Custos variáveis

$$VC = (\text{Custos de matéria – prima}) + (\text{Custos operacionais}) + (\text{Custos de utilidade}) \quad (36)$$

$$VC = 145241767,4 + 117867,6 + 1086495,307$$

$$VC = \text{USD } \$ 146446130,3$$

$$\text{Margem de contribuição} = \text{Receitas} - \text{Custos variáveis} \quad (37)$$

$$\text{Margem de contribuição} = 92695400 - 146446130,3 = \$ (-53750730,3)$$

$$\text{Ponto de equilíbrio} = \left(\frac{2323678,87}{-53750730,3} \right) = -0,043 \quad (35)$$

Como já foi dito anteriormente, em uma situação como essa a empresa terá um valor presente líquido VPL negativo e uma taxa interna de retorno (TIR) menor do que a taxa mínima de atratividade, mostrando que o investimento não é viável para este estudo em questão nas condições aplicadas.

Em um cenário mais otimista, onde os preços das matérias-primas e a quantidade efetiva de uréia produzida são como dados nas Tabelas 30 e 31, o resultado do valor presente líquido é positivo e a taxa interna de retorno maior que a taxa mínima de atratividade, pode-se dizer que neste caso o investimento é viável. Embora seja necessário ressaltar que o valor tanto da taxa interna de retorno como do VPL acabam estando superestimado devido à característica da estimativa realizada (classe 5).

Tabela 30: Dados de preço das matérias-primas.

<i>Espécie</i>	<i>USD \$/1000kg(2017 – 2018)</i>
<i>CO₂</i>	15
<i>NH₃</i>	50

Fonte: (AMMONIA US PRICE MARKET & ANALYSIS)

Tabela 31: Dados de preço de venda da ureia pot tonelada, capacidade produtiva da planta e receita.

Produto	Capacidade de produção (ton/ano)	Preço de venda (USD \$/ton)	Receita (USD $\frac{\\$}{ano}$)
Uréia	292×10^3	317,45	92695400

Fonte: Própria autoria.

Os resultados obtidos considerando este cenário otimista são descritos na sequência:

$$VC = (Custos\ de\ matéria - prima) + (Custos\ operacionais) + (Custos\ de\ utilidade) \quad (36)$$

$$VC = 82650648,15 + 117867,6 + 1086495,307$$

$$VC = USD\ \$\ 83855011,06$$

$$Margem\ de\ contribuição = Receitas - Custos\ variáveis \quad (37)$$

$$Margem\ de\ contribuição = 92695400 - 83855011,06 = \$\ 8840388,943$$

$$Ponto\ de\ equilíbrio = \left(\frac{2323678,87}{8840388,943} \right) = 0,263 \quad (35)$$

Do mesmo modo que existe um tempo definido para pagar o investimento realizado, existe um tempo médio de vida das plantas, projetos desta natureza normalmente costumam ser feito para um tempo de vida útil maior que 20 anos, para este projeto, será adotado um tempo de vida para a planta de 15 anos.

- **Valor de resgate de uma planta**

É de fundamental importância ter-se conhecimento do valor que um determinado projeto pode vir a custar depois do seu tempo de vida útil, mesmo porque isso inclui o fato de que ao longo do tempo o projeto vai depreciando, a isto se dá o nome de **valor de resgate**, e segundo TURTON et al.(2009), este valor é calculado de acordo com a seguinte Equação 38:

$$S = FCI_L - D \quad (38)$$

$$S = 1507058 - (0,08 \times 1507058) = \$ 1386493,36$$

Em resumo são apresentados os fluxos de caixa de acordo com as Tabelas 32, 33, e 34 tanto para um cenário pessimista com break even negativo assim como para um cenário positivo com break even positivo.

Tabela 32: Cálculo da margem bruta e do break even considerando um cenário otimista ureia (USD \$317,45/ton e matéria-prima mais barata)

		Fluxo de Caixa TCC			
Salário\$/ano	Núm Funcionario	Matéria-prima CO2 \$/ton	Quantidade CO2 (ton/ano)	Matéria-prima NH3 \$/ano	Quantidade NH3 (ton/ano)
\$ 7.857,84	15	\$ 15,00	4401153,87	\$ 50,00	332666,802
Custo com funcionarios		Custo materia-prima		Custo materia-prima	
\$ 117.867,60		\$ 66.017.308,05		\$ 16.633.340,10	
Custo fixo com equipamento (\$)		Custo com energia(\$/ano)	Custo com água de refria (\$/ano)	Custo total com utilidade (\$/ano)	Custo de operação com depreciação (\$/ano)
\$ 1.507.058,00	\$ 805.379,37	\$ 281.115,94	\$ 1.086.495,31	\$ 103.740.441,24	
Custo de operação sem depreciação (\$/ano)		Produção (ton/ano)	Valor de venda do produto (\$/ton)	Receita (\$/ano)	Margem bruta (\$/ano)
\$ 103.589.735,44	292.000	\$ 317,45	\$ 92.695.400,00	\$ 10.044.751,85	
Break Even (\$/ano)		Custo variável (\$/ano)	Contribuição (\$/ano)	Custo de terreno (\$)	
\$ 0,17	\$ 83.855.011,06	\$ 8.840.388,94	\$ 518.000,00		
Investimento total (\$)		Custo operacional total(\$/ano)			
\$ 2.025.058,00	\$ 83.855.011,06				

Fonte: Propria autoria.

Tabela 33: Fluxo de caixa considerando um cenário otimista ureia (USD \$317,45/ton)

Ano	Projeto Ureia	Receita Projeto Ureia	Custo Operacional	Valor líquido
0	\$ -2.025.058,00	\$ -	\$ -	\$ -2.025.058,00
1	\$ -	\$ 92.695.400,00	\$ -83.855.011,06	\$ 8.840.388,94
2	\$ -	\$ 92.695.400,00	\$ -83.855.011,06	\$ 8.840.388,94
3	\$ -	\$ 92.695.400,00	\$ -83.855.011,06	\$ 8.840.388,94
4	\$ -	\$ 92.695.400,00	\$ -83.855.011,06	\$ 8.840.388,94
5	\$ -	\$ 92.695.400,00	\$ -83.855.011,06	\$ 8.840.388,94
6	\$ -	\$ 92.695.400,00	\$ -83.855.011,06	\$ 8.840.388,94
7	\$ -	\$ 92.695.400,00	\$ -83.855.011,06	\$ 8.840.388,94
8	\$ -	\$ 92.695.400,00	\$ -83.855.011,06	\$ 8.840.388,94
9	\$ -	\$ 92.695.400,00	\$ -83.855.011,06	\$ 8.840.388,94
10	\$ -	\$ 92.695.400,00	\$ -83.855.011,06	\$ 8.840.388,94
11	\$ -	\$ 92.695.400,00	\$ -83.855.011,06	\$ 8.840.388,94
12	\$ -	\$ 92.695.400,00	\$ -83.855.011,06	\$ 8.840.388,94
13	\$ -	\$ 92.695.400,00	\$ -83.855.011,06	\$ 8.840.388,94
14	\$ -	\$ 92.695.400,00	\$ -83.855.011,06	\$ 8.840.388,94
15	\$ -	\$ 92.695.400,00	\$ -83.855.011,06	\$ 8.840.388,94
i	25%			
TIR	437%			
VPL	\$ 32.092.323,62			

Fonte: Propria autora.

Tabela 34: Cálculo da margem bruta e do break even considerando um cenário pessimista ureia (USD \$317,45/ton e matéria-prima mais cara)

Fluxo de Caixa TCC					
salário\$/ano	Núm. Funcionários	matéria-prima CO2 \$/ton	quantidade CO2 (ton/ano)	matéria-prima NH3 \$/ano	quantidade NH3 (ton/ano)
\$ 7.857,84	15	\$ 20,00	4.401.153,87	\$ 172,00	332666,802
Custo com funcionários		Custo materia-prima		Custo materia-prima	
\$ 117.867,60		\$ 88.023.077,41		\$ 57.218.689,94	
Custo fixo com equipam (\$)		Custo com energia(\$/ano)	Custo com água de refria (\$/ano)	Custo total com utilidade (\$/ano)	Custo de operação com depreciação (\$/ano)
\$ 1.507.058,00	\$ 805.379,37	\$ 281.115,94	\$ 1.086.495,31	\$ 180.727.517,86	
Custo de operação sem depreciação (\$/ano)		Produção (ton/ano)	Valor de venda do produto (\$/ton)	Receita (\$/ano)	Margem bruta (\$/ano)
\$ 180.576.812,06	292.000	\$ 317,00	\$ 92.564.000,00	\$ -52.677.767,35	
Break Even (\$/ano)		Custo variável (\$/ano)	Contribuição (\$/ano)	Custo de terreno (\$)	
\$ -0,03	\$ 146.446.130,26	\$ -53.882.130,26	\$ 518.000,00		
Investimento total (\$)		Custo operacional total(\$/ano)			
\$ 2.025.058,00	\$ 146.446.130,26				

Fonte: Propria autora.

5 CONCLUSÕES

- 1- Durante a elaboração do presente trabalho, constatou-se grandes dificuldades na obtenção das propriedades termodinâmicas do biureto e do carbamato de amônio, no caso do carbamato de amônio devido à presença do íon amônio na sua estrutura, o que dificultou a determinação de suas propriedades termodinâmicas, diferente do biureto que pelos métodos de contribuição de grupos era possível a determinação de algumas de suas propriedades.
- 2- De acordo com os resultados obtidos no capítulo 4 em relação ao processo de estimativa de classe 5, para um cenário em que a ureia é comercializada a \$317,45/ton e as matérias-primas comercializadas em época cujos seus preços estão em torno de \$20 a \$25 a tonelada de dióxido de carbono e \$172 a tonelada de amônia, os estudos mostraram que não compensa o investimento, visto que a margem bruta será negativa assim como o valor presente líquido (VPL), e a taxa interna de retorno será inferior a taxa mínima de atratividade considerando-se assim um cenário pessimista, assim sendo este trabalho prevê um fracasso caso algum investimento seja realizado nestas condições.
- 3- Ainda de acordo com as estimativas de classe 5, mas agora para um cenário otimista onde a uréia é comercializada no mesmo valor que no cenário citado anteriormente, mas com as matérias-primas sendo comercializadas em época cujo valor de dióxido de carbono é \$15/ton e a amônia é \$50/ton, o investimento é viável, apresentando um valor líquido positivo, margem bruta positiva, break even positivo e taxa interna de retorno também positiva. Embora para este caso deve-se realçar que os valores tanto do VPL como da TIR, foram muito altos justificando o tipo de estimativa não detalhada, logo requer-se mais análises ou a avaliação de mais variáveis não consideradas neste estudo. Ainda assim o presente trabalho mostrou que para esta situação o investimento será lucrativo.
- 4- Em suma o presente trabalho conseguiu reunir informações relevantes tanto em relação as propriedades termodinâmicas do carbamato de amônio e do biureto como em relação a viabilidade econômica da uréia, podendo-se com as mesmas realizar o uso do simulador e tomar decisões em relação a um possível investimento neste setor, mesmo considerando-se a estimativa de classe 5, portanto, estas passam a ser as contribuições alcançadas com o trabalho em questão.

6 RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Diante de todas as dificuldades enfrentadas na elaboração do presente trabalho, tais como a aquisição das propriedades termodinâmicas necessárias para alimentar o simulador CHEMCAD usado no presente trabalho, recomenda-se para trabalhos futuros estudos que possam capacitar melhor os futuros usuários de forma que com a ajuda deste simulador seja possível uma descrição e representação melhor do Once-Through Urea Process.

Deve-se realçar também a necessidade de estudos mais profundos no uso do simulador CHEMCAD para a determinação da conversão de equilíbrio, e assim, fazer-se possível estimativa de conversões mais próximas ao equilíbrio com base nos resultados apresentados pelo próprio simulador.

Ainda com base no processo em questão, constatarem-se algumas dificuldades na aquisição de informações precisas relacionadas ao equilíbrio presente na etapa de formação do carbamato de amônio, portanto faz-se necessário um entendimento mais profundo sobre este processo também.

Durante o período de elaboração deste trabalho foi possível verificar dificuldades no processo de obtenção de certas propriedades termodinâmicas principalmente do carbamato de amônio devido a presença do íon amônio na sua estrutura, para que tais dificuldades fossem ultrapassadas realizou a determinação de algumas destas propriedades usando o método dos mínimos quadrados, que acarreta consigo alguns erros, sendo assim requer-se algumas revisões nos métodos de determinação usados para que se possa alcançar melhores resultados em relação a estas propriedades.

Quanto ao processo de produção da ureia, existem inúmeras variantes hoje utilizadas para a produção deste fertilizante, desde o Once-Through Urea Process o mais simples até a processos como o Toyo's Urea Process, processos bem mais completos e sofisticados, então para estudos futuros existe a possibilidade de melhorar o presente trabalho realizando aperfeiçoamentos como integração energética para a obtenção de resultados melhores no momento dos custos de estimativas, existe a possibilidade de melhorar este trabalho adicionando variáveis como o controle do processo entre outras.

REFERÊNCIAS

AGRIPOINT. **Fertilidade do solo e nutrientes:** conheça a importância de cada um. 2012. Disponível em: <<https://www.cafepoint.com.br/mypoint/mp180325/fertilidade-do-solo-e-nutrientes-conheca-a-importancia-de-cada-um-204125n.aspx>>. Acesso em: 20 ago. 2018.

BANK. **Systematic Errors of the Joback Method (Normal Boiling Point.** 2008. Disponível em: <https://en.wikipedia.org/wiki/Joback_method#/media/File:JobackNormalBoilingPointSystematicError.png>. Acesso em: 13 out. 2018.

BHASKAR, K.; DAS, C. P. **MANUFACTURE OF UREA.** 2007. Disponível em: <http://ethesis.nitrkl.ac.in/4237/1/Manufacture_of_Urea.pdf>. Acesso em: 13 out. 2018

BRFÉRTIL et al. **A IMPORTÂNCIA DOS FERTILIZANTES NA PRODUÇÃO DE ALIMENTOS.** 2016. Disponível em: <<http://brfertil.com.br/importancia-dos-fertilizantes-na-producao-de-alimentos/>>. Acesso em: 10 ago. 2018.

CANABRAVA, G. R. A et al. **PROCESSO DE SÍNTESE INDUSTRIAL DA UREIA.** 2013. Disponível em: <<https://pt.slideshare.net/VictorSaid/processo-de-sntese-industrial-de-ureia-uma-revisao-de-literatura>>. Acesso em: 5 set. 2018.

CATHO. **Salário de Operador Industrial.** Disponível em: <<https://www.catho.com.br/carreira-sucesso/salarios/salario-de-operador-industrial/>>. Acesso em: 12 dez. 2018.

CHAUHAN, Mukesh M. et al. **UREA PROJECT REPORT.** 2014-2016. Disponível em: <<https://pt.scribd.com/doc/97197124/Urea-Project-Report>>. Acesso em: 10 nov. 2018.

DAVEY, W.; WURZEI, T.; AG, L. **Method for the production of urea from natural gás.** Frankfurt.[s.n.], 2010. Em caso de não existir local nem editora [s.l: s.n],

DIAS, P. V.; FERNANDES, E. **FERTILIZANTES: UMA VISÃO GLOBAL E SINTÉTICA.** 2006. Disponível em: <<http://brfertil.com.br/importancia-dos-fertilizantes-na-producao-de-alimentos/>>. Acesso em: 20 set. 2018.

DICTIONARY, Chemicool. **REATIVIDADE QUÍMICA.** Disponível em: <<https://www.chemicool.com/definition/skew.html>>. Acesso em: 20 ago. 2018.

EHOW. **O QUE É O FERTILIZANTE DE UREIA.** 2017. Disponível em: <https://www.ehow.com.br/fertilizante-ureia-sobre_14858/>. Acesso em: 19 ago. 2018.

FARMFUTURES. **Fertilizer Outlook:** Fertilizer prices swing both ways. 2018. Disponível em: <<https://www.farmfutures.com/story-weekly-fertilizer-review-0-30765>>. Acesso em: 16 nov. 2018.

GREENPEACE. **Ammonia and urea production:** Incidents of ammonia release from the Profertil urea and ammonia facility, Bahia Blanca, Argentina 2000. Disponível em:

<<http://www.greenpeace.to/publications/profertil%20report.pdf>>. Acesso em: 5 set. 2018.

GROUP, Relx. **KNOVEL**. 2018. Disponível em:

<https://app.knovel.com/web/search.v?q=ammonium%20carbonate&search_type=tech-reference&rows=10&offset=0&group_by=true&my_subscription=false&sort_on=default&content_type=all_references&islengthIncreased=false&include_synonyms=yes>. Acesso em: 5 nov. 2018.

ICIS. **Ammonia US prices, markets & analysis**. 2018. Disponível em:

<<https://www.icis.com/explore/commodities/chemicals/ammonia/us/>>. Acesso em: 13 dez. 2018.

INSTITUTE, Global Ccs. **The CO2 market**. 2010. Disponível em:

<<https://hub.globalccsinstitute.com/publications/accelerating-uptake-ccs-industrial-use-captured-carbon-dioxide/2-co2-market>>. Acesso em: 16 nov. 2018.

MAGALHÃES, J. R.; SILVA, F. L. I. M. **APLICAÇÕES DE FERTILIZANTES**. 1991.

Disponível em: <<http://brfertil.com.br/importancia-dos-fertilizantes-na-producao-de-alimentos/>>. Acesso em: 20 ago. 2018.

MARKET LITMUS (Estados Unidos da América). **Industry Analysis, Forecasts and Opportunity Assessment (2017-2022)**. 2018. Disponível em:

<<https://www.statista.com/statistics/439006/total-demand-for-potash-fertilizer-worldwide-prediction/>>. Acesso em: 18 ago. 2018.

MOHAMMED, S. R. et al. **Manufacture Of Urea**. 2015. Disponível em:

<<https://pt.scribd.com/doc/274314676/Snamprogetti-Urea-Process.>>. Acesso em: 5 set. 2018.

PETROBRAS. **UREIA**. 2014. Disponível em: <<http://www.br.com.br/pc/produtos-e-servicos/para-agronegocio/ureia>>. Acesso em: 22 ago. 2018.

PROVIPEC. **DESENVOLVIMENTO DOS SOLOS**. 2012. Disponível em:

<<http://www.provipec.com/adubos.htm>>. Acesso em: 11 ago. 2018.

REDEOMNIA. **QUÍMICA ORGÂNICA**. 2018. Disponível em:

<<https://www.manualdaquimica.com/quimica-organica/>>. Acesso em: 15 set. 2018.

REID, C. Robert; PRAUSNITZ, M. John.; POLING, E. Bruce. **The properties of gases and liquids**. 4ª edição. Estados Unidos da América. McGraw-Hill Book Company, 1987.

SASIL. **FICHA DE INFORMAÇÃO DE SEGURANÇA DE PRODUTO QUÍMICO - FISPQ** **Ammonia US prices, markets & analysis**. 2008. Disponível em:

<<http://www.sasil.com.br/br/hp/upload/FISPQ-UreiaPecuaria.pdf>>. Acesso em: 05 out. 2018.

SCIENCEDIRECT. **Calcium Cyanamide**. 2001. Disponível em:
<<https://www.sciencedirect.com/topics/chemistry/calcium-cyanamide>>. Acesso em: 13 set. 2018.

SISTEMA RADICULAR. Disponível em:
<http://www.agencia.cnptia.embrapa.br/Repositorio/irrig2_000gkimii1s02wx5ok0wj9yquezej105.jpg>. Acesso Agosto de 2018.

THE STATISTICS PORTAL (Estados Unidos da América). **Forecasted total potash fertilizer demand worldwide from 2014 to 2022 (in million metric tons)**. 2018. Disponível em: <<https://www.statista.com/statistics/439006/total-demand-for-potash-fertilizer-worldwide-prediction/>>. Acesso em: 18 ago. 2018.

TURTON, Richard.; BAILIE, C. Richard; WHITING, B. Wallace.; SHAEIWITZ, A. Joseph. **Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Process**. 3. ed. local. Upper Sanddle River: Prentice Hall. 2009.

UNITED NATIONS INDUSTRIAL DEVELOPMENT ORGANIZATION (UNIDO). **Fertilizer manual**: This manual is a successor to and in part a revisiono f the IFDC/UNIDO fertilizer manual published in December 1979. 3.ed. Netherlands: Kluwer Academic Publishers, 1998.

VALVE, Kennedy. **AWWA PRODUCTS**. 2012. Disponível em:
<<http://www.kennedyvalve.com/upl/downloads/library/entire-2012-awwa-price-book.pdf>>. Acesso em: 15 nov. 2018.

APÊNDICE A

Equações utilizadas no método de Joback e Reid para o cálculo de propriedades físicas por contribuição de grupos.

$T_b = 198 + \sum T_{b,i}$	(A.1)
----------------------------	-------

$T_c = T_b \left[0,584 + 0,965 * \sum T_{c,i} - \left(\sum T_{c,i} \right)^2 \right]^{-1}$	(A.2)
--	-------

$P_c = \left(0,113 + 0,0032 * N_A - \sum P_{c,i} \right)^{-2}$	(A.3)
---	-------

$T_m = 122,5 + \sum T_{m,i}$	(A.4)
------------------------------	-------

$V_c = 17,5 + \sum V_{c,i}$	(A.5)
-----------------------------	-------

$H_{\text{formação}} = 68,29 + \sum H_{\text{form},i}$	(A.6)
--	-------

$G_{\text{formação}} = 53,88 + \sum G_{\text{form},i}$	(A.7)
--	-------

$C_P = \sum a_i - 37,93 + \left[\sum b_i + 0,210 \right] \times T + \left[\sum c_i - 3,91 \times 10^{-4} \right] \times T^2 + \left[\sum d_i + 2,06 \times 10^{-7} \right] \times T^3$	(A.8)
---	-------

$\Delta H_{vap} = 15,30 + \sum H_{vap,i}$	(A.9)
---	-------

$\Delta H_{fus} = -0,88 + \sum \Delta H_{fus,i}$	(A.10)
--	--------

$$\begin{aligned}
lnk_{aT} = & \frac{\Delta H^0_{T_0}}{R} \times \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) + \Delta \alpha_0 \times \ln \left(\frac{T}{T_0} \right) + \frac{\Delta \alpha_1}{2} \times (T - T_0) + \frac{\Delta \alpha_2}{6} \times (T^2 - T_0^2) + \frac{\Delta \alpha_3}{12} \\
& \times (T^3 - T_0^3) + \frac{\Delta \alpha_4}{20} \times (T^4 - T_0^4) + \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \\
& \times \left(\Delta \alpha_0 \times T_0 + \frac{\Delta \alpha_1}{2} \times T_0^2 + \frac{\Delta \alpha_2}{3} \times T_0^3 + \frac{\Delta \alpha_3}{4} \times T_0^4 + \frac{\Delta \alpha_4}{5} \times T_0^5 \right) \\
& - \frac{\Delta G^0}{R \times T}
\end{aligned}
\tag{A.11}$$

$lnk_T - lnk_{T_0} = \frac{1}{R} \times \int_{T_0}^T \frac{\Delta H^0}{T^2} dT$	(A.12)
---	--------

$\Delta G^0 = -RT \ln(k_{0T_0})$	(A.13)
----------------------------------	--------

$\Delta H^0 = (sH_s^0 + tH_t^0 + \dots) - (bH_b^0 + cH_c^0 + \dots)$	(A.14)
--	--------

$\Delta \alpha_0 = s \alpha_0 + t \alpha_0 + \dots - b \alpha_0 - c \alpha_0 - \dots$	(A.15)
---	--------

$\frac{\Delta C_p}{R} = \Delta \alpha_0 + \Delta \alpha_1 T + \Delta \alpha_2 T^2 + \Delta \alpha_3 T^3 + \Delta \alpha_4 T^4$	(A.16)
--	--------

APÊNDICE B

Dados retirados do livro *the properties of gas and liquid* e da base de dados do *KNOVEL*.

Tabela (B.1): Propriedades de contribuição de grupo de Joback para gás ideal

Grupo	$\Delta H (\frac{kJ}{mol})$	$\Delta G (\frac{kJ}{mol})$
$-NH_2$	-133,22	-120,50
$> NH$	-22,02	14,07
$> C = O$	53,47	89,39

Fonte: The properties of gas and liquids

Tabela (B.2): Dados de método de contribuição de grupo

Grupo	$T_b(K)$	$T_c(K)$	$T_m(K)$	$P_c(bar)$	$V_c(\frac{cm^3}{mol})$	$H_{form}(\frac{kJ}{mol})$	$G_{form}(\frac{kJ}{mol})$	$H_{vap}(\frac{kJ}{mol})$
$-NH_2$	73,23	0,0243	66,89	0,0109	38	-22,02	14,07	10,788
$> NH$	50,17	0,0295	52,66	0,0077	35	53,47	89,39	6,436
$> C = O$	76,75	0,0380	61,20	0,0031	62	-133,22	-120,50	8,972
Capacidade calorífica (J/molK)								
	A	B	C	D				
$-NH_2$	2,69E+01	-4,12E-02	1,64E-04	-9,76E-08				
$> NH$	-1,21	7,62E-02	-4,86-05	1,05E-08				
$> C = O$	6,45	6,70E-02	-3,57E-055	2,86E-09				

Fonte: https://en.wikipedia.org/wiki/Joback_method. Acesso em 16 de Novembro de 2018.

Tabela (B.3): Dados de algumas propriedades físicas das espécies envolvidas no processo de produção da ureia.

			$C_p(\frac{J}{molK})$				
Espécies	$G^0_f(\frac{kJ}{mol})$	$H^0_f(\frac{kJ}{mol})$	A	B	C	D	E
NH_3	-16,6	-46,2	33,573	-1,26E-02	8,89E-05	- 7,18E-08	1,86E-11
CO_2	-394,4	-393,5	27,437	4,23E-02	-1,96E-05	3,99E-09	- 2,99E-13
H_2O	-237	-286	92,053	-0,04	- 0,000211	5,35E-07	0
NH_2COONH_4	-448,06	-645,05	57,394	8,05E-02	2,43E-04	- 2,76E-07	8,18E-11
$NH_2CONHCONH_2$	-69,59	-561,6	27,56	0,3378	-1,83E-04	2,70E-08	0
NH_2CONH_2	-197,15	-333,6	35,193	0,07963	0,00047	- 1,21E-06	1,26E-09

Fonte: Chemical properties handbook (1999).

Dados alimentados ao simulador CHEMCAD obtidos a partir do método de determinação de parâmetros usando a ferramenta Excel.

Figura C.1: Dados de equilíbrio do simulador CHEMCAD.

Equilibrium Data

Reaction Number: 1

Keq=exp(A+B/T+C*Ln(T)+D*T+E*T*T)

Base component: 3 Carbon Dioxide

A Factor: -58.5759

B Factor: 13965.9

C Factor:

D Factor:

E Factor:

Heat of reaction:

Approach delta T:

Frac. approach:

Frac. conversion: 0.85

Specified heat of rxn is: Liquid state

Component	Stoichiometric coefficient	Exponential factor
3 Carbon Dioxide	-1	
1 Ammonia	-2	
5 Ammonium Carbam	1	
<None>		
<None>		
<None>		
<None>		
<None>		
<None>		
<None>		

☒ Edit next reaction
☐ Edit specified rxn
☐ Exit reactions

Help
 Rxn #
 Cancel
 OK

Fonte: Simulador *CHEMCAD*.

Figura C.2: Dados de propriedades crítica alimentados ao simulador *CHEMCAD*.

Ammonium Carbam

Component ID:

Molecular weight: 78.07

Critical T: 539.82 K

Critical P: 44.51 bar

Critical V: 0.3025 m³/kmol

Acentric factor: 0.12

Normal boiling point: 333 K

Melting point: K

Heat of Fusion: J/kmol

Enter either ideal gas or solid data

	Ideal Gas		Solid	
Heat of formation		J/kmol	-6.45053e+008	J/kmol
Gibbs of formation		J/kmol	-4.48062e+008	J/kmol

Solubility parameter: 15627.1 (J/m³)^{0.5}

Dipole moment: C.m

Help Cancel OK

Fonte: Simulador *CHEMCAD*.

Figura C.3: Dados de capacidade calorífica alimentados ao simulador *CHEMCAD*.

Ammonium Carbam

Ideal Gas Heat Capacity (J/kmol-K)

Equation No. 100

Low T (K): 150 Low value: 74050.3

High T (K): 1500 High value: 207545

Coefficients: A: 57394 B: 80.5409 C: 0.242885 D: -0.000275919 E: 8.17923e-008

Liquid Heat Capacity (J/kmol-K)

Equation No.

Low T (K): Low value: High value:

Coefficients: A: B: C: D: E:

Solid Heat Capacity (J/kmol-K)

Equation No.

Low T (K): 290 Low value: High value:

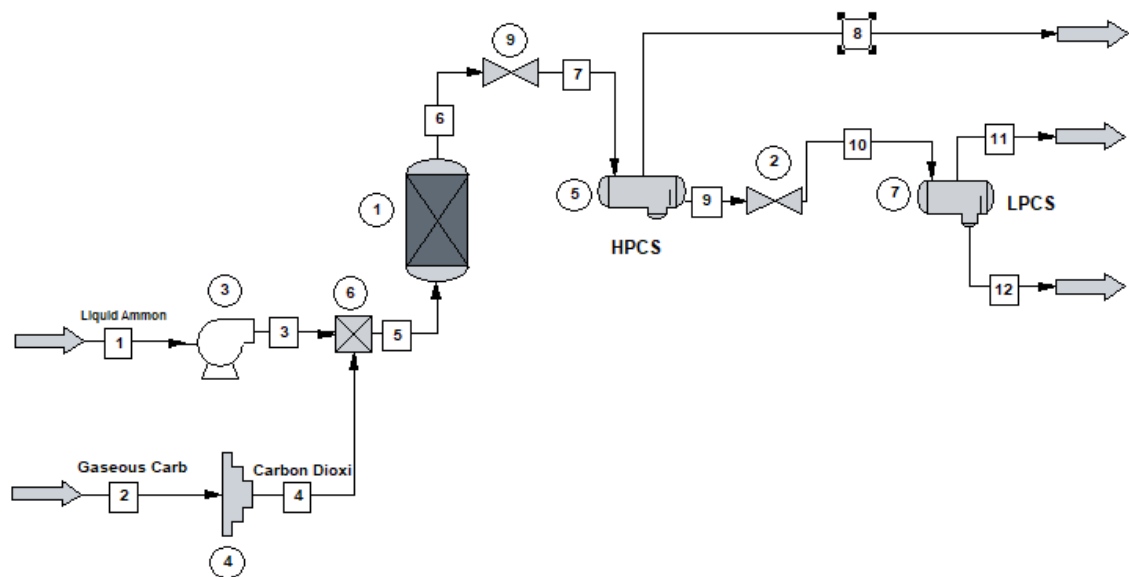
High T (K): 304 High value:

Coefficients: A: 120570 B: C: D: E:

Help Cancel OK

Fonte: Simulador *CHEMCAD*.

Figura C.4: Esquema do processo de produção da ureia simulado no CHEMCAD.



Fonte: Simulador *CHEMCAD*.

Figura C. 5: Correntes de alimentação de CO_2 e NH_3 na entrada do simulador.

Flash		Cancel	OK
Stream No.	2		
Stream Name	Gaseous Carb		
Temp K	298		
Pres atm	63.51285		
Vapor Fraction	1		
Enthalpy kJ/h	-4.809235e+008		
Total flow	53158.68		
Total flow unit	kg/h		
Comp unit	kg/h		
NH3	0		
Carbon Dioxide	53158.68		
Urea	0		
Water	0		
Ammonium Carbam	0		
Biureto	0		

Flash		Cancel	OK
Stream No.	1		
Stream Name	LPCS		
Temp K	298		
Pres atm	9.884797		
Vapor Fraction	0		
Enthalpy kJ/h	-1.586467e+008		
Total flow	40177.14		
Total flow unit	kg/h		
Comp unit	kg/h		
NH3	40177.14		
Carbon Dioxide	0		
Urea	0		
Water	0		
Ammonium Carbam	0		
Biureto	0		

Fonte: Simulador *CHEMCAD*.

Figura C.6: Correntes de saída superior e inferior do segundo flash do simulador

Flash		Cancel	OK
Stream No.	11		
Stream Name			
Temp K	329.307		
Pres atm	1.2		
Vapor Fraction	1		
Enthalpy kJ/h	-9.127378e+007		
Total flow	14297.57		
Total flow unit	kg/h		
Comp unit	kg/h		
NH3	3417.637		
Carbon Dioxide	675.2761		
Urea	5132.533		
Water	1213.691		
Ammonium Carbam	3857.289		
Biureto	1.146039		

Flash		Cancel	OK
Stream No.	12		
Stream Name			
Temp K	329.307		
Pres atm	1.2		
Vapor Fraction	0		
Enthalpy kJ/h	-4.427489e+008		
Total flow	53654.31		
Total flow unit	kg/h		
Comp unit	kg/h		
NH3	8.728702		
Carbon Dioxide	21.65094		
Urea	35149.79		
Water	10145.52		
Ammonium Carbam	7898.847		
Biureto	429.7653		

Fonte: Simulador *CHEMCAD*.