

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ
DEPARTAMENTO ACADÊMICO DE ENGENHARIA QUÍMICA
ENGENHARIA QUÍMICA

GABRIELLY MYLENA BENEDETTI TONIAL

**INTEGRAÇÃO ENERGÉTICA EM UMA REDE DE TROCADORES DE
CALOR DE UMA PLANTA DE PRODUÇÃO DE ACETONA**

FRANCISCO BELTRÃO
2018

GABRIELLY MYLENA BENEDETTI TONIAL

INTEGRAÇÃO ENERGÉTICA EM UMA REDE DE TROCADORES DE CALOR DE UMA PLANTA DE PRODUÇÃO DE ACETONA

Trabalho de Conclusão de Curso de graduação, apresentado à disciplina de Trabalho de Conclusão de Curso 2, do Curso de Engenharia Química do Departamento Acadêmico de Engenharia Química – DAENQ – da Universidade Tecnológica Federal do Paraná, como requisito parcial para obtenção do título de bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. André Zuber

TERMO DE APROVAÇÃO

Integração energética em uma rede de trocadores de calor de uma planta de produção de acetona

Gabrielly Mylena Benedetti Tonial

Trabalho de Conclusão de Curso

Obtenção do título de Engenheiro Químico

Universidade Tecnológica Federal do Paraná Câmpus Francisco Beltrão

Engenharia Química

Data: Segunda-feira, dezoito de junho de 2018, às dez horas.

Orientador: Prof. Dr. André Zuber

UTFPR-FB

Membro da Banca Prof^a. Dr^a. Fernanda Batista de Souza

UTFPR-FB

Membro da Banca Prof. Dr. Juan Carlos Pokrywiecki

UTFPR-FB

A folha de aprovação assinada encontra-se na Coordenação do Curso.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço à Deus por permitir essa jornada e me conceder forças, sabedoria e discernimento para a realização de mais uma conquista.

Aos meus pais, Ivane e Marcio, por terem me cedido mais esta oportunidade, por me fornecerem toda a educação, o constante apoio e incentivo e todo o amor, sem terem medido esforços para a realização desta conquista. Agradeço, pois sem eles nada disso seria possível.

Aos meus amigos, minha segunda família, por estarem comigo em todos os momentos, dividindo as melhores histórias, alegrias e estresses durante toda essa jornada. Em especial, ao meu amigo Rafael, pelo companheirismo em todas as tardes, noites e madrugadas, dividindo tereré, pipoca e toda exaustão para a realização desse trabalho.

Ao meu orientador, André, por ter aceito o convite e ter compartilhado seu tempo, dedicação, paciência e conhecimento para que este trabalho fosse concluído. Obrigada pelo seu apoio e principalmente por ter acreditado na minha capacidade.

Aos professores da banca, Fernanda e Juan e a professora Larissa, por se disponibilizarem e contribuírem com melhorias para o meu trabalho.

À todos que fizeram parte, direta ou indiretamente, dessa caminhada e viabilizaram a conclusão desse trabalho, o meu muito obrigada!

RESUMO

Tonial, Gabrielly Mylena Benedetti. Integração energética em uma rede de trocadores de calor de uma planta de produção de acetona. 2018. 83p. Trabalho de Conclusão de Curso. Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Francisco Beltrão, 2018.

Em busca do melhor desempenho para uma planta industrial, que associasse o correto e mais eficiente uso da energia disponível em uma planta de produção de acetona a partir da reação de oxidação do álcool isopropílico, bem como, a busca da redução de emissão dos gases de efeito estufa, em prol da proteção ao meio ambiente, o presente estudo objetivou a implementação da técnica de Integração Energética de correntes do processo, por meio de uma rede de trocadores de calor. Com a aplicação da metodologia *Pinch*, adaptada para correntes que possuem mudança de fase e entalpia de vaporização, encontrou-se uma rede de trocadores de calor que forneceu a máxima recuperação energética, resultando no gasto mínimo de energia proveniente de utilidades quentes e frias. Os resultados mostraram que é possível uma redução de mais de 50% no consumo de energia, sem que se perca a eficiência do processo de produção. Esse benefício na planta, só foi possível com a instalação de três trocadores de calor no fluxograma do processo inicial, com ausência da Integração Energética. Além disso, a partir de uma análise estimada de redução de custo, a implementação dessa tecnologia acarretaria em uma redução anual de aproximadamente um milhão de reais.

Palavras-chave: Metodologia *Pinch*; Otimização; Eficiência energética; Álcool isopropílico; Gasto energético; Entalpia de vaporização.

ABSTRACT

Tonial, Gabrielly Mylena Benedetti. Energy integration in a heat exchangers' network of an acetone production plant. 2018. 83p. Trabalho de Conclusão de Curso. Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Francisco Beltrão, 2018.

In search of the best performance for an industrial plant, which associates the correct and more efficient use of the available energy in an acetone production plant from the oxidation reaction of the isopropyl alcohol, as well as the search of the emission reduction of the greenhouse effect's gases, in favor of environmental protection, the present study aimed to implement the technical of Energy Integration of process currents, through a heat exchangers' network. With the application of Pinch methodology, adapted for currents that have phase change and enthalpy of vaporization, was found a network of heat exchangers that provided the maximum energy recovery, resulting in the minimum energy consumption from hot and cold utilities. The results showed that's possible a reduction of more than 50% in energy consumption, without losing the efficiency of the production process. This benefit in the plant was only possible with the installation of three heat exchangers in the flowchart of the initial process, without Energy Integration. In addition, based on an estimated cost reduction analysis, the implementation of this technology would result in an annual reduction of approximately two hundred and sixty five thousand dollars.

Keywords: Pinch methodology; Optimization; Energy efficiency; Isopropyl Alcohol; Energy expenditure; Enthalpy of vaporization.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Valores das constantes para o cálculo da capacidade calorífica para isopropanol, acetona e gás hidrogênio.....	35
Tabela 2 – Constantes da Equação de Antoine a 25°C para o Isopropanol, Acetona, Gás hidrogênio e Água.....	39
Tabela 3 – Dados de temperatura crítica (T_c), pressão crítica (P_c) e fator acêntrico de Pitzer (ω) para o isopropanol, a acetona, gás hidrogênio e água.	40
Tabela 4 – Constantes de capacidade calorífica para as correntes na fase vapor. ..	45
Tabela 5 – Constantes de capacidade calorífica para as correntes na fase líquida. .	45
Tabela 6 – Frações molares dos componentes para as Correntes 3-4, 6-8, 13-14, 18-19.	46
Tabela 7 – Dados de variação de temperatura, ponto de orvalho e de bolha e a vazão molar correspondente para as Correntes 3-4, 6-8, 13-14, 18-19.	46
Tabela 8 – Resultados do balanço de massa para o Reator.....	50
Tabela 9 – Pressões de saturação ($P_i^{sat}(bar)$) e constantes de equilíbrio (K_i) para o isopropanol, acetona, gás hidrogênio e água.....	51
Tabela 10 – Resultados do balanço de massa para o tanque Flash, calculados manualmente.....	51
Tabela 11 – Resultados dos parâmetros de interação entre as substâncias para as misturas binárias: água – acetona, acetona – isopropanol, hidrogênio – acetona, isopropanol – água e hidrogênio – água.....	52
Tabela 12 – Resultados do balanço de massa para o tanque Flash, calculados pelo software Petrosim.....	52
Tabela 13 – Resultados do balanço de massa para a torre de absorção, calculados pelo software Petrosim.	53
Tabela 14 – Resultados do balanço de massa para a coluna da acetona, calculados pelo software Petrosim.	54
Tabela 15 – Resultados do balanço de massa para a coluna do isopropanol, calculados pelo software Petrosim.	55
Tabela 16 – Resultados do balanço de massa para o tanque de mistura.....	56
Tabela 17 – Resultados do balanço de massa global para o processo de produção de Acetona a partir da oxidação do Isopropanol.	57

Tabela 18 – Dados de projeto.	58
Tabela 19 – Resultados de temperatura e pressão para as correntes do processo de produção de Acetona por Isopropanol.....	59
Tabela 20 – Resultados do balanço de energia para as subcorrentes participantes da Integração Energética.	61
Tabela 21 – Parâmetros de caracterização das subcorrentes.	62
Tabela 22 – Valores das temperaturas corrigidas para as correntes frias e quentes.	63
Tabela 23 – Segundo passo da cascata de calor, contendo $\Delta H_i'$ para cada intervalo de temperatura corrigida das subcorrentes.	64
Tabela 24 – Cascatas de calor inviável e viável para as temperaturas corrigidas das subcorrentes em estudo.	65
Tabela 25 - Dados necessários para a construção das curvas compostas quente e fria.	67
Tabela 26 – Dados de energia a serem fornecidas e/ou retiradas do sistema antes e depois da integração na rede de trocadores, assim como, os obtidos após os cálculos da integração energética.	73
Tabela 27 – Preço médio de utilidades a serem usadas em trocadores de calor. ...	75
Tabela 28 – Custos anuais de utilidades antes e depois da Integração Energética..	75

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Fluxograma do processo de oxidação do álcool isopropílico para produção de acetona.....	18
Figura 2 – Diagrama das curvas compostas.	23
Figura 3 – Cascata de calor de um exemplo de aplicação.....	25
Figura 4 – Curva de temperatura vs. variação de entalpia das correntes quentes (6-8) e (18-19).....	66
Figura 5 – Curva de temperatura vs. variação de entalpia das correntes frias (3-4) e (13-14).....	66
Figura 6 – Curva composta quente de temperatura vs. variação de entalpia.	67
Figura 7 – Curva composta fria de temperatura vs. variação de entalpia.	68
Figura 8 – Curvas compostas quente e fria de temperatura vs. variação de entalpia, para a integração energética.....	68
Figura 9 – Análise para construção da rede de trocadores de calor acima e abaixo do pinch.....	70
Figura 10 – Rede de trocadores de calor acima da região pinch.	71
Figura 11 – Rede de trocadores de calor abaixo da região pinch.	72
Figura 12 – Fluxograma do processo de produção de Acetona a partir da oxidação do Álcool Isopropílico contendo o resultado da integração entre correntes. .	76

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	11
1.1 PROBLEMA.....	12
1.2 JUSTIFICATIVA	13
1.3 OBJETIVOS	14
1.3.1 Objetivo Geral	14
1.3.2 Objetivos Específicos	15
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	16
2.1 ACETONA	16
2.2 TROCADORES DE CALOR	19
2.3 INTEGRAÇÃO ENERGÉTICA.....	21
2.3.1 Cálculos do balanço de massa e energia.....	22
2.3.2 Construção da curva composta.....	23
2.3.3 Cascata de calor	25
2.3.4 Projeto da rede de trocadores de calor	27
2.3.5 Área de troca térmica	28
2.4 GERADORES DE VAPOR.....	29
2.5 TORRES DE RESFRIAMENTO.....	31
3 PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS	33
3.1 EQUILÍBRIO QUÍMICO DA REAÇÃO	33
3.2 BALANÇO DE MASSA	36
3.2.1 Reator.....	36
3.2.2 Tanque flash.....	37
3.2.2.1 Determinação dos parâmetros de Peng-Robinson.....	40
3.2.2.2 Balanço de massa do tanque flash pelo software Petrosim	40
3.2.3 Torre de absorção (Scrubber)	41
3.2.4 Coluna da acetona	42
3.2.5 Coluna do isopropanol.....	42
3.2.6 Tanque de mistura	43
3.3 BALANÇO DE ENERGIA.....	43
3.3.1 Definições de pressão e temperatura.....	43
3.3.2 Cálculos de capacidade calorífica e variação de entalpia	44
3.4 INTEGRAÇÃO ENERGÉTICA.....	47
3.4.1 Cascata de calor	47
3.4.2 Curvas compostas.....	47
3.4.3 Rede de trocadores de calor	47
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES	49
4.1 EQUILÍBRIO QUÍMICO DA REAÇÃO	49
4.2 BALANÇO DE MASSA	49
4.2.1 Reator.....	49
4.2.2 Tanque flash.....	50
4.2.2.2 Balanço de massa do tanque flash pelo software Petrosim	52
4.2.3 Torre de absorção (Scrubber)	53
4.2.4 Coluna da acetona	54
4.2.5 Coluna do isopropanol.....	55
4.2.6 Tanque de mistura	56
4.2.7 Balanço de massa global	57
4.3 BALANÇO DE ENERGIA.....	58
4.3.1 Definições de pressão e temperatura.....	58

4.3.2 Correntes que necessitam de utilidades.....	59
4.3.3 Cálculos de capacidade calorífica (C_p) e variação de entalpia (ΔH)	60
4.4 INTEGRAÇÃO ENERGÉTICA.....	61
4.4.1 Caracterização das correntes.....	61
4.4.2 Cascata de calor	63
4.4.3 Curvas compostas.....	65
4.4.4 Rede de trocadores de calor	69
4.4.5 Fluxograma contendo integração entre as correntes e sua viabilidade econômica	74
5 CONCLUSÕES	77
REFERÊNCIAS.....	78

1 INTRODUÇÃO

A indústria química é um dos setores que demanda uma grande quantidade de energia para o desenvolvimento de suas atividades. Dentre os diversos tipos de energia utilizados por ela, encontra-se a que provém do petróleo. Este tipo de energia sempre foi imensamente utilizado e em consequência da crise do petróleo na década de setenta, seu uso passou a ser racionado e/ou substituído, devido principalmente ao seu custo.

Com isso, as indústrias passaram por adaptações e buscaram novas fontes de energia e formas de reduzir o consumo energético, empregando investimento em técnicas de otimização dos seus processos. Neste sentido, a análise do processo e a identificação de formas de reaproveitamento de energia são convenientes a nível industrial para reduzir o custo de operação.

Assim sendo, a integração energética utilizando rede de trocadores de calor é um método de otimização que diminui os custos de produção/operação, pois busca um melhor aproveitamento dos recursos energéticos presentes no processo. Essa integração entre diferentes correntes tem como princípio diminuir o consumo de utilidades frias e quentes. Essas utilidades são provenientes de várias fontes energéticas e são utilizadas tanto para o aquecimento, quanto para o resfriamento durante o processo industrial. A redução desse consumo dá-se pelo aproveitamento da energia em excesso de uma corrente específica e a sua reutilização em outra etapa do processo (ANAPOLSKI e INDRUSIAK, 2015; NETO, 2005).

Na indústria, as utilidades quentes e frias mais utilizadas são o vapor d'água e água de arrefecimento, respectivamente. Isso se dá pelo fato da água estar disponível em abundância. Essas utilidades são produzidas por sistemas que empregam fontes de energia renováveis (hidráulica, biomassa, solar, eólica) e/ou não renováveis (petróleo, gás natural, carvão) (GOLDEMBERG e LUCON, 2007). Segundo Lestingui et al. (2017), desde o ano de 2000, as indústrias químicas leves e pesadas, contam com cerca de 50% no consumo de eletricidade do Brasil, com esse valor aumentando a cada ano.

Segundo a ANEEL (2008), com pesquisas realizadas pelo Ministério de Minas e Energia (MME), para os anos de 2006 e 2007, apenas as indústrias tiveram um consumo final energético de 76,7 e 81,9 Mtep (1 tep = 41868 MJ = 11630 kWh), respectivamente, sendo o setor mais consumidor, e consequentemente, o mais

poluente da atmosfera por emissão de gases. Devido a isso, a integração energética surge para minimizar o impacto ambiental da atividade industrial, diminuindo o consumo de energia, reduzindo o seu desperdício e melhorando o seu aproveitamento dentro da indústria.

A integração energética de processos foi reconhecida pelas indústrias na década de 80, devido a uma preocupação em melhorar os processos de produção, tornando-os mais competitivos. Nos anos 90, essa aplicação se expandiu, com o conhecimento dos conceitos de integração de processos e integração energética, associada ao conceito de ponto de estrangulamento, o qual fornece informações sobre o processo como um todo, permitindo assim, a análise das potencialidades de integração, a partir da plotagem de curvas compostas (RELVAS et al., 2000). Esse conceito também é chamado de estrangulamento térmico ou *pinch* e utiliza duas áreas de estudo: modelos matemáticos de programação e conceitos termodinâmicos aliados às regras heurístico-evolutivas. Com esse método é possível obter uma melhor eficiência energética para processos industriais, minimizando desperdício de energia e permitindo ganhos econômicos (GUNDERSEN e NAESS, 1987; NETO, 2005).

Na planta de produção de acetona pela oxidação do álcool isopropílico é possível observar um número considerável de trocadores de calor, o que indica que em várias etapas desse, as correntes devem ser aquecidas e resfriadas (SHAEIWITZ e TURTON, 1999). A importância deste estudo dá-se pelo fato de que a acetona é um dos solventes mais utilizados nas indústrias e nos laboratórios, além disso, sua produção é consideravelmente simples, que produz grande quantidade de energia devido ao seu calor de oxidação (JÚNIOR, 2011).

1.1 PROBLEMA

A competitividade existente entre as indústrias químicas, aliado ao alto preço da energia, fez com que aumentasse o interesse e a necessidade por processos mais eficientes energeticamente. A modernização e a otimização de diversos processos industriais pode ser uma grande alternativa para torná-las cada vez mais competitivas no mercado, uma vez que os investimentos no processo podem reduzir significativamente os custos com produção e operação.

Um dos maiores problemas nas indústrias, atualmente, é conseguir satisfazer as normas ambientais, as exigências dos consumidores, juntamente com a redução

no consumo de energia. Para isso, é necessária uma busca pela utilização correta e eficiente dos recursos energéticos disponíveis para a fabricação do seu produto.

Nas indústrias químicas, principalmente para a produção dessas utilidades, o tipo de energia mais utilizada é a térmica, que provém geralmente de geradores de vapor e a queima de combustíveis fósseis. Devido a isso, as fontes de energia mais utilizadas para essas plantas são as não renováveis como carvão mineral e derivados do petróleo (BAZZO, 1995). O grande problema da queima desse material são os gases poluentes (no caso do consumo de combustíveis fósseis, CO₂) lançados na atmosfera, juntamente com toda a consequência que essa emissão traz, como o efeito estufa (SANTOS, 2000).

No processo de produção de acetona, em estudo, é possível observar um desperdício de energia, pois é necessário o aquecimento da corrente de entrada no reator, onde irá ocorrer a reação de oxidação, como também, um sistema de aquecimento, em forma de serpentinas, sobre o reator. E, posteriormente, é necessário um processo de resfriamento dessa corrente de saída do reator. Todo esse sistema de aquecimento e resfriamento utiliza uma demanda muito grande de energia. Com o exposto, a implantação da metodologia de integração energética, por meio de troca térmicas entre correntes do sistema numa rede de trocadores de calor, que recuperem a energia em excesso e minimizem a necessidade de tantas utilidades quentes e frias, é possível obter a diminuição dos gastos com energia, e conseqüentemente, minimizar o impacto ambiental nessa atividade industrial.

1.2 JUSTIFICATIVA

Toda indústria química, na atualidade, busca encontrar o melhor desempenho para a sua planta de processo, visando a melhor eficiência energética. Dessa forma, em justificativa ao presente trabalho, é possível associar o correto e mais eficiente uso da energia disponível para o processo de acetona a partir da oxidação do álcool isopropílico, por meio da integração energética de correntes de processo, utilizando redes de trocadores de calor.

A importância de se otimizar o processo químico de uma planta, além de permitir ganhos econômicos com a redução do consumo de energia com utilidades, é a redução da queima de combustíveis fósseis, responsáveis por emitirem os gases de efeito estufa (GEE's). Esse assunto foi tema principal na Conferência Nacional das

Nações Unidas sobre o Meio Ambiente e Desenvolvimento, que ocorreu no Rio de Janeiro, nos anos 90, também chamada de ECO-92 e também no Protocolo de Quioto (1997), que no Brasil entrou em vigor em 2005. O interesse com a questão ambiental fez-se ainda mais presente e com objetivo de promover soluções para o aquecimento global, o documento de Quioto estabelece metas de redução da emissão desses GEE's (principalmente dióxido de carbono e metano) na atmosfera (JUNIOR et al., 2006).

Segundo estudo realizado por Faleiros e Luiz (2014), a otimização de uma planta de produção de formaldeído pela aplicação da técnica de integração energética por meio da tecnologia *Pinch*, obteve uma redução da demanda energética de 7.373,82 kW/dia para apenas 349,09kW/dia, com uma redução no consumo de 95,27%. Esses resultados, representados pelo gasto da empresa, minimizaram de R\$226.854,54 ao mês, para R\$10.739,68 ao mês, considerando uma eficiência de 30% da conversão energética elétrica em térmica (FALEIROS e LUIZ, 2014). Dessa forma, a aplicação do conceito do ponto de estrangulamento (análise de *Pinch*), na integração energética de uma planta de produção de acetona a partir da oxidação do álcool isopropílico, juntamente com análises de viabilidade econômica do projeto, possibilitará prever os lucros econômicos, por meio da mínima demanda de energia.

1.3 OBJETIVOS

1.3.1 Objetivo Geral

O presente Trabalho de Conclusão de Curso, pretende implementar a técnica de integração energética, a fim de intercambiar energia entre as correntes do processo de produção de acetona via álcool isopropílico, por meio da implantação de uma rede de trocadores de calor, obtendo, assim, o mínimo gasto possível com a demanda de utilidades frias e quentes, melhorando, significativamente, a eficiência energética do processo de produção de acetona.

1.3.2 Objetivos Específicos

Para se alcançar o objetivo geral do presente trabalho, os seguintes objetivos específicos foram criados:

- Apresentar uma revisão bibliográfica e teórica sobre a metodologia de análise de *Pinch* para a realização da integração energética usando rede de trocadores de calor;
- Identificar a composição e características das correntes de entrada e saída do processo;
- Realizar o balanço de massa e energia do processo;
- Identificar as correntes frias e quentes do processo;
- Calcular dados de entalpia e troca térmica entre cada corrente no processo, obtendo toda energia gasta e fornecida por ele;
- Implementar a metodologia da tecnologia *Pinch* para encontrar a temperatura do ponto de estrangulamento e os pontos que podem favorecer a troca de calor;
- Montar uma rede de trocadores de calor por meio da elaboração do diagrama de grades, contido na metodologia da análise *Pinch*;
- Definir um novo fluxograma para o processo, considerando a integração energética;
- Fazer uma análise de redução de custos baseada na redução do consumo energético.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

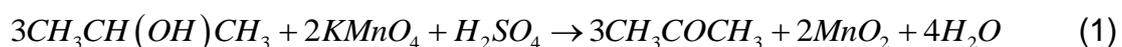
2.1 ACETONA

A acetona (CH_3COCH_3), também conhecida por 2-propanona, dimetilcetona, β -ceto-propano ou apenas propanona, é o primeiro composto e o mais importante da série homóloga de cetonas. Em temperatura ambiente, a acetona encontra-se na fase líquida incolor, muito volátil, altamente inflamável. Além disso, é miscível com água, álcoois de baixo peso molecular, clorofórmio, éter e muitos óleos. A acetona é muito utilizada como solvente de diversos polímeros. No entanto, sua maior aplicação é na síntese de outros produtos químicos, como álcool diacetônico, bisfenol A e metacrilato de metila, entre outros (JÚNIOR, 2011; SIFNIADES e LEVY, 2005).

Segundo Arda et al. (2009) e Sifniades e Levy (2005), a acetona pode ser obtida de diversas maneiras, entre elas:

- Oxidação do cumeno, mais conhecido por processo Hock;
- Desidrogenação do 2-propanol;
- Oxidação do 2-propanol;
- Desidrogenação do álcool isopropílico;
- Oxidação catalítica do álcool isopropílico;
- Oxidação de hidrocarbonetos, como a oxidação do propeno;
- Oxidação do p-diisopropil benzeno;
- Processo para obtenção de óxido de propileno por oxirano (Acetona é um subproduto);
- Fermentação de biomassa.

A síntese que será estudada no presente trabalho é da obtenção da acetona a partir da oxidação do álcool isopropílico. De acordo com Fanger e Ambrozin (2015), em termos laboratoriais, para adquirir a acetona, a reação mais utilizada é de oxidação do isopropanol, com ajuda do agente oxidante permanganato de potássio em substituição ao dicromato de potássio ($\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$), como catalisador e sua reação é apresentada na Eq. (1):



na qual, utiliza-se como reagentes isopropanal, ácido sulfúrico e permanganato de potássio, e se obtém como produtos, acetona, sulfato de potássio e dióxido de manganês.

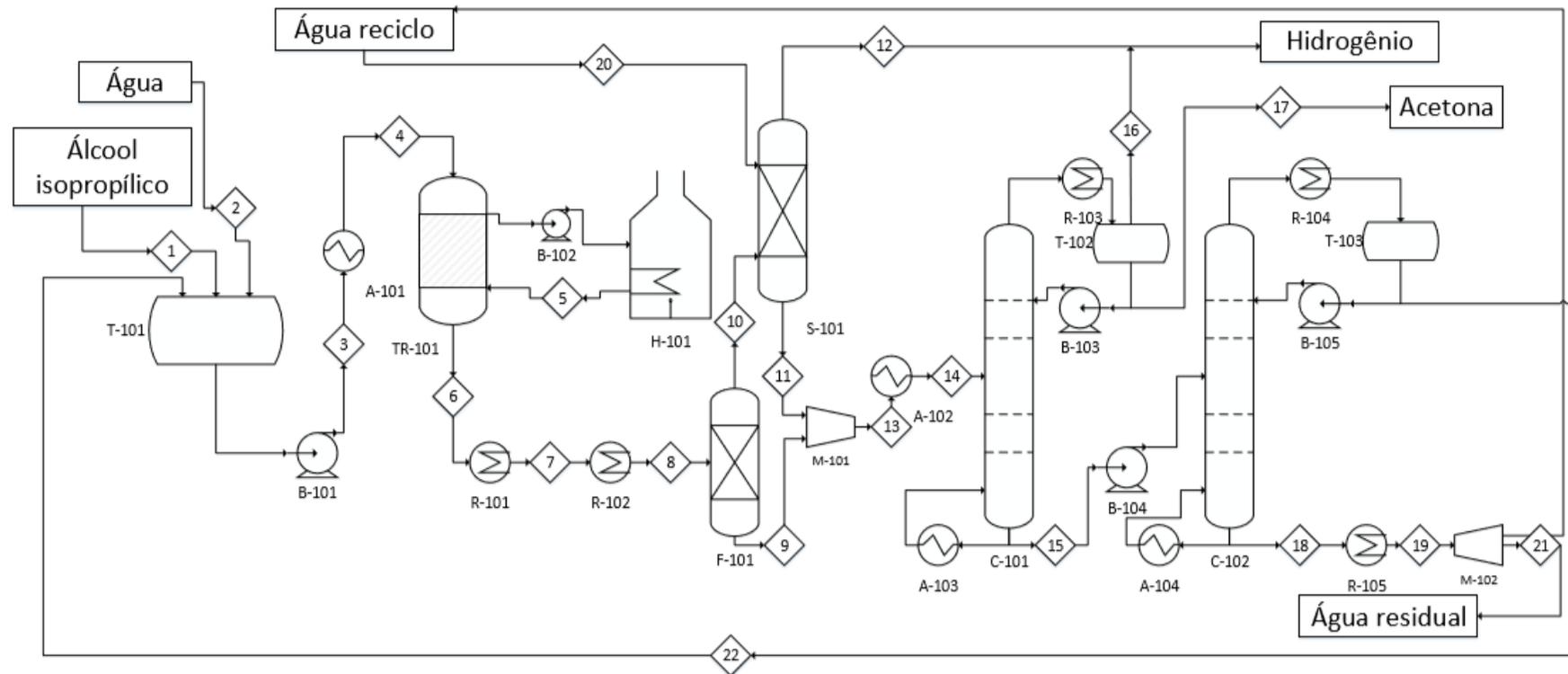
Porém, em termos industriais, essa reação apresenta algumas modificações, sendo a reação simplificada e processada no reator, apresentada na Eq. (2):



no qual o álcool isopropílico se decompõe, formando acetona e hidrogênio.

A planta de produção de acetona pela oxidação do álcool isopropílico está contida na Figura 1, a qual segue como fonte o trabalho de Shaeiwitz e Turton (1999), Arda et al. (2009) e Llacta et al. (2015).

Nesse processo, a água e o álcool isopropílico são alimentados no tanque de mistura, em seguida, a corrente que deixa esse tanque é pré-aquecida e encaminhada para o reator, no qual a reação de oxidação do álcool ocorre. Caracterizada por ser endotérmica, é necessário manter o reator a uma elevada temperatura, a qual é fornecida por um aquecedor. O produto da reação (gás hidrogênio e acetona), misturado com pequena quantidade de água e isopropanol, é refrigerado e condensado, para então seguir até o tanque flash, onde se separa as fases vapor e líquido. No topo do tanque flash saem hidrogênio, acetona e isopropanol, que são encaminhados para o scrubber, para a remoção do gás hidrogênio. O produto de fundo do tanque flash é formado por acetona, água e isopropanol e antes de chegar a coluna de acetona, é misturado com o produto de fundo do scrubber (sem o gás hidrogênio). Na coluna, aproximadamente 99% da acetona é retirada pelo topo, e o resto sai como produto de fundo, o qual segue para a coluna de recuperação do álcool isopropílico. Na coluna do isopropílico, o produto de topo é enviado para alimentação do tanque de mistura, no início do processo, enquanto o produto de fundo, parte é retirado como água residual do processo e o resto retorna no sistema como absorvente para torre de absorção (scrubber) (ARDA et al., 2009; LLACTA et al., 2015; TURTON et al., 2009).



Legenda:	R-101 Resfriador	C-101 Coluna da acetona	R-104 Resfriador
	H-101 Caldeira	R-103 Resfriador	T-103 Tanque de refluxo isopropanol
T-101 Tanque de mistura	R-102 Resfriador	T-102 Tanque de refluxo acetona	B-105 Bomba
B-101 Bomba	F-101 Tanque flash	B-103 Bomba	A-104 Aquecedor
A-101 Aquecedor	S-101 Torre de absorção (Scrubber)	A-103 Aquecedor	R-105 Resfriador
TR-101 Reator de oxidação	M-101 Mixer	B-104 Bomba	M-102 Separador
B-102 Bomba	A-102 Aquecedor	C-102 Coluna do isopropanol	

Figura 1 – Fluxograma do processo de oxidação do álcool isopropílico para produção de acetona.
Fonte: adaptado de Arda et al. (2009), Tohäneanu et al. (2014) e Llacta et al. (2015).

2.2 TROCADORES DE CALOR

Os trocadores de calor são equipamentos que realizam a troca térmica entre dois fluidos que possuem diferentes temperaturas, impedindo que esses se misturem devido a separação por uma parede, que na grande parte dos dispositivos, são de metal e possuem elevada condutividade térmica. Essa transferência de calor geralmente ocorre por convecção, quando se trata dos fluidos, e condução, quando é através da parede que separa os fluidos (ÇENGEL, 2012; ARAUJO, 2011).

Nos trocadores de calor, a água e o vapor d'água quando utilizados como fonte de energia, tanto para o aquecimento como resfriamento, são chamados de utilidades. Dessa forma, o fluido quente é o que se resfriará, fornecendo o calor, enquanto o fluido frio é o que se aquecerá, recebendo calor, sem que haja a mudança de fase (ARAUJO, 2011).

Dentre os diferentes tipos de dispositivos e configurações de trocadores de calor, os que mais se destacam são: duplo tubo; casco e tubo; placas e trocadores compactos (ARAUJO, 2011). Nos trocadores de calor que contêm tubos, dois tipos de escoamentos são possíveis:

➤ Escoamento paralelo (ou concorrente): os fluidos quente e frio entram na mesma extremidade do trocador de calor e o atravessam no mesmo sentido. Dessa forma, a maior diferença entre as temperaturas dos fluidos é na entrada, os quais apresentam maior temperatura para o fluido quente e menor temperatura para o frio. Durante a extensão percorrida no trocador, essa diferença diminui. Nessa configuração de escoamento é impossível obter na saída uma temperatura de fluido frio maior que a do fluido quente (ÇENGEL, 2012; ARAUJO, 2011).

➤ Escoamento contracorrente: os fluidos quente e frio entram em extremidades opostas no trocador de calor e o percorrem também em sentidos opostos. Nessa configuração, a diferença de temperatura é mais homogênea durante toda extensão do trocador, e a temperatura do fluido frio na saída, pode ser maior que a do fluido quente. Desse modo, é possível obter uma maior transferência de calor, tornando o trocador contracorrente mais eficiente (ÇENGEL, 2012; ARAUJO, 2011).

O trocador de calor opera em estado estacionário, sem realizar trabalho, não havendo acúmulo de energia e podendo desprezar os termos referentes à energia potencial e cinética. Dessa maneira, o balanço de energia para um trocador é definido pela Eq. (3):

$$Q = U \cdot A_T \cdot \Delta T_{\ln} \quad (3)$$

na qual Q é a quantidade de calor trocado (kW), U é o coeficiente global de transferência de calor ($W / (m^2 K)$), A_T é a área de troca térmica do trocador de calor (m^2) e ΔT_{\ln} é diferença da temperatura média logarítmica (MLDT) (K). É possível definir U e ΔT_{\ln} a partir das Eqs. (4) e (5), respectivamente:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_o} \quad (4)$$

$$\Delta T_{\ln} = \frac{\Delta t_2 - \Delta t_1}{\ln \left[\frac{\Delta t_2}{\Delta t_1} \right]} \quad (5)$$

nas quais h_i e h_o são coeficientes médios de transferência de calor por convecção ($W / (m^2 K)$), para as correntes quente e fria. Enquanto, Δt_2 e Δt_1 são as diferenças de temperatura (K) entre os fluidos em cada extremidade do trocador, que é definida pela característica de escoamento, sendo esse paralelo ou contracorrente (ÇENGEL, 2012; ARAUJO, 2011).

Outras considerações importantes a se fazer devido ao escoamento permanente do trocador de calor são que as vazões mássicas dos fluidos permanecem constantes, como as temperaturas e pressões na entrada e saída do trocador. Enquanto isso, o calor específico de cada fluido, varia com a temperatura, porém, é possível considerá-lo constante em uma faixa específica de temperatura. Ainda desprezando as mudanças de energia cinética e potencial, juntamente com a condução de calor axial ao longo do trocador e a perda de calor, considerando isolamento perfeito, tem-se a transferência de calor apenas entre os dois fluidos. Desse modo, aplicando a primeira lei da termodinâmica, para a definição da taxa da transferência de calor, segue a Eq. (6).

$$\dot{Q} = \dot{m} \cdot C_p \cdot \Delta T \quad (6)$$

na qual \dot{m} é a taxa de escoamento de massa (kg / s), C_p é o calor específico ($kJ / (kg K)$) e ΔT é a diferença de temperatura da saída e da entrada (K), todas variáveis sendo pertinentes à cada fluido (ÇENGEL, 2012).

Os cálculos de entalpia e capacidade calorífica, segundo Smith, et al. (2007), dá-se pelas Eqs. (7) e (8) respectivamente:

$$\Delta H = C_p \cdot \Delta T \quad (7)$$

$$\frac{C_p^{gásideal}}{R} = A + B \cdot T + C \cdot T^2 + D \cdot T^{-2} \quad (8)$$

nas quais ΔH é a variação da entalpia (kJ/kg), $C_p^{gásideal}$ é o calor específico, em comportamento de gás ideal ($kJ/(kg K)$), de uma determinada substância, R é a constante universal dos gases ideais ($kJ/(kgmol K)$) e as constantes A , B , C e D são dados tabelados para determinada substância.

2.3 INTEGRAÇÃO ENERGÉTICA

Durante as décadas de 70 e 80, devido à crise do petróleo, houve um aumento significativo no custo da energia, o que forçou as indústrias a otimizarem seus processos, buscando redução de gastos relacionados ao consumo energético, com o intuito de serem competitivas no mercado. Foi então que a integração energética surgiu como uma importante ferramenta (NETO, 2005).

De acordo com Masso e Rudd (1969), citado por Beninca (2008), no final da década de 60 foi criado o seguinte significado para a integração energética, em que:

“Um dado conjunto de correntes quentes que precisam ser resfriadas e correntes frias que precisam ser aquecidas, de temperaturas iniciais definidas até temperaturas finais especificadas, projetar a rede de trocador de calor, aquecedores e resfriadores capaz de atingir estes objetivos com o menor custo”.

Em 1993, durante um encontro da International Energy Agency (IEA), a definição de integração de processos foi formulada, sendo:

“Métodos gerais e sistemáticos para o projeto de sistemas integrados de produção, desde processos individuais até processos industriais complexos, com ênfase especial no uso eficiente de energia e na redução do seu impacto ambiental” (RELVAS et al., 2000; RODRIGUES, 2012).

No fim da década de 70, segundo Boland e Linnhof (1979), também citado por Beninca (2008), surgiu a solução por meio da tecnologia *Pinch*, a qual propôs oferecer ferramentas simples, em formas de gráfico, que expõe a mínima quantidade necessária de energia e a quantidade ótima de trocadores de calor para um determinado processo industrial, estabelecendo também a área de troca térmica total necessária. Em virtude da complexidade da resolução de um problema de integração

energética, a aplicação de metodologias, como a tecnologia *Pinch*, se faz indispensável (NETO, 2005; TURTON et al., 2009).

Para que se possa entender melhor sobre a integração energética é necessário o conhecimento de alguns conceitos fundamentais, como os de correntes quentes e correntes frias. As correntes quentes (como vapor d'água) são caracterizadas por cederem calor às utilidades frias, pois necessitam diminuir sua temperatura, por consequência, as correntes frias (como água de refrigeração) são as que necessitam aumentar sua temperatura, recebendo esse calor. A diferença de temperatura mínima (ΔT_{\min}), é um outro conceito essencial para a integração energética e tem como definição a diferença mínima de temperaturas que deve existir para efetuar a troca de calor entre as correntes (TURTON et al., 2009; RELVAS et al., 2000).

O método *Pinch* divide-se em duas partes, segundo Linnhoff et al. (1982), citado por Neto (2005), a primeira é a determinação das metas referenciais, na qual se compreende o consumo mínimo de utilidades necessárias para o processo, o número mínimo de unidades de troca térmica e a área mínima para a transferência de calor entre as correntes quentes e frias envolvidas no processo. A segunda parte, é definida pela síntese de rede de trocadores de calor, que tem como objetivo alcançar todas as metas definidas na primeira fase.

Conforme Neto (2005), para a determinação desses parâmetros é necessário seguir etapas, as quais serão citados a seguir:

2.3.1 Cálculos do balanço de massa e energia

Primeiramente, é necessário obter, por meio de balanços de massa e energia, as vazões mássicas e a quantidade de energia presente em cada uma das correntes do processo. Segundo Himmelblau e Riggs (2014), o balanço de massa e o balanço de energia são definidos a partir da equação geral, apresentada na Eq. (9):

$$A = Q_f - Q_i \quad (9)$$

sendo, A o acúmulo de energia, Q_f a quantidade de energia final no sistema e Q_i a quantidade de energia inicial no sistema, podendo ser reescrita para um determinado sistema, como a Eq. (10):

$$A = E - S + G - C \quad (10)$$

sendo, E referente à quantidade de entrada no sistema, S à quantidade de saída no sistema, G à geração no sistema e C ao consumo no sistema.

Em termos de balanço massa, essa equação refere-se, como próprio nome já diz, às vazões mássicas (ou molares) presentes no sistema, enquanto em termos de balanço de energia, essa equação se refere à energia presente nas correntes do sistema, sendo elas, energia potencial, cinética, trabalho, transferência de calor e entalpia (HIMMELBLAU e RIGGS, 2014).

2.3.2 Construção da curva composta

As curvas compostas são uma representação do balanço de energia do processo, retratado por gráficos que relacionam a temperatura com entalpia para as correntes frias e quentes do sistema. Nesses diagramas é possível encontrar a diferença mínima de temperatura, representada pela menor distância vertical entre as curvas compostas das correntes (NETO, 2005).

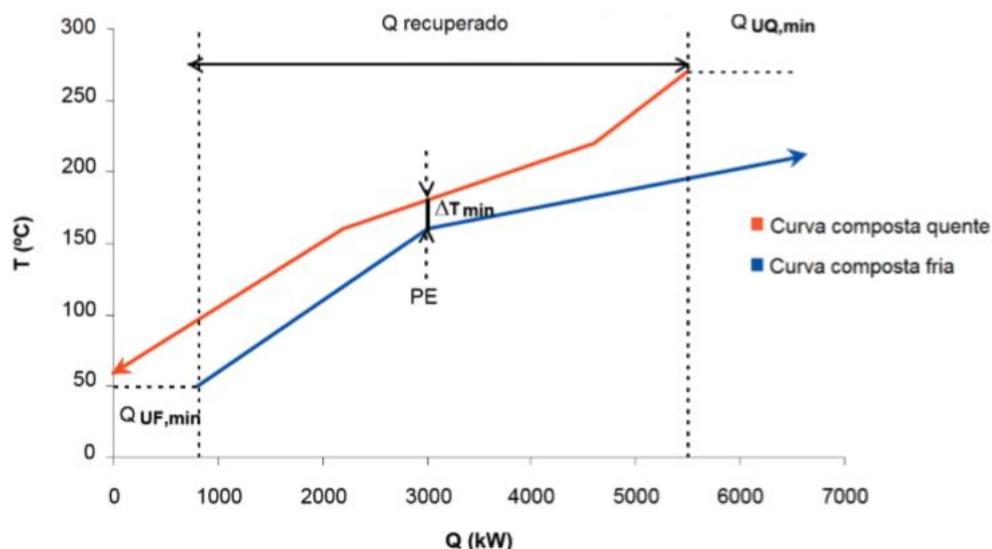


Figura 2 – Diagrama das curvas compostas.
 Fonte: Adaptado de Relvas et al. (2000), citado por Faleiros e Luiz (2014).

A Figura 2 representa um exemplo de curvas compostas, na qual Relvas et al. (2000) conceitua $Q_{UQ,min}$ como a quantidade mínima de calor externo fornecido ao processo por uma utilidade quente; $Q_{UF,min}$ como a quantidade mínima de calor a retirar do processo por uma utilidade fria; ΔT_{min} como a diferença mínima de

temperatura, localizado no ponto de estrangulamento (PE), local relacionado ao *pinch*; e $Q_{recuperado}$ como a quantidade máxima de energia que é possível recuperar por transferência de calor entre as correntes do processo. Segundo Turton et al. (2009), a curva composta quente, definida para as correntes quentes, é obtida pela soma das cargas térmicas de resfriamento e a curva composta fria, definida para as correntes frias, é obtida pela soma das cargas térmicas de aquecimento.

Ao se analisar a variação do ΔT_{min} é possível concluir que quanto menor for seu valor, maior será a transferência de calor entre as correntes do processo, como consequência, menor será o consumo de utilidades, como também, que com o aumento do ΔT_{min} há uma diminuição no custo do equipamento e na área de transferência de calor, pois para uma mesma carga térmica, um aumento na força motriz diminui a necessidade de área, e, como uma última conclusão, quando ΔT_{min} for zero, significa a máxima quantidade de calor que é possível trocar entre as correntes do processo, porém com uma área de troca térmica infinita, devido a força motriz ser nula no PE para a transferência de calor (RELVAS et al., 2002; NETO 2005).

Além disso, é possível obter outras conclusões relacionadas ao ponto de estrangulamento (PE), como, a zona acima do PE, denomina-se absorvedora de calor, onde ocorre o arrefecimento das correntes quentes com as correntes frias do processo, enquanto na zona abaixo do PE, denominada fonte de calor, ocorre o aquecimento das correntes frias por transferência de calor com as correntes quentes do processo (RELVAS et al., 2000).

Para que não sejam necessárias utilidades quentes e frias para suplementar o aquecimento ou retirar a energia em excesso do sistema, Relvas et al. (2000) traz os seguintes princípios da análise do PE como precisos para garantir o consumo mínimo de energia:

- Evitar transferência de calor através do ponto de estrangulamento (PE), ou seja, não se deve fornecer calor da zona acima do PE para a zona abaixo do PE, pois isso implica em um acréscimo de utilidades quentes e frias;
- Evitar o uso inapropriado das utilidades, como exemplo, caso seja necessário o uso de uma utilidade fria para resfriar uma corrente que está acima do PE, a quantidade de calor retirada terá de ser repostada, incrementando o gasto de utilidade quente, se faz o mesmo para o caso contrário.

A utilização das curvas compostas com o propósito de se obter o consumo mínimo de utilidades é insuficiente, pois como se baseia numa construção gráfica, é considerada menos correta que um método algébrico, como o das cascatas e calor (RELVAS et al., 2000).

2.3.3 Cascata de calor

A cascata de calor, também conhecida por algoritmo tubular, é um método alternativo de se obter as metas de energia de um processo. Dá-se por meio da construção de uma tabela, dividindo o problema em intervalos de temperatura, para a realização do balanço energético (NETO, 2005).

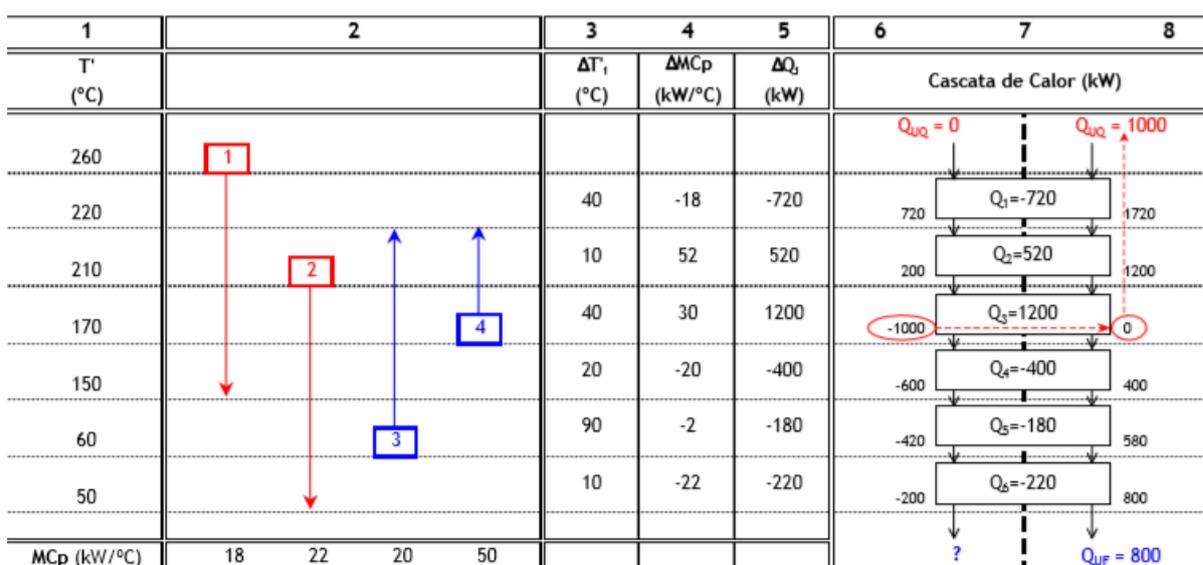


Figura 3 – Cascata de calor de um exemplo de aplicação.
Fonte: Relvas et al. (2000).

A Figura 3 representa um exemplo de diagrama em cascata de calor, nele se mostra a quantidade líquida de energia em cada intervalo de temperatura. A partir da cascata, quando há excesso de energia em um determinado nível de temperatura, essa energia pode ser transferida em cascata até o próximo nível inferior. Pois, quando se tem apenas energia térmica, o excesso não será possível ser transferido para um intervalo de temperatura mais alto, como define a segunda lei da termodinâmica (TURTON et al., 2009).

Segundo Relvas et al. (2000), a ideia da cascata é verificar para cada intervalo de temperatura a quantidade de calor disponível entre as correntes do processo e

transferir o excesso de cada nível para o próximo inferior, para isso é necessário seguir próximos passos:

➤ Primeiro passo: Dividir o processo em intervalos de temperatura, por meio de um ajuste das temperaturas reais, utilizando as Eqs. (11) e (12) respectivamente, para encontrar as temperaturas corrigidas das correntes frias (T'_{Fria}) e quentes (T'_{Quente}):

$$T'_{Fria} = T_{Fria} + \frac{\Delta T_{\min}}{2} \quad (11)$$

$$T'_{Quente} = T_{Quente} - \frac{\Delta T_{\min}}{2} \quad (12)$$

Ao representar as curvas referentes às temperaturas corrigidas é possível verificar que elas se sobrepõem no ponto de estrangulamento (PE). Por definição, essas temperaturas permitem garantir, que em qualquer intervalo, ambas as temperaturas das correntes quentes e frias diferem, de ΔT_{\min} , garantindo assim a transferência de calor nos trocadores, sendo impossível apresentar valores de ΔT inferiores ao estipulado como ΔT_{\min} (RELVAS et al., 2000; FALEIROS e LUIZ, 2014).

➤ Segundo passo: efetuar o balanço de energia para os novos intervalos de temperaturas corrigidas, a partir da Equação 13:

$$Q_I = \left[\sum_{C.Frias} \dot{m} \cdot (C_p)_{Fria} - \sum_{C.Quentes} \dot{m} \cdot (C_p)_{Quente} \right] \cdot \Delta T_I' \quad (13)$$

na qual, I representa o intervalo de temperatura, logo, $\Delta T_I'$ é a diferença de temperaturas corrigidas (K) e Q_I é a energia em forma de calor (kW) e o termo entre os colchetes corresponde a $\Delta \dot{m}C_p$ ($kJ / (K s)$), do intervalo I , o qual determinará se há excesso de calor ($Q_I > 0$) ou déficit de calor ($Q_I < 0$) (RELVAS et al., 2000; RODRIGUES, 2012).

➤ Terceiro passo: construir a tabela da cascata de calor. Na primeira coluna são ordenadas, por ordem decrescente, as temperaturas corrigidas, na próxima coluna são colocados os intervalos entre cada temperatura corrigida e nas colunas seguintes, para cada intervalo, são determinados a variação de temperatura e o somatório dos $\dot{m}C_p$. Em seguida, é elaborada uma coluna para a cascata inviável, considerando-se que nenhuma quantidade de calor externa deve ser fornecida ao processo, porém ao longo da sua construção, os intervalos de temperatura com excesso de calor ($Q_I > 0$)

retiram energia à cascata, enquanto os intervalos de temperatura com déficit de calor ($Q_i < 0$) adicionam energia da cascata. No final da construção da cascata inviável observa-se um déficit de calor, como isso não pode ocorrer, é construída uma outra coluna, representada por cascata de calor viável, utilizando o valor inicial como o resíduo do intervalo, da cascata anterior, como utilidade quente para fornecer calor ao primeiro intervalo da nova cascata, a qual visa obter um valor igual a zero no intervalo do *pinch* (RELVAS et al., 2000; RODRIGUES, 2012).

A cascata de calor terminada é capaz de determinar os consumos mínimos de energia, a quantidade mínima exigida de utilidades quentes e frias por meio dos valores iniciais e finais da que representa o calor acumulado da cascata viável (RODRIGUES, 2012; FALEIROS e LUIZ, 2014).

2.3.4 Projeto da rede de trocadores de calor

A segunda parte, do método *Pinch*, segundo Linnhoff et al. (1982), citado por Neto (2005), é definida pela síntese de rede de trocadores de calor, a qual visa obter uma rede que alcance todas as metas definidas anteriormente.

A construção da rede de trocadores de calor envolve relacionar as correntes que deverão fazer a troca térmica, ou seja, são selecionadas as correntes quentes que fornecerão energia térmica às correntes frias até alcançar a temperatura desejada, como também obter a quantidade mínima de trocadores de calor necessários para realizar essa troca térmica na rede (FALEIROS e LUIZ, 2014).

É necessário satisfazer alguns critérios termodinâmicos para que a construção da rede de trocadores de calor seja bem sucedida, como a temperatura de entrada das correntes frias que devem ser inferiores à temperatura de saída das correntes quentes e a escolha das correntes que serão envolvidas na troca energética, pois é preciso evitar que, em qualquer etapa do processo, essas correntes atinjam uma diferença de temperatura que seja inferior a determinada como ΔT_{\min} (PESSOA; QUEIROZ, 2005; RELVAS et al., 2000).

Para isso, Relvas et al. (2000), propõe as seguintes regras à metodologia *Pinch* que devem ser respeitadas:

➤ Deve-se esboçar um diagrama de grade, que representa paralelamente as correntes envolvidas no processo, com as suas variações de temperatura e a

localização do “*pinch*”, dividindo as regiões acima e abaixo do “*pinch*” para que se analise separadamente cada uma delas. A zona próxima ao “*pinch*” possui a diferença de temperaturas entre as correntes quentes e frias exatamente igual ΔT_{\min} , sendo por esse motivo, a região que limita o processo de escolha das correntes.

➤ Na zona acima do “*pinch*”, para a determinação das correntes utilizadas na troca térmica, um dos critérios é que a capacidade calorífica da corrente quente $(\dot{m}c_p)_{\text{Quente}}$ seja inferior ou igual à capacidade calorífica da corrente fria $(\dot{m}c_p)_{\text{Fria}}$, assim como o número de correntes quentes devem ser inferiores ou igual ao número de correntes frias. Enquanto isso, na zona abaixo do “*pinch*”, deve ser o inverso, os valores de $(\dot{m}c_p)_{\text{Quente}}$ e número de correntes quentes devem ser superior ou iguais aos valores de $(\dot{m}c_p)_{\text{Fria}}$ e número de correntes frias.

➤ Em uma área afastada do “*pinch*”, os trocadores de calor devem considerar que: acima do “*pinch*”, a utilidade fria não deve ser utilizada, devido ao fato de que todas as correntes quentes deverão ser resfriadas até a temperatura do “*pinch*” por troca térmica com as correntes frias; abaixo do “*pinch*”, a utilidade quente não deve ser utilizada, também pelo fato de que todas as correntes frias devem ser aquecidas até a temperatura do “*pinch*” pela troca térmica com as correntes quentes.

2.3.5 Área de troca térmica

Como a área total de troca térmica é diretamente relacionado ao custo dos equipamentos, torna-se ainda mais importante se obter, por meio de cálculos, uma conformação de rede que ofereça a menor área para a transferência de calor. Segundo Townsend e Linnhoff (1984), citado por Neto (2005), o conceito de transferência vertical de calor por meio das curvas compostas sugere que a área global de troca térmica será mínima, devido a um melhor aproveitamento da força motriz existente. Dessa forma, como nesse passo, as energias trocadas em cada trocador de calor (Q_{TC}) e quais as correntes envolvidas na troca já são conhecidas, é possível calcular as áreas para cada trocador de calor utilizando a Eq. (14):

$$A_{TC} = \frac{Q_{TC}}{U \cdot \Delta T_{\ln}} \quad (14)$$

em que U e ΔT_{in} são definidos pelas Eqs. (4) e (5), respectivamente (RELVAS et al., 2000; FALEIROS e LUIZ, 2014).

Segundo Turton et al. (2009), por esse método de “*pinch point*”, ponto de estrangulamento, que é definido sucintamente como ponto de maior aproximação entre as temperaturas das correntes quentes e frias nas curvas compostas, é possível obter uma maximização da troca térmica com um design ótimo de uma rede de trocadores de calor. Dessa forma, a principal vantagem de se aplicar essas técnicas da integração energética, como otimização do processo, é a redução significativa dos custos de produção de um sistema, seguindo da redução na utilização de recursos e na emissão de resíduos que afetam o meio ambiente (RODRIGUES, 2012).

As indústrias químicas, visando o lucro, buscam, principalmente, essas vantagens apresentadas para os seus processos, e em consequência a isso a área de aplicações da integração energética dentro de uma indústria é bastante extensa, alguns exemplos, de acordo com Gundersen (2000) e Neto (2005) são:

- No planejamento, projeto e operação de processos e sistemas de utilidades;
- Na elaboração de novos projetos e projetos de reconversão (readaptação);
- No aumento da eficiência global (energia e matérias-primas) e da produtividade;
- No projeto de processos contínuos, semi-contínuos e descontínuos;
- No projeto de equipamentos do processo, como reatores, separadores e redes de trocadores de calor;
- Na integração entre processos e sistemas de utilidades;
- Na integração entre complexos industriais, centrais elétricas e zonas de aquecimento/arrefecimento;
- Na definição de questões de operabilidade (flexibilidade, controlabilidade e comutabilidade);
- Na minimização de resíduos e efluentes aquosos;
- Em vários aspectos da redução de emissão de gases poluentes.

2.4 GERADORES DE VAPOR

No início do século 18, a necessidade de se encontrar uma fonte de calor que substituísse a queima direta do carvão fóssil, fez com que as máquinas geradoras de

vapor surgissem. Com o melhoramento dessa ideia, hoje o vapor d'água é indispensável na maioria das indústrias químicas (BAZZO, 1995). A preferência do uso do vapor como fluido é devido ao seu alto calor específico e pela água ser abundante e disponível para o uso, devido a isso, o vapor é a principal fonte de aquecimento nas indústrias de processos químicos, sendo utilizado em reatores químicos, trocadores de calor evaporadores, secadores e outros diversos equipamentos térmicos (BAZZO, 1995; BIZZO, 2003).

Segundo Pera (1990), Bazzo (1995) e Bizzo (2003), a estrutura de um gerador de vapor possui seis principais componentes:

- Fornalha: local onde se faz a queima do combustível.
- Caldeira: onde irá ocorrer a mudança de fase da água no estado líquido para o vapor saturado.
- Superaquecedor: local onde a temperatura do vapor gerado na caldeira aumenta, transformando-o em vapor superaquecido.
- Economizador: responsável por pré-aquecer a água de alimentação, instalado após os superaquecedores, aproveitando o calor gerado.
- Aquecedor de ar: a partir do calor residual dos gases de combustão, o aquecedor é responsável por pré-aquecer o ar utilizado na queima de combustível.
- Chaminé: local por onde os gases de combustão são impelidos ao meio ambiente.

Nas indústrias químicas, as unidades geradoras de vapor são simplesmente conhecidas por caldeiras, e estas podem ser classificadas em dois tipos, segundo Bizzo (2003):

- Flamotubulares: possui pequena capacidade de produção de vapor (até 10 ton/h) e baixas pressões (até 10 bar). Os gases de combustão passam por tubos, vaporizando a água que fica em volta desses.
- Aquatubulares: possui maior capacidade, podendo produzir valores maiores que 750 ton/h de vapor e altas pressões (até 3450 atm = 3495,713 bar). A água passa por dentro dos tubos, por convecção natural devido à diferença de densidade entre líquido e vapor formado, onde então, ocorre a produção de vapor.

Conforme Júnior e Lacava (2007), os gases resultantes dos equipamentos produzem energia térmica a partir de reações de combustão, são as maiores fontes de emissão de gases poluentes. Além disso, o processo de geração de vapor, se

encaixa perfeitamente no conceito de poluição atmosférica, segundo Bretschneider e Kurfürst (1987), citado por Francisco (2012), que é definido como:

- Local por onde substâncias poluentes são lançadas (chaminés, dutos, descargas de ar, etc.);
- Equipamentos e/ou processos de produção (caldeiras, fornos, linhas de produção, câmaras de combustão, etc.);
- Área que possui conjunto de pontos e/ou processos e equipamentos, capaz de liberar matéria ou energia para atmosfera.

2.5 TORRES DE RESFRIAMENTO

As torres de resfriamento são equipamentos utilizados para o resfriamento de água industrial, como aquela resultante do processo de resfriamento de condensadores em geração de potência, de instalações de refrigeração, trocadores de calor, entre outros. Após realizar o resfriamento, essa água aquece, e então para resfriá-la novamente, é necessário a aplicação das torres de resfriamento, como um dos métodos utilizados (FERREIRA, 2012; SAMPAIO, 2013; MARQUES, 2014).

O funcionamento das torres de resfriamento dá-se por meio de transferência de massa e calor, podem operar por convecção natural ou forçada (MARQUES, 2014; MORAN, 2009). A água quente é alimentada no topo da torre, que desce por meio da gravidade ou bicos pulverizadores, através do enchimento interno da torre, que facilita a distribuição da água por toda área de contato com o ar, responsável pela troca de calor. Esse ar pode ter escoamento contracorrente, corrente cruzada (ou uma combinação entre eles) com a água que está descendo. Por meio desse contato, entre a água e o ar, ocorre a troca de calor e massa, na qual parte da água evapora, ocorrendo o resfriamento (MATOS, 2017; MARQUES, 2014). A evaporação da água ocorre a partir do calor latente retirado da própria água que escoar pela torre, isso acontece porque as duas fases (vapor e líquido) em contato tendem a entrar em equilíbrio. Essa evaporação é responsável por 80% do resfriamento da água e a diferença de temperatura entre a água e o ar é responsável pelos outros 20% do resfriamento (CORTINOVIS e SONG, 2017).

As torres de resfriamento podem ser classificadas conforme três características, segundo Marques (2014):

- De acordo com o processo de dissipação de calor da água:

- Resfriamento evaporativo: resfriamento devido à evaporação de parte da água de recirculação do sistema, juntamente com a transferência de calor sensível da água para o ar.
- Resfriamento não-evaporativo: devido a temperatura da água ser muito alta, é necessária uma serpentina em contato com o ar, aspirado por ventiladores, para resfriá-la.
- Combinação entre resfriamento evaporativo e não-evaporativo: um só equipamento que possui as etapas de ambos os tipos de resfriamento.
- De acordo com o processo de fornecimento de ar:
 - Circulação natural: possuem tiragem natural, a movimentação do ar pode ser por meio dos ventos (torres atmosféricas) ou por diferenças de densidade (hiperbólicas).
 - Circulação forçada: possuem tiragem induzida ou forçada, nas quais o ar é aspirado por meio de venezianas colocadas na base da torre e passa pelo enchimento, em contracorrente com o escoamento da água, sendo impelido para cima com ajuda de um ventilador, e então expelido pelo topo da torre.
- De acordo com o tipo de escoamento do ar em relação ao da água:
 - Fluxo cruzado: o ar é aspirado por duas aberturas laterais e entra perpendicularmente em relação ao enchimento e a corrente de água.
 - Contracorrente: o ar entra abaixo do enchimento, na mesma direção e sentido oposto ao da alimentação da água quente. Essa configuração possui os processos de transferência de calor e de massa mais eficientes, que permite um melhor resfriamento.

Segundo Matos (2017) e Dossat (1994), citado por Ferreira (2012), as aplicações das torres de resfriamento mais comuns são em instalações frigoríficas, indústrias químicas (produtos químicos), indústrias alimentícias (como fábricas de laticínios, refinarias de óleos), indústrias automotivas, fábricas de borrachas, usinas de álcool, entre outros.

3 PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS

Segundo Gundersen (2000) e Relvas et al. (2000), para realizar a integração energética de um determinado processo, resumidamente, é necessário seguir quatro passos, são eles:

- Recolher os dados necessários, nos quais se obtém características sobre o processo e o sistema de utilidades. Nesses dados devem constar informações sobre cada corrente do processo e utilidades exteriores, como a temperatura inicial (T_i), a temperatura final (T_f), o fluxo mássico (\dot{m}), a calor específico médio (c_p), entalpia de vaporização (ΔH_{vap}) em caso de mudança de fase;
- Determinar indicadores energéticos de desempenho, como o consumo mínimo de utilidades necessárias para o processo, o número mínimo de unidades de troca térmica e a área global mínima de transferência de calor, por meio de técnicas como a análise de “*pinch*”, considerada a ferramenta mais utilizada em problemas de integração energética, devido a sua facilidade de aplicação; (NETO, 2005).
- Projetar uma rede de trocadores de calor que satisfaça os objetivos energéticos traçados na fase anterior, obedecendo as regras de construção;
- Otimizar a rede de trocadores de calor obtida, em termos estruturais e econômicos.

Para um melhor entendimento, os próximos tópicos contêm uma explicação detalhada da metodologia aplicada neste trabalho.

3.1 EQUILÍBRIO QUÍMICO DA REAÇÃO

Com o objetivo de determinar a conversão do reator a partir da estequiometria da reação, da temperatura e da pressão, foi utilizado o método termodinâmico de equilíbrio químico de uma única reação. A reação (apresentada na Eq. (2)) é processada a 350°C e pressão de 2 bar (este valor foi determinado a partir de dados encontrados na literatura, em comparações com os trabalhos de Tohăneanu et al. (2014), Llacta et al. (2015) e Turton et al. (2009), levando em consideração também, os conhecimentos previamente adquiridos sobre termodinâmica), sendo o reagente o álcool isopropílico e os produtos, a acetona e o gás hidrogênio. Entretanto, o reagente

entra diluído no reator, em uma fração molar de 0,65 em água, a qual age como inerte na reação (KORETSKY, 2014).

Com base na metodologia utilizada, buscou-se na literatura, os valores da energia de Gibbs padrão de formação ($\Delta g_{f,298}^\circ$) (kJ/mol) e da entalpia padrão de formação ($\Delta h_{f,298}^\circ$) (kJ/mol) para cada uma das substâncias que participam da reação. Com essas informações foi possível calcular energia de Gibbs de reação (Δg_{rxn}°) e a entalpia de reação (Δh_{rxn}°), para então ser calculada a constante de equilíbrio (K) a 25°C e em seguida para a temperatura de reação, a 350°C, utilizando as Eqs. (15), (16) e (17):

$$\Delta g_{rxn,298}^\circ = \sum v_i (\Delta g_{f,298}^\circ)_i \quad (15)$$

$$\Delta h_{rxn,298}^\circ = \sum v_i (\Delta h_{f,298}^\circ)_i \quad (16)$$

$$K_{298} = \exp\left(\frac{-\Delta g_{rxn,298}^\circ}{R \cdot 298,15}\right) \quad (17)$$

além dessas equações, é necessário levar em consideração a dependência da constante de equilíbrio de reação com a temperatura, assim como, a da entalpia de reação. A partir da capacidade calorífica de cada uma das substâncias que participam da reação, é possível quantificar essa dependência, apresentada pela Eq. (18) de forma simplificada:

$$\ln\left(\frac{K_T}{K_{298}}\right) = \left\{ \begin{array}{l} \left[\frac{-\Delta g_{rxn,298}^\circ}{R} + \Delta A(298,15) + \frac{\Delta B}{2}(298,15)^2 \right. \\ \left. + \frac{\Delta C}{3}(298,15)^3 - \frac{\Delta D}{298} + \frac{\Delta E}{4}(298,15)^4 \right] \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{298,15} \right) \\ + \Delta A \ln\left(\frac{T}{298,15}\right) + \frac{\Delta B}{2}(T - 298,15) \\ + \frac{\Delta C}{6}(T^2 - 298,15^2) \\ + \frac{\Delta D}{2}\left(\frac{1}{T^2} - \frac{1}{298,15^2}\right) + \frac{\Delta E}{12}(T^3 - 298,15^3) \end{array} \right\} \quad (18)$$

em que V_i é o coeficiente estequiométrico do componente i na reação, R é a constante dos gases ideais, T é a temperatura de reação, ΔA , ΔB , ΔC , ΔD e ΔE são apresentadas nas Eqs. (19), (20), (21), (22) e (23):

$$\Delta A = \sum v_i A_i \quad (19)$$

$$\Delta B = \sum v_i B_i \quad (20)$$

$$\Delta C = \sum v_i C_i \quad (21)$$

$$\Delta D = \sum v_i D_i \quad (22)$$

$$\Delta E = \sum v_i E_i \quad (23)$$

em que A, B, C, D e E são dados de capacidade calorífica, que foram encontrados na literatura e estão apresentados na Tabela 1 para as substâncias que participam da reação química (KORETSKY, 2014).

Tabela 1 – Valores das constantes para o cálculo da capacidade calorífica para isopropanol, acetona e gás hidrogênio.

	A	B	C	D	E
Isopropanol	2,19484	0,0333112	-0,000014665	1075,2	2,22E-09
Acetona	2,44989	0,0238323	-6,08E-06	15064,5	-6,21E-10
Gás hidrogênio	3,249	0,000422	0	8300	0

Fonte: KORETSKY, 2014.

O valor obtido para a constante de equilíbrio de reação a 350°C foi de 39,0091. Em seguida, foram determinados o número de mols (n_i) (*mol*) e as frações molares (y_i) em termos de grau de extensão de reação (ξ) para cada componente, de acordo com as Eqs.(24) e (25):

$$n_i = n_i^o + v_i \xi \quad (24)$$

$$y_i = \frac{n_i}{n_{total}} \quad (25)$$

em que, n_i^o é a número de mols inicial da substância i e n_{total} o número total de mols da corrente avaliada.

Em posse do número de mols e das frações molares, utilizou-se a Eq. (26), reescrevendo-a até a Eq. (29), de forma a se obter o grau de extensão de reação (ξ):

$$K = \prod (y_i)^{v_i} P \quad (26)$$

$$K = \frac{y_{Acetona} y_{H_2}}{y_{Isopropanol}} P \quad (27)$$

$$K = \left(\frac{\frac{\xi}{1,538 + \xi} \frac{\xi}{1,538 + \xi}}{\frac{1 - \xi}{1,538 + \xi}} \right) P \quad (28)$$

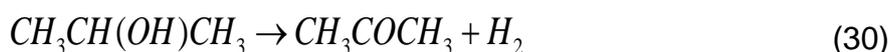
$$K = \frac{\xi^2}{(1 - \xi)(1,538 + \xi)} P \quad (29)$$

3.2 BALANÇO DE MASSA

3.2.1 Reator

Para o balanço de massa, arbitrou-se uma vazão molar equivalente a 136,4 kgmol/h na entrada do reator (Corrente 4). A escolha para esse dado foi em função de uma produção anual de acetona de aproximadamente 32.000 toneladas ao ano, dados esses comparados na literatura (TOHĂNEANU et al., 2014; LLACTA et al., 2015). A partir dos cálculos de equilíbrio químico da reação, encontrou-se uma conversão global de 0,98, nas condições de temperatura e pressão do reator. Em razão das possíveis alterações de temperatura e pressão no reator, é aceitável que a conversão final varie em uma faixa entre 90 e 98%, na qual apresentam valores teóricos e práticos. Devido a isso, optou-se por realizar os cálculos do processo, considerando a menor conversão admissível.

Os cálculos no reator partiram da vazão escolhida para a entrada do reator, junto com a fração molar de 65% de álcool isopropílico e 35% de água. Sendo assim, utilizou-se as Eqs. (30), (31) e (32) para encontrar a vazão molar dos componentes na entrada e saída do reator:



$$n_i = y_i \cdot n_{total} \quad (31)$$

$$n_i^{produtos} = X \cdot n_i^{reagentes} \quad (32)$$

em que y_i a fração molar da substância i na corrente desejada, n_i a vazão molar da substância i na corrente, n_{total} a vazão molar total da corrente, $n_i^{produtos}$ vazão molar da substância i pertencente ao produto da reação, X a conversão da reação e $n_i^{reagentes}$ vazão molar da substância i pertencente ao reagente da reação.

3.2.2 Tanque flash

O balanço de massa para o tanque flash foi realizado pela metodologia Rachford-Rice. Essa metodologia utiliza iterações, levando em consideração a constante de equilíbrio ideal como estimativa inicial e em seguida a constante de equilíbrio em prol das composições das fases no equilíbrio líquido-vapor.

A metodologia Rachford-Rice, segundo Neoschil e Leibovici (1995), inicia-se pela equação do balanço de massa por componente, para o tanque flash, mostrado na Eq. (33):

$$F = L + V \quad (33)$$

$$Fz_i = Lx_i + Vy_i \quad (34)$$

em que, F é a vazão de entrada no tanque flash ($kgmol/h$), L a vazão de saída líquida do tanque ($kgmol/h$) e V é a vazão de saída de vapor do tanque ($kgmol/h$), como foi calculada em base molar, z_i representa a fração molar da entrada do tanque, x_i a fração molar da saída de líquido do tanque e y_i a fração molar da saída de vapor do tanque flash, todas elas referentes ao componente i . Em seguida, se leva em consideração o equilíbrio de fases dentro do tanque flash, no qual se tem a constante de equilíbrio (K_i) dada pela Eq.(35):

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} \quad (35)$$

Faz-se então os rearranjos corretos utilizando as Eqs. (33), (34) e (35), até chegar na expressão para a fração molar de saída no líquido (x_i) apresentada na Eq.(36):

$$x_i = \frac{z_i}{1 + \frac{V}{F}(K_i - 1)} \quad (36)$$

Onde a fração $\frac{V}{F}$ representa a porcentagem da vazão de entrada que sai como vapor no tanque flash. Tendo em conta alguns conceitos, como os das Eqs. (37), (38) e (39):

$$\sum x_i = 1 \quad (37)$$

$$\sum y_i = \sum K_i x_i = 1 \quad (38)$$

$$\sum (y_i - x_i) = 0 \quad (39)$$

juntamente com os arranjos necessários, tem-se a Eq. (40), nomeada Rachford-Rice (NEOSCHIL e LEIBOVICI, 1995):

$$\sum \frac{z_i(K_i - 1)}{1 + \frac{V}{F}(K_i - 1)} = 0 \quad (40)$$

A partir dessa equação começa o processo de iteração, com a utilização da extensão solver no software Excel. A primeira iteração utiliza a equação de Raoult, para gás ideal e solução ideal, a fim de encontrar uma nova relação com a constante de equilíbrio, como é visto nas Eqs. (41) e (42):

$$y_i P = x_i P_i^{sat} \quad (41)$$

$$K_i = \frac{P_i^{sat}(T)}{P} \quad (42)$$

em que P é a pressão do sistema, P_i^{sat} é a pressão de vapor para o composto i (*bar*), esta pressão é calculada pela equação de Antoine, a qual está em função da temperatura e suas constante, como mostra a Eq. (43):

$$P_i^{sat}(T) = \exp\left(A - \frac{B}{C + T}\right) \quad (43)$$

as constantes A , B e C foram encontradas na literatura para cada uma das substâncias (água, álcool isopropílico, acetona e gás hidrogênio). Para os cálculos foram considerados a temperatura e a pressão que entram no tanque flash, sendo uma temperatura de 25°C e uma pressão de 1,5 bar. Os valores das constantes para a temperatura de 25°C estão apresentados na Tabela 2 (KORETSKY, 2014).

Tabela 2 – Constantes da Equação de Antoine a 25°C para o Isopropanol, Acetona, Gás hidrogênio e Água.

	A	B	C
Isopropanol	12,0727	3640,2	-53,54
Acetona	10,0311	2940,46	-35,93
Gás hidrogênio	7,0131	164,9	3,19
Água	11,6834	3816,44	-46,13

Fonte: KORETSKY, 2014.

Posteriormente, com o mesmo valor de K_i é calculada as novas frações molares na saída de vapor e líquido para cada composto (x_i e y_i). E assim, baseando-se na teoria do equilíbrio líquido-vapor e com as novas concentrações, com a finalidade de encontrar uma nova relação para a constante de equilíbrio, foi utilizado a referência de Lewis/Randall, dada pela Eq. (44):

$$y_i \hat{\phi}_i^V P = x_i \gamma_i^L f_i^o \quad (44)$$

em que, o $\hat{\phi}_i^V$ é o coeficiente de fugacidade da substância i na fase vapor, o γ_i^L é o coeficiente de atividade da substância i na fase líquida, P é a pressão da corrente (*bar*) e f_i^o é a fugacidade da substância i pura no estado de referência.

Porém, foi adotada a abordagem phi-phi, com o objetivo de simplificar a Eq. (44). Essa abordagem remete-se ao cálculo dos coeficientes de fugacidade para a fase líquida ($\hat{\phi}_i^L$) e a fase vapor ($\hat{\phi}_i^V$), como demonstra a Eq. (45):

$$y_i \hat{\phi}_i^V P = x_i \hat{\phi}_i^L P \quad (45)$$

$$\hat{\phi}_i^V y_i = \hat{\phi}_i^L x_i \quad (46)$$

realizando os arranjos necessários, substituindo na Eq. (35), encontrou-se a Eq. (47):

$$K_i = \frac{\hat{\phi}_i^L}{\hat{\phi}_i^V} \quad (47)$$

Os cálculos, para encontrar os coeficientes de fugacidade, foram realizados utilizando a equação de estado de Peng-Robinson da extensão XSEOS no software Excel. Para isso, são necessários alguns dados específicos de cada uma das substâncias, como a temperatura crítica (T_c), em Kelvin, a pressão crítica (P_c), em

bar, o fator acêntrico de Pitzer (ω) e também a constante universal dos gases (R). Essas constantes foram obtidas na literatura e estão apresentadas na Tabela 3, para cada uma das substâncias presentes no equilíbrio líquido-vapor (KORETSKY, 2014).

Tabela 3 – Dados de temperatura crítica (T_c), pressão crítica (P_c) e fator acêntrico de Pitzer (ω) para o isopropanol, a acetona, gás hidrogênio e água.

	$T_c(K)$	$P_c(bar)$	ω
Isopropanol	508,3	47,62	0,624
Acetona	508,1	47,01	0,309
Gás hidrogênio	33,2	12,97	-0,22
Água	647,3	220,48	0,344

Fonte: KORETSKY, 2014.

Posteriormente, a constante K_i foi recalculada, dando a sequência ao processo de iteração até que o mínimo possível fosse atingido como resultado da Eq. (40) (KORETSKY, 2014).

3.2.2.1 Determinação dos parâmetros de Peng-Robinson

Para a determinação dos coeficientes de fugacidade na fase líquida e na fase vapor para as substâncias que compõe a alimentação do tanque flash, foram calculados parâmetros de interação em misturas binárias envolvendo cada uma dessas substâncias entre elas mesmas. Foram obtidos dados de equilíbrio líquido-vapor contidos no *Dortmund Data Bank* e demais literaturas, para as misturas água – acetona, acetona – isopropanol, hidrogênio – acetona, isopropanol – água e hidrogênio – água (BARANENKO e KIROV, 1989; REINDERS e MINJER, 1947; FRESHWATER e PIKE, 1967; BRUNJES e BOGART, 1943; BRUNNER, 1985). Em seguida, também pelo método phi-phi, apresentado na Eq. (56), pela extensão Solver do software Excel e utilizando as equações de Peng-Robinson, foram calculados os parâmetros de interação, a fim de se correlacionar os dados experimentais.

3.2.2.2 Balanço de massa do tanque flash pelo software Petrosim

O balanço de massa para o tanque flash também foi resolvido utilizando o software Petrosim, no qual foi possível obter valores semelhantes aos calculados manualmente. Para o desenvolvimento no software, foi escolhido como pacote de bases de cálculo, em *fluid package*, o modelo NRTL – PR, no qual utiliza a metodologia NRTL (*Non Random two-liquid*) para a fase líquida e modelo Peng-Robinson para o vapor, a fim de calcular o equilíbrio líquido-vapor presente no tanque flash.

Foi selecionado o tanque de separação, contido no menu do software e dados como a composição da corrente de entrada, temperatura (25°C) e pressão (1,5 bar) de operação, foram fornecidas para a solução e convergência do tanque. A corrente de entrada no tanque flash é a Corrente 8, conforme o fluxograma do processo de produção da acetona na Figura 1, a corrente de saída da fase líquida é a Corrente 9 e de saída da fase vapor é a Corrente 10. O software é capaz de fornecer, além da composição das correntes de saída e suas respectivas vazões, dados de temperatura, pressão e entalpia dessas correntes, no entanto esses valores serão posteriormente apresentados na discussão de cálculos referentes ao balanço de energia do processo.

3.2.3 Torre de absorção (Scrubber)

Para a realização do balanço de massa na torre de absorção, foi utilizado também o software Petrosim, devido a dificuldades encontradas em cálculos manuais. Assim como para o tanque flash, foi escolhido o pacote de bases de cálculo NRTL – PR para a realização dos cálculos de equilíbrio líquido-vapor presentes na torre. Inicialmente, foi escolhida uma vazão molar para a corrente de água na entrada da torre, de 130 kgmol/h, esse valor foi encontrado por comparações de estudos na literatura e por testes realizados no próprio software. Essa corrente de água, pelo fluxograma, contido na Figura 1, provém de um reciclo da última coluna de destilação da planta, a Corrente 20. Para a realização desse reciclo, foi necessário a utilização de um separador de correntes, pois a água de resíduo produzida no processo, possui uma vazão molar maior que a utilizada pela torre de absorção (Tabela 15). A fim de se obter o valor ideal, foi considerado uma fração de 80% da Corrente 18.

3.2.4 Coluna da acetona

Também com a utilização do software Petrosim foi realizado o balanço de massa para a coluna da acetona. Selecionou-se uma coluna com refluxo do condensador e do refeedor, com a condensação parcial da corrente que sai no topo, obtendo uma corrente de vapor (Corrente 16) e uma corrente de produto líquido (Corrente 17), além da corrente de fundo, de fase líquida. O número de pratos também precisou ser determinado com a escolha dessa coluna, e segundo Tohăneanu, et al. (2014), foram necessários 20 pratos para que essa coluna operasse com melhores resultados.

Com a utilização desse tipo de coluna, foi necessário aplicar três hipóteses para que fosse possível a sua convergência: taxa de refluxo do condensador, vazão molar da corrente de vapor do condensador (Corrente 16) e vazão molar do destilado (Corrente 17). Para a vazão molar da corrente de vapor do condensador, foi determinada uma vazão igual a de entrada de gás hidrogênio na corrente de alimentação (Corrente 14), visando que o máximo possível de hidrogênio possa ser retirado do sistema. Enquanto, para a vazão molar do destilado, foi determinada uma hipótese de vazão um pouco superior ao da entrada de acetona na coluna (Corrente 14), também com o objetivo da corrente do destilado (Corrente 17) conter a maior fração possível de acetona e a menor fração possível na corrente de fundo da coluna (Corrente 15). A taxa de refluxo foi determinada por tentativa e erro, variou-se o valor até atingir um máximo possível de vazão molar na corrente do destilado, visando a produção do produto principal, a acetona, sendo obtida em maior quantidade no destilado do que na corrente de fundo, sem que extrapolasse o possível.

3.2.5 Coluna do isopropanol

O balanço de massa para a coluna do isopropanol também é calculado pelo software Petrosim, com o mesmo fim de simplificar a resolução do problema. Para isso, uma coluna com refluxo do condensador e do refeedor é escolhida, porém, diferente da coluna da acetona, esta possui condensação total na saída de topo, a qual tem a retirada da Corrente 21. Enquanto que a corrente de fundo, possuindo água, será parcialmente reutilizada como reciclo na torre de absorção, assim, parte da Corrente 18, será encaminhada como reciclo, na Corrente 19 e parte será

eliminada como água residual (Corrente 20). Tohăneanu, et al. (2014), para que essa coluna tenha uma boa eficiência no software, indica que tenha o total de 12 pratos em seu interior.

Para a conversão dessa coluna foram necessárias apenas duas hipóteses iniciais, entre elas a taxa de refluxo do condensador e a vazão molar de condensado que é produzido na saída do topo. Para a vazão molar de condensado foi calculada a vazão molar de álcool isopropílico na alimentação e utilizou-se como estimativa inicial, em prol de ter o melhor resultado possível na saída de reciclo para o isopropanol. Dessa forma, foi encontrado uma vazão um pouco maior com melhores resultados de vazão molar de isopropanol no condensado, mesmo que diluído em água. Enquanto que o valor da taxa de refluxo foi avaliado via tentativa e erro, dando estimativas que fossem melhorando ainda mais a vazão do produto principal.

3.2.6 Tanque de mistura

Para os cálculos no tanque de mistura, utilizou-se a equação do balanço de massa, definida pela Eq. (10), considerando que o sistema opera em regime estacionário e sem reação química, ou seja, sem geração ou consumo dos elementos. Dessa forma, em termos molares obteve-se a Eq. (48):

$$n_E = n_S \quad (48)$$

em que, n_E é número de mols que entra no sistema e n_S é número de mols que sai do sistema. Substituindo em função do tanque de mistura, seguindo o fluxograma apresentado na Figura 1, tem-se que:

$$n_1 + n_2 + n_{22} = n_3 \quad (49)$$

Pela Eq. (49), tem-se que n_1 é a vazão molar da Corrente 1, n_2 é a vazão molar da Corrente 2, n_{22} é a vazão molar da Corrente 22 e n_3 é a vazão molar da corrente de saída do tanque (Corrente 3), como são apresentadas pelo fluxograma, na Figura 1.

3.3 BALANÇO DE ENERGIA

3.3.1 Definições de pressão e temperatura

O balanço de energia do processo começou pelas definições de pressão e temperatura para cada corrente. Para isso, foi preciso fazer a escolha manual desses parâmetros para algumas correntes do processo, utilizando como base os autores Tohăneanu, et al. (2014) e Llacta et al. (2015). Entre essas correntes estão as de alimentação do sistema (Correntes 1 e 2), as correntes de entrada no reator (Corrente 4), corrente de saída do reator (Corrente 6), sendo definida pela temperatura de reação, corrente de entrada no tanque flash (Corrente 8), corrente de entrada da coluna de destilação da acetona (Corrente 14) e a corrente de descarte do efluente (Corrente 19). Além disso, para as correntes restantes, as temperaturas e pressões foram determinadas por meio do balanço molar do processo, no software Petrosim.

3.3.2 Cálculos de capacidade calorífica e variação de entalpia

Segundo Liporace et al. (2004), o método ideal para se calcular a constante de calor específico é dividir as correntes em três subcorrentes, sendo elas, parte líquida, parte de mistura (líquido e vapor) e vapor. Para isso, estima-se o ponto de bolha e ponto de orvalho para cada uma dessas correntes que atuam como o limite para essa divisão. Para cada uma das subcorrentes, encontra-se um C_p efetivo e uma variação de entalpia.

Para o cálculo da capacidade calorífica na fase vapor, foi utilizada a Eq. (8), que considera o comportamento de um gás ideal. Para o cálculo da capacidade calorífica na fase líquida, utilizou-se a Eq. (50):

$$C_p = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 \quad (50)$$

em que A , B , C , D e E são as constantes de capacidade calorífica para cada componente na fase líquida e T é a temperatura da corrente (GREEN e PERRY, 2007). Nessa fase, não é considerado hidrogênio como componente na mistura para a realização dos cálculos, uma vez que este componente se apresenta geralmente em fase gasosa. Nas Tabelas 4 e 5 encontram-se os dados das constantes de capacidade calorífica na fase vapor e líquida, respectivamente, para a acetona, o álcool isopropílico, o gás hidrogênio e a água.

Tabela 4 – Constantes de capacidade calorífica para as correntes na fase vapor.

	A	B	C	D	E
Acetona	2,44989	0,0238323	-6,08E-06	15064,5	-6,21E-10
Isopropanol	2,19484	0,0333112	-0,000014665	1075,2	2,22E-09
Gás hidrogênio	3,249	0,000422	0	8300	0
Água	3,47	0,00145	0	12100	0

Fonte: KORETSKY, 2014.

Tabela 5 – Constantes de capacidade calorífica para as correntes na fase líquida.

	A	B	C	D	E
Acetona	135600	-177	0,2837	-0,000689	0
Isopropanol	471710	-4172,1	14,745	-0,0144	0
Água	276370	-2090,1	8,125	-0,014116	9,37E-06

Fonte: GREEN e PERRY, 2007.

No entanto, a capacidade calorífica da mistura (líquido/vapor) foi calculada considerando as taxas de calor total dos trocadores de calor (\dot{Q}) retirados/fornecidos para cada uma das correntes. Esses valores foram calculados pelo software Petrosim, dos quais foram subtraídos os valores da variação de entalpia para subcorrente líquida e/ou variação de entalpia para a subcorrente de vapor. Desta forma obtiveram-se as variações de entalpia para as subcorrentes da mistura líquido/vapor. Para encontrar os valores da variação de entalpia para as demais subcorrentes, utilizou-se a Eq. (6), em termos de vazão molar, assim como para calcular a constante de capacidade calorífica para a subcorrente da mistura (líquido/vapor) (Tabela 20). A variação de temperatura, aplicado na Eq. (6), para a subcorrente da mistura, foi calculado considerando a temperatura do ponto de orvalho (P.O) e a temperatura ponto de bolha (P.B) (Tabela 20) (LIPORACE et al., 2004).

Além disso, para a realização dos cálculos, foram necessários os dados de fração molar dos componentes em cada uma das correntes escolhidas, assim como, os dados de vazão molar (\dot{n}) das mesmas correntes. Os dados necessários para realização dos cálculos de capacidade calorífica e variação de entalpia são apresentados nas Tabelas 6 e 7.

Tabela 6 – Frações molares dos componentes para as Correntes 3-4, 6-8, 13-14, 18-19.

Correntes	Frações molares			
	$y_{Água}$	$y_{Isopropanol}$	$y_{Acetona}$	$y_{Gás\ Hidrogênio}$
3-4	0,35	0,65	0	0
6-8	0,2208	0,0410	0,3691	0,3691
13-14	0,6913	0,0335	0,2751	0,0001
18-19	0,9984	0,0016	0	0

Tabela 7 – Dados de variação de temperatura, ponto de orvalho e de bolha e a vazão molar correspondente para as Correntes 3-4, 6-8, 13-14, 18-19.

Correntes	Intervalo de temperatura (°C)	P.O (°C)	P.B (°C)	\dot{n} (kgmol / h)	\dot{Q} (kW)
3-4	31,66 – 200	98,133	97,781	136,40	2205
6-8	25 – 350	79,702	-	216,19	-2413
13-14	29,68 – 79,51	-	72,551	265,96	1000
18-19	36,66 – 111,61	-	-	177,24	-280

Fonte: KORETSKY, 2014.

Em posse dos dados, calculou-se o C_p para cada uma das substâncias contidas nas correntes, utilizando 8,3145 J/(mol.K), como valor para a constante universal dos gases ideais (R) (KORETSKY, 2014). Em seguida, foi realizado o somatória das frações molares multiplicadas pelo calor específico de cada componente da mistura, utilizando a Eq. (51), para encontrar o $C_p^{mistura}$:

$$C_p^{mistura} = \sum y_i C_{pi} \quad (51)$$

em que y_i é a fração molar do componente i na mistura, e C_{pi} é o calor específico do componente i . (SMITH, et al., 2007). Além disso, para obter o termo $\dot{m}C_p$, multiplicou-se pela vazão molar (\dot{n}) (kgmol / s), e como já descritos anteriormente, foram calculados os ΔH para cada subcorrente.

3.4 INTEGRAÇÃO ENERGÉTICA

3.4.1 Cascata de calor

A partir dos dados adquiridos pelo balanço enérgico e utilizando as Eqs. (11) e (12), foram calculadas as temperaturas corrigidas para as subcorrentes frias e quentes, como o primeiro passo da cascata de calor (RELVAS et al., 2000; FALEIROS; LUIZ, 2014). Em seguida, foi realizado o segundo passo da cascata de calor, o qual calcula a energia em excesso ou déficit dentro de cada variação de temperatura corrigida, postas em ordem crescente, essa energia é dada em variação de entalpia, e foi calculada pela Eq. (13).

3.4.2 Curvas compostas

Para a construção das curvas compostas, foi necessário plotar, primeiramente, cada variação de temperatura relacionada às variações de entalpia para cada uma das subcorrentes. Em seguida, foram calculadas as novas variações de temperatura, utilizando em ordem crescente, a temperatura inicial e final de cada subcorrente, tanto para a construção da curva composta quente, como fria. Para encontrar as novas variações de entalpia, calculou-se primeiramente a capacidade calorífica para cada novo intervalo de temperatura, somando os $\dot{n}C_p$ de cada corrente que se sobreponha naquele determinado intervalo.

3.4.3 Rede de trocadores de calor

Para a montagem da rede de trocadores de calor, foi construído um diagrama que representa todas as subcorrentes, com suas respectivas variações de temperatura, e o valor de suas capacidades caloríficas. Foram calculadas as temperaturas referentes a região *pinch*, somando-se e subtraindo-se a metade da diferença mínima de temperatura escolhida, de 10°C, na temperatura do ponto de estrangulamento.

Para o calcular a variação de temperatura para as correntes que ultrapassam a região do ponto de estrangulamento, dividiu-se em métodos para correntes quentes

e frias. Para as correntes quentes, essa variação é calculada subtraindo da temperatura inicial até a temperatura mais alta da região *pinch* (79,7°C), ao contrário das correntes frias, que se subtrai a temperatura mais baixa da região *pinch* (69,7°C). Para as correntes que não atravessam a região de estrangulamento, basta fazer a variação da sua temperatura inicial da final (RELVAS et al., 2002; TURTON et al., 2009).

Assim, dividiu-se os cálculos da rede em duas partes, a área acima da região *pinch* e a área abaixo. Segundo Relvas, et al. (2002) e Turton, et al. (2009), há algumas restrições para criar as possibilidades, por tentativa e erro, tanto para a região acima do *pinch*, como abaixo. Nas Eqs. (52) e (53), são definidas as regras, que devem ser seguidas, para a região acima do ponto de estrangulamento:

$$N_Q \leq N_F \quad (52)$$

$$\dot{n}C_{p,Q} \leq \dot{n}C_{p,F} \quad (53)$$

em que N_Q é o número de correntes quentes, N_F é o número de correntes frias, $\dot{n}C_{p,Q}$ é valor da capacidade calorífica da corrente quente avaliada, enquanto $\dot{n}C_{p,F}$ da corrente fria avaliada. Nas Eqs. (54) e (55), são definidas as regras para a região abaixo do ponto de estrangulamento:

$$N_Q \geq N_F \quad (54)$$

$$\dot{n}C_{p,Q} \geq \dot{n}C_{p,F} \quad (55)$$

Dessa forma, todas as tentativas de integrar as correntes, devem satisfazer essas definições. Além disso, todos os cálculos de variação de entalpia, realizados na montagem da rede de trocadores de calor, utilizaram a Eq. (6).

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 EQUILÍBRIO QUÍMICO DA REAÇÃO

Pela reação apresentada na Eq. (27), na qual a fração molar do álcool é 0,65, considera-se 1 mol de álcool isopropílico como base de cálculo, uma vez que isso não irá interferir no cálculo do equilíbrio, e por estequiometria tem-se 0,538 mol de água. As Eqs. (56), (57), (58), (59), (60), (61), (62) e (63) representam as substituições necessárias realizadas nas Eqs. (24) e (25):



$$n_{H_2O} = 0,538 \quad (57)$$

$$n_{Isopropanol} = 1 - \xi \quad (58)$$

$$n_{Acetona} = \xi \quad (59)$$

$$n_{Gás\ hidrogênio} = \xi \quad (60)$$

$$n_{Total} = 1,538 + \xi \quad (61)$$

$$y_{Isopropanol} = \frac{1 - \xi}{1,538 + \xi} \quad (62)$$

$$y_{Acetona} = \frac{\xi}{1,538 + \xi} \quad (63)$$

$$y_{Gáshidrogênio} = \frac{\xi}{1,538 + \xi} \quad (64)$$

Em seguida, utilizando a Eq. (29) em que, $K = 39,0091$ e $P = 2bar$, obteve-se $\xi = 0,98$. Esse valor representa a conversão de reagentes em produtos para a reação da Eq. (56), sendo esta, a conversão desejada para o reator do processo (KORETSKY, 2014).

4.2 BALANÇO DE MASSA

4.2.1 Reator

Os resultados do balanço de massa para o reator de oxidação estão dispostos na Tabela 8 (KORETSKY, 2014).

Tabela 8 – Resultados do balanço de massa para o Reator.

Dados	Corrente 4	Corrente 6
$n_{\text{Água}}$ (kgmol / h)	47,7400	47,7400
$y_{\text{Água}}$	0,3500	0,2208
$n_{\text{Isopropanol}}$ (kgmol / h)	88,6600	8,8660
$y_{\text{Isopropanol}}$	0,6500	0,0410
n_{Acetona} (kgmol / h)	0	79,7940
y_{Acetona}	0	0,3691
$n_{\text{Gás Hidrogênio}}$ (kgmol / h)	0	79,7940
$y_{\text{Gás Hidrogênio}}$	0	0,3691
n_{Total} (kgmol / h)	136,4000	216,1940

Ao fazer uma breve análise da Tabela 8, é possível notar que vazão da corrente de saída do reator (Corrente 6), aumentou significativamente quando comparada a corrente de alimentação do reator (Corrente 4), isso se dá ao fato de que a reação de oxidação do isopropanol (Eq. 2) possui uma estequiometria de um reagente formando dois produtos, sendo eles, acetona e gás hidrogênio. Como também conclui-se a mesma fração molar para ambos os produtos formados.

4.2.2 Tanque flash

Ao acompanhar o processo pelo fluxograma apresentado na Figura 1, logo que sai do reator, a Corrente 6 passa por trocadores de calor, com o objetivo de resfriá-la e então ser encaminhada para o tanque Flash, renomeando a corrente para Corrente 8. Em posse dos dados de vazão, para cada um dos componentes, da Corrente 8, juntamente com a nova temperatura, após a saída dos resfriadores, e a nova pressão, a qual foi considerada uma pequena queda no seu valor, calculou-se o balanço de massa para o tanque flash. A partir da metodologia, primeiramente encontrou-se os valores de pressão de saturação e constantes de equilíbrio para cada um dos

componentes da corrente de alimentação (Corrente 8), os quais estão dispostos na Tabela 9.

Tabela 9 – Pressões de saturação (P_i^{sat} (bar)) e constantes de equilíbrio (K_i) para o isopropanol, acetona, gás hidrogênio e água.

	P_i^{sat} (bar)	K_i
Isopropanol	0,0603	0,0402
Acetona	0,3065	0,2043
Gás hidrogênio	642,8283	428,5522
Água	0,0314	0,0209

Com a obtenção desses dados, seguiram-se os passos do cálculo do balanço de massa para o tanque flash, dessa forma, os resultados de vazão molar (n_i) e fração molar (y_i e x_i), para as correntes de líquido e vapor e seus componentes, são mostrados na Tabela 10.

Tabela 10 – Resultados do balanço de massa para o tanque Flash, calculados manualmente.

Dados	Corrente 8	Corrente 9	Corrente 10
$n_{\text{Água}}$ (kgmol / h)	47,7400	46,4392	1,3008
$y_{\text{Água}}$	0,2208	0,3768	0,0140
$n_{\text{Isopropanol}}$ (kgmol / h)	8,8660	8,2475	0,6184
$y_{\text{Isopropanol}}$	0,0410	0,0669	0,0066
n_{Acetona} (kgmol / h)	79,7940	68,5319	11,2621
y_{Acetona}	0,3691	0,5560	0,1212
$n_{\text{Gás Hidrogênio}}$ (kgmol / h)	79,7940	0,0317	79,7623
$y_{\text{Gás Hidrogênio}}$	0,3691	0,0003	0,8582
n_{Total} (kgmol / h)	216,1940	123,2503	92,9437

Como é possível observar pela Figura 1, a partir do tanque flash obtém-se duas saídas, a saída da corrente líquida (Corrente 9) e a saída de vapor (Corrente 10). Pela Tabela 10, percebe-se que a mistura de água, isopropanol, acetona e gás hidrogênio, a 25°C e 1,5 bar divide-se em maior quantidade na saída de líquido, tendo a acetona e água como principais componentes dessa corrente, enquanto que na saída de vapor

(Corrente 10), se sobressai a fração de gás hidrogênio, de aproximadamente 85% da corrente.

4.2.2.1 Determinação dos parâmetros de Peng-Robinson

Pela metodologia, determinou-se os parâmetros de Peng-Robinson para a sua aplicação nos cálculos do balanço de massa para o tanque flash, assim, os resultados obtidos para os parâmetros de interação para misturas binárias são mostrados na Tabela 11.

Tabela 11 – Resultados dos parâmetros de interação entre as substâncias para as misturas binárias: água – acetona, acetona – isopropanol, hidrogênio – acetona, isopropanol – água e hidrogênio – água.

Interações	Isopropanol	Acetona	Gás hidrogênio	Água
Isopropanol	-	0,0423	-	-0,1765
Acetona	0,0423	-	0,3916	-0,2360
Gás hidrogênio	-	0,3916	-	-1,1976
Água	-0,1765	-0,2360	-1,1976	-

4.2.2.2 Balanço de massa do tanque flash pelo software Petrosim

O balanço de massa para o tanque flash também foi resolvido por meio do software Petrosim, a fim de se conferir os resultados obtidos manualmente. Dessa forma, a Tabela 12 apresenta os valores encontrados pelo software para o balanço de massa do tanque flash.

Tabela 12 – Resultados do balanço de massa para o tanque Flash, calculados pelo software Petrosim.

Dados	Corrente 8	Corrente 9	Corrente 10
$n_{\text{Água}} \text{ (kgmol / h)}$	47,7400	46,1703	1,5485
$y_{\text{Água}}$	0,2208	0,3833	0,0162
$n_{\text{Isopropanol}} \text{ (kgmol / h)}$	8,8660	8,4111	0,4566
$y_{\text{Isopropanol}}$	0,0410	0,0698	0,0048
$n_{\text{Acetona}} \text{ (kgmol / h)}$	79,7940	65,8585	13,9526
y_{Acetona}	0,3691	0,5467	0,1457

$n_{Gás\ Hidrogênio} (kgmol / h)$	79,7940	0,0201	79,7707
$y_{Gás\ Hidrogênio}$	0,3691	0,0002	0,8333
$n_{Total} (kgmol / h)$	216,1940	120,4600	95,7320

Ao comparar os valores obtidos pelo software Petrosim, na Tabela 12, com os valores calculados manualmente pela metodologia Rachford-Rice, é possível observar uma boa aproximação entre eles. Com isso, é possível comprovar que essa metodologia pode ser implementada para a resolução de problemas reais em tanques flash nas indústrias.

4.2.3 Torre de absorção (Scrubber)

A partir do fluxograma, apresentado na Figura 1, é possível observar que a corrente de vapor (Corrente 10), que sai do tanque flash com uma grande quantidade de gás hidrogênio, entra em uma torre de absorção (Scrubber) para o lançamento desse gás no meio ambiente. Essa torre tem como objetivo obter a máxima absorção da acetona em água (Corrente 20), para que se tenha o mínimo de acetona perdida na remoção desse gás, e com isso diminuir a poluição do ar e aumentar a eficiência da planta, obtendo uma maior fração de produto final. Essa Corrente 19 é reciclo do produto de fundo da Coluna do isopropanol.

Implementando o descrito na metodologia, realizou-se o balanço de massa para a torre de absorção a partir do software Petrosim e com isso, os resultados obtidos estão dispostos na Tabela 13.

Tabela 13 – Resultados do balanço de massa para a torre de absorção, calculados pelo software Petrosim.

Dados	Corrente 10	Corrente 11	Corrente 12	Corrente 20*
$n_{Água} (kgmol / h)$	1,5485	137,6833	5,7188	141,8604
$y_{Água}$	0,0162	0,9463	0,0619	0,9975
$n_{Isopropanol} (kgmol / h)$	0,4566	0,5002	0,3065	0,3494
$y_{Isopropanol}$	0,0048	0,0034	0,0033	0,0025
$n_{Acetona} (kgmol / h)$	13,9526	7,3130	6,6396	0,0001
$y_{Acetona}$	0,1457	0,0503	0,0718	0,0000

$n_{Gás\ Hidrogênio} (kgmol / h)$	79,7707	0,0035	79,7701	0,0000
$y_{Gás\ Hidrogênio}$	0,8333	0,0000	0,8630	0,0000
$n_{Total} (kgmol / h)$	95,7320	145,5000	92,4350	142,2100

*Corrente de reciclo proveniente da destilação do isopropanol.

A partir dos resultados da Tabela 13 percebe-se que praticamente todo o gás hidrogênio é lançado para fora do processo, pela Corrente 12, por outro lado, boa parte da acetona que entra na torre de absorção é recuperada na corrente de saída de líquido (Corrente 11). Toda a água que é utilizada com absorvente, no scrubber, segue pela Corrente 11 para as próximas etapas do processo, junto dos demais componentes, até ser produto de fundo da Coluna do isopropanol, com quase 100% de pureza e retornar à torre de absorção.

4.2.4 Coluna da acetona

Após o tanque flash e torre de absorção, as correntes de saída na fase líquida de ambos, a Corrente 9 e a Corrente 11, respectivamente, se juntam na Corrente 14, como é mostrado no fluxograma do processo, na Figura 1. Essa corrente é a entrada para a coluna de destilação da acetona, a qual tem como objetivo a retirada do principal produto (acetona) pelo topo, seguindo da sua condensação, na Corrente 17, e o restante, contendo praticamente água e isopropanol sendo retirados pela corrente de líquido, na Corrente 15. A Corrente 16 é a retirada do resto de gás hidrogênio que ainda havia no sistema e é lançada para a atmosfera, assim como a Corrente 12.

Os resultados obtidos pelo balanço de massa da coluna de destilação da acetona estão dispostos na Tabela 14.

Tabela 14 – Resultados do balanço de massa para a coluna da acetona, calculados pelo software Petrosim.

Dados	Corrente 14	Corrente 15	Corrente 16	Corrente 17
$n_{Água} (kgmol / h)$	183,8534	181,5944	0,0003	2,2509
$y_{Água}$	0,6913	0,9500	0,0147	0,0301
$n_{Isopropanol} (kgmol / h)$	8,9113	8,8841	0,0000	0,0272
$y_{Isopropanol}$	0,0335	0,0465	0,0001	0,0004

$n_{Acetona}$ (kgmol / h)	73,1717	0,6715	0,0142	72,4843
$y_{Acetona}$	0,2751	0,0035	0,6012	0,9693
$n_{Gás Hidrogênio}$ (kgmol / h)	0,0237	0,0000	0,0091	0,0150
$y_{Gás Hidrogênio}$	0,0001	0,0000	0,3837	0,0002
n_{Total} (kgmol / h)	265,9600	191,1500	0,0246	74,7800

Na Tabela 14 encontra-se o dado mais importante de todo o processo dos cálculos de balanço de massa, que é a vazão de acetona na corrente de produto de topo para a coluna de destilação da acetona (Corrente 17). Dessa forma, conclui-se que esse processo, pode produzir 72,4843 kgmol/h de acetona a partir de uma vazão inicial de 88,66 kgmol/h de isopropanol na corrente de alimentação do reator de oxidação. Além disso, percebe-se que a pureza da acetona obtida como produto é de aproximadamente 97%. Outro fator importante é a remoção do restante do gás hidrogênio que restava no processo, por meio da condensação parcial do produto de topo da coluna, assim, o gás é liberado pela Corrente 16 numa vazão bem pequena.

4.2.5 Coluna do isopropanol

A corrente de fundo que sai da coluna da acetona (Corrente 15), serve como corrente de alimentação para a coluna de destilação do álcool isopropílico, assim como é apresentado no fluxograma do processo de produção, na Figura 1. Essa corrente possui uma grande fração de água, devido a alimentação na torre de absorção, e o objetivo dessa coluna é retirar essa água (Corrente 18) e retornar ao início do processo a parte do isopropanol, como reciclo na corrente de alimentação do reator (Corrente 22).

Os resultados obtidos pelo balanço de massa da coluna de destilação do isopropanol estão dispostos na Tabela 15.

Tabela 15 – Resultados do balanço de massa para a coluna do isopropanol, calculados pelo software Petrosim.

Dados	Corrente 15	Corrente 18	Corrente 22
$n_{Água}$ (kgmol / h)	181,5944	176,9607	4,6307
$y_{Água}$	0,9500	0,9984	0,3330

$n_{\text{Isopropanol}} \text{ (kgmol / h)}$	8,8841	0,2793	8,6050
$y_{\text{Isopropanol}}$	0,0465	0,0016	0,6188
$n_{\text{Acetona}} \text{ (kgmol / h)}$	0,6715	0,0002	0,6714
y_{Acetona}	0,0035	0,0000	0,0483
$n_{\text{Gás Hidrogênio}} \text{ (kgmol / h)}$	0,0000	0,0000	0,0000
$y_{\text{Gás Hidrogênio}}$	0,0000	0,0000	0,0000
$n_{\text{Total}} \text{ (kgmol / h)}$	191,1500	177,2400	13,9070

Analisando a Tabela 15, percebe-se que a vazão da corrente de fundo da coluna (Corrente 18) possui uma vazão molar (177,24 kgmol/h) superior a exigida pela torre de absorção e devido a isso que no fluxograma do processo, apresentado na Figura 1, contém um separador de correntes (M-102), o qual destina uma porcentagem dessa Corrente 18 para o reciclo no scrubber, enquanto o restante sai como água residual.

4.2.6 Tanque de mistura

A partir dos dados encontrados para a corrente de saída do condensado, na coluna de destilação do isopropanol, foi possível calcular qual a composição das demais correntes de entrada no tanque de mistura (Correntes 1 e 2), presentes na Figura 1, a fim de se obter na corrente de saída uma vazão molar de 136,4 kgmol/h, sendo essa já definida anteriormente como a entrada do reator (Corrente 3).

Os resultados obtidos para o balanço de massa no tanque de mistura, encontram-se na Tabela 16.

Tabela 16 – Resultados do balanço de massa para o tanque de mistura.

Dados	Corrente 1	Corrente 2	Corrente 3	Corrente 22
$n_{\text{Água}} \text{ (kgmol / h)}$	0	42,8730	47,5164	4,6434
$y_{\text{Água}}$	0	1	0,3484	0,3343
$n_{\text{Isopropanol}} \text{ (kgmol / h)}$	79,6370	0	88,2071	8,5701
$y_{\text{Isopropanol}}$	1	0	0,6467	0,6170
$n_{\text{Acetona}} \text{ (kgmol / h)}$	0	0	0,6764	0,6764
y_{Acetona}	0	0	0,0049	0,0487

$n_{Gás\ Hidrogênio} (kgmol / h)$	0	0	0	0
$y_{Gás\ Hidrogênio}$	0	0	0	0
$n_{Total} (kgmol / h)$	79,6370	42,8730	136,4000	13,890

Pela Tabela 16 é possível observar que a quantidade necessária de vazão molar de isopropanol e água que devem ser adicionados ao processo como alimentação são, respectivamente, 79,6370 kgmol/h e 42,8730 kgmol/h. Outra consideração a ser feita é que ao se utilizar a Corrente 22 como reciclo no tanque de mistura, a corrente de saída do tanque (Corrente 3), não irá conter as mesmas frações molares dos componentes assumidas para o início dos cálculos de balanço, devido a presença de uma pequena fração de acetona. Essa pequena diferença foi desconsiderada para a realização dos cálculos, mantendo as vazões definidas na Tabela 8, para a Corrente 4, na qual a fração molar de água é 0,35 e a fração molar de isopropanol é 0,65.

4.2.7 Balanço de massa global

Para o balanço de massa global da planta de processo em estudo, foi tomado como base a reação de isopropanol formando acetona e gás hidrogênio, mostrada na Eq. (02), e a partir dos valores encontrados para os balanços de massa de cada equipamento, foram determinadas as vazões de entrada e saída do sistema global, com base no fluxograma apresentado na Figura 1. Na Tabela 17 encontram-se os resultados obtidos para o balanço de massa global da planta de produção de acetona.

Tabela 17 – Resultados do balanço de massa global para o processo de produção de Acetona a partir da oxidação do Isopropanol.

Dados	Entrada	Saída
$n_{Água} (kgmol / h)$	189,3769	189,4178
$y_{Água}$	0,6795	0,5285
$n_{Isopropanol} (kgmol / h)$	88,6600	9,3393
$y_{Isopropanol}$	0,3181	0,0261
$n_{Acetona} (kgmol / h)$	0,6766	79,8147
$y_{Acetona}$	0,0024	0,2227

$n_{Gás\ Hidrogênio} (kgmol / h)$	0,0000	79,7942
$y_{Gás\ Hidrogênio}$	0,0000	0,2227
$n_{Total} (kgmol / h)$	278,5930	358,3660

A partir do balanço de massa global, apresentado na Tabela 18, foi possível concluir que uma vazão molar de isopropanol de 88,66 kgmol/h pode gerar dentro do processo uma vazão molar de acetona de 79,8147 kgmol/h. Considerando que a empresa está em operação 300 dias no ano, a produção média esperada é de 32351,9306 ton/ano. Esses e os demais dados de projeto, para esse processo de produção, estão dispostos na Tabela 18.

Tabela 18 – Dados de projeto.

Dados de projeto		Unidade
Vazão de entrada no reator	134,6000	kgmol/h
Vazão de entrada de Isopropanol no reator	88,6600	kgmol/h
Vazão de acetona produzida na planta	79,8147	kgmol/h
Fração de Acetona como produto	96,9300	%
Massa molar da Acetona	58,0800	kg/kgmol
Fator Operacional	300	dias
Produção de Acetona por dia	107,8398	tonelada/dia
Produção de Acetona por ano	32351,9306	tonelada/ano

4.3 BALANÇO DE ENERGIA

4.3.1 Definições de pressão e temperatura

Na Tabela 19 apresentam-se os dados de temperatura e pressão encontrados para todas as correntes existentes no processo, a partir do software Petrosim e dados retirados da literatura, como já mencionado na metodologia.

Tabela 19 – Resultados de temperatura e pressão para as correntes do processo de produção de Acetona por Isopropanol.

Correntes	Temperatura (°C)	Pressão (bar)
1	25,00	2,00
2	25,00	2,00
3	31,66	2,00
4	200,00	2,00
6	350,00	2,00
8	25,00	2,00
9	25,00	1,50
10	25,00	1,50
11	35,12	1,50
12	44,48	1,50
13	29,68	1,50
14	79,51	1,50
15	98,16	1,55
16	52,57	1,45
17	52,57	1,45
18	111,61	1,55
19	36,66	1,45
20	36,66	1,45
21	36,66	1,45
22	86,60	1,45

Com base na Tabela 19, pode-se concluir que o todo o processo ocorre em baixa pressão, e que são consideradas algumas perdas de carga em forma de quedas de pressão, devido aos processos de separação existentes. Além disso, toda essa variação de temperatura, ou seja, pelo processo possuir correntes com baixas temperaturas, como 25°C e correntes com elevadas temperaturas, como 111,61, 200 e 350°C, mostra que realmente será possível a implementação da técnica de Integração Energética entre algumas dessas correntes.

4.3.2 Correntes que necessitam de utilidades

Após as temperaturas e as pressões serem definidas em cada uma das correntes, separaram-se as correntes que participariam da integração energética, para posteriormente calcular a capacidade calorífica de cada uma. As correntes

escolhidas foram as que possuem trocadores de calor para o seu aquecimento ou resfriamento. Neste caso, analisando a planta de produção na Figura 1, arbitraram-se as Correntes 3 e 4 como uma só, uma vez que a Corrente 3 é antes da troca térmica e a Corrente 4 é depois do trocador de calor. Assim, repetiu-se para as Correntes 6 e 8, 13 e 14 e 18 e 19. Definiram-se então as novas correntes como Corrente 3-4, Corrente 6-8, Corrente 13-14 e Corrente 18-19.

Com base na teoria de integração energética, as correntes frias são as correntes que necessitam de utilidades quentes para serem aquecidas, enquanto as correntes quentes são as que precisam ser resfriadas, transferindo calor para as utilidades frias (TURTON et al., 2009; RELVAS et al., 2000). Nesse sentido, as correntes quentes do processo de produção de acetona pela oxidação do álcool isopropílico, são as correntes 6-8 e 18-19, por outro lado, as 3-4 e 13-14 são as correntes frias do processo.

4.3.3 Cálculos de capacidade calorífica (C_p) e variação de entalpia (ΔH)

Para a continuação do balanço de energia foram utilizadas somente as correntes participantes da integração energética e o próximo parâmetro calculado foi a capacidade calorífica. Para isso foi necessário descobrir, por meio do software Petrosim, quais as correntes, que durante a troca térmica, passam por mudança de fase. Essa característica é importante pois, para se utilizar a metodologia *Pinch* de integração energética, é necessário obter um valor constante de calor específico para cada corrente que será integrada (TURTON et al., 2009; RELVAS et al., 2002).

Ao avaliar as correntes pelo software Petrosim, foi possível encontrar mudança de fase em quase todas as correntes que precisam das utilidades, com exceção da Corrente 18-19 que se mantém líquida ao longo da troca térmica. A Corrente 3-4 é a única que passa da condição de líquido para vapor superaquecido, enquanto as outras duas, partem do seu estado inicial (da Corrente 13-14 fase líquida e da Corrente 6-8, fase vapor) e terminam em mistura de líquido e vapor.

Aplicando a metodologia de entalpia de vaporização e calor latente, foi possível encontrar o balanço energético para as subcorrentes, então encontradas. Esse balanço energético foi dado em termos de variação de temperatura (ΔT), variação de

entalpia (ΔH) e capacidade calorífica ($\dot{n}C_p$). Assim, os resultados obtidos pelos cálculos do balanço, estão dispostos na Tabela 20.

Tabela 20 – Resultados do balanço de energia para as subcorrentes participantes da Integração Energética.

	Correntes	$C_p (J / mol \cdot K)$	$\dot{n}C_p (kW / K)$	$\Delta T (K)$	$\Delta H (kW)$
3-4	Líquido	131,6258	4,9914	66,3310	331,0822
	Líquido e vapor	-	4305,5772	0,3520	1515,5632
	Vapor	92,8469	3,5179	101,867	358,3546
6-8	Vapor	70,5040	4,2340	270,298	-1268,5476
	Líquido e vapor	-	23,1902	54,7020	-1144,4524
13-14	Líquido	92,4287	6,8284	42,8710	292,7416
	Líquido e vapor	-	101,6322	6,9590	707,2584
18-19	Líquido	75,9798	3,7407	74,9500	-280,3685

A partir dos dados apresentados na Tabela 20, é possível realizar a caracterização necessária das subcorrentes do processo de produção de acetona para dar início aos cálculos da Integração Energética.

4.4 INTEGRAÇÃO ENERGÉTICA

4.4.1 Caracterização das correntes

O balanço de energia e o balanço de massa podem ser resumidos na Tabela 21, a qual dispõe todas as características importantes das subcorrentes. A partir da Tabela 21 serão seguidos os passos descritos na metodologia para a realização dos cálculos de Integração Energética, começando pela cascata de calor, em seguida a construção das curvas compostas e por último a montagem da rede de trocadores de calor, para então a adaptação do fluxograma de produção de acetona às trocas térmicas entre as correntes do sistema.

Tabela 21 – Parâmetros de caracterização das subcorrentes.

Correntes	Tipo	\dot{n} (kgmol / h)	$\dot{n}C_p$ (kW / K)	$T_{Inicial}$ (°C)	T_{Final} (°C)	ΔH (kW)	\dot{Q} (kW)	
3-4	Líquido		4,9914	31,45	97,78	331,0822		
	Líquido e vapor	Fria	136,4000	4305,5772	97,78	98,13	1515,5632	2205
	Vapor			3,5179	98,13	200,00	358,3546	
6-8	Vapor		4,2340	25,00	79,70	-1268,5476		
	Líquido e vapor	Quente	216,1940	23,1902	79,70	350,00	-1144,4524	-2413
13-14	Líquido		6,8284	29,68	72,55	292,7416		
	Líquido e vapor	Fria	265,9600	101,6322	72,55	79,51	707,2584	1000
18-19	Líquido	Quente	177,2400	3,7407	111,61	36,66	-280,3685	-280

4.4.2 Cascata de calor

A realização da integração energética, pela metodologia *Pinch*, iniciou-se pelos cálculos da cascata de calor, pois a partir dela foi possível encontrar o mínimo de energia necessária a ser fornecida ou retirada do sistema, usando 10°C como ΔT_{\min} . Esses dados são necessários para a construção das curvas compostas, para encontrar a diferença mínima entre as curvas, o qual representa o ΔT_{\min} , chamado de ponto de estrangulamento. A diferença mínima de temperatura (ΔT_{\min}) foi escolhida por comparações da literatura, em trabalhos que há aplicação do método *Pinch* (RELVAS et al., 2000; NETO 2005; TURTON et al., 2009).

Na Tabela 22, encontram-se os valores obtidos para as temperaturas corrigidas em função do ΔT_{\min} , enquanto na Tabela 23 são apresentados os valores obtidos de variação de entalpia para cada um dos intervalos de temperatura (ΔH_i).

Tabela 22 – Valores das temperaturas corrigidas para as correntes frias e quentes.

	Corrente	$T_{Inicial}$ (°C)	T_{Final} (°C)	$T'_{Inicial}$ (°C)	T'_{Final} (°C)
3 - 4	Líquido	31,45	97,78	36,45	102,78
	Líquido e vapor	97,78	98,13	102,78	103,13
	Vapor	98,13	200,00	103,13	205,00
6 - 8	Líquido e vapor	25,00	79,70	74,70	20,00
	Vapor	79,70	350,00	345,00	74,70
13 - 14	Líquido	29,68	72,55	34,68	77,55
	Líquido e vapor	72,55	79,51	77,55	84,51
18 - 19	Líquido	111,61	36,66	106,61	31,66

Na coluna de variação de temperatura, dentro da Tabela 23, tem-se todas as subcorrentes no estado líquido, mistura (líquido e vapor) e vapor, variando com o decorrer da sua temperatura. Para cada intervalo entre as temperaturas corrigidas, foi calculado a variação da capacidade calorífica, para então encontrar a variação da entalpia. Essa entalpia calculada, mostra qual intervalo terá déficit ou excesso de energia, característica necessária para a construção da cascata de calor inviável e viável, presente no próximo passo.

Tabela 233 – Segundo passo da cascata de calor, contendo $\Delta H_I'$ para cada intervalo de temperatura corrigida das subcorrentes.

$T'(^{\circ}C)$	Correntes				$\Delta T_I'(^{\circ}C)$	$\dot{n}C_p^{frio} - \dot{n}C_p^{quente}$ (kW / K)	$\Delta H_I'$ (kW)	Característica
	3-4	6-8	13-14	18-19				
345		Vapor			140	-4,2340	-592,7655	Défice
205		↑			98,39	-0,7162	-70,4642	Défice
106,61				Líquido	3,48	-4,4569	-15,5101	Défice
103,13		↑ Vapor			0,35	4297,6024	1504,1608	Excesso
102,78	↑	Mistura			18,27	-2,9834	-54,5067	Défice
84,51				↑	6,96	98,6488	686,5955	Excesso
77,55			↑	Mistura	2,85	3,8450	10,9583	Excesso
74,7			↓	Mistura	38,25	-15,1111	-577,9994	Défice
36,45	Líquido				1,77	-20,1025	-35,5814	Défice
34,68			Líquido		3,02	-26,9309	-81,3313	Défice
31,66				↓	11,66	-23,1902	-270,3972	Défice
20			↓					

De posse dos valores de energia em excesso ou em falta, foi possível construir a cascata inviável, a qual não há fornecimento inicial de energia externa, porém, a cada intervalo cada energia em excesso vai sendo retirada da cascata, enquanto cada energia com déficit vai sendo acrescentada à cascata. Dessa forma, foi possível obter um mínimo possível de energia que será referente a quantidade de energia externa fornecida ao sistema, para a construção da cascata viável. Isso ocorre porque não é possível a transferência de calor de um nível térmico superior com falta de energia para o inferior, procurando eliminar os valores negativos da cascata inviável (RELVAS et al., 2000; RODRIGUES, 2012). Na Tabela 24 são apresentadas a cascata inviável e viável para as correntes em estudo.

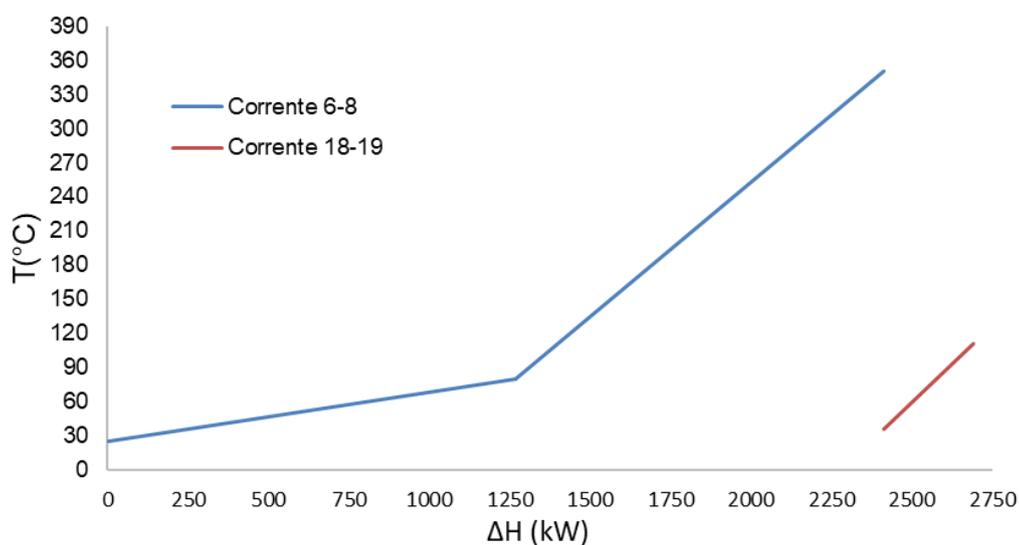
Tabela 244 – Cascatas de calor inviável e viável para as temperaturas corrigidas das subcorrentes em estudo.

$T'(^{\circ}C)$	$\Delta H_i'(kW)$	Cascata inviável	Cascata viável
		Energia (kW)	Energia (kW)
345		0	1468,6479
205	-592,7655	592,7655	2061,2334
106,61	-70,4642	663,2297	2131,6976
103,13	-15,5101	678,7398	2147,2076
102,78	1504,1608	-825,4211	643,0468
84,51	-54,5070	-770,9141	697,5538
77,55	686,5955	-1457,5096	10,9583
74,7	10,9583	-1468,4679	0
36,45	-577,9994	-890,4684	577,9994
34,68	-35,5814	-854,8871	613,5808
31,66	-81,3313	-773,5558	694,9121
20	-270,3972	-503,1586	965,3092

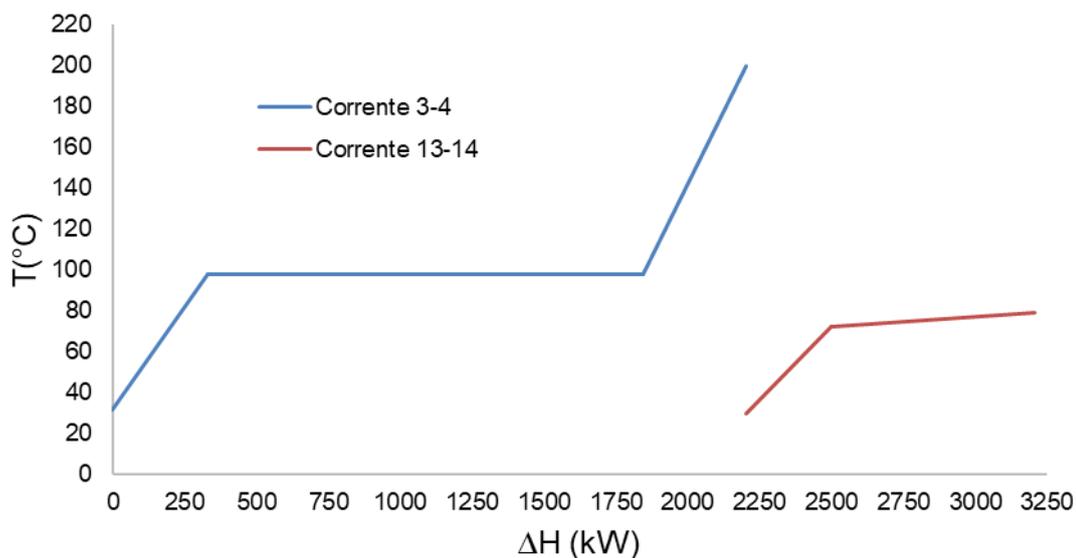
Diferente do método explicado na fundamentação teórica, o qual busca obter um valor igual a zero no intervalo do *pinch*, como utilidade fria a ser fornecida ao sistema, o método utilizado para a construção da cascata viável, busca obter o mínimo necessário a ser adicionado ao sistema, por utilidades quentes, para o funcionamento do processo e um excesso mínimo de energia a ser retirado por utilidades frias. Por meio da Tabela 24, uma energia de 965,3092 kW precisa ser retirada do sistema ($Q_{UF,min}$) e uma energia de 1468,6479 kW é necessária ser adicionada ao sistema ($Q_{UQ,min}$).

4.4.3 Curvas compostas

As Figuras 4 e 5 mostram as curvas de temperatura em função da variação de entalpia para todas as subcorrentes da integração energética, sendo elas, para as correntes quentes e frias, respectivamente.



**Figura 4 – Curva de temperatura vs. variação de entalpia das correntes quentes (6-8) e (18-19).
Fonte: Própria autora.**



**Figura 5 – Curva de temperatura vs. variação de entalpia das correntes frias (3-4) e (13-14).
Fonte: Própria autora.**

Na Tabela 25, encontram-se os dados calculados para a plotagem das curvas compostas quente e fria.

Tabela 25 - Dados necessários para a construção das curvas compostas quente e fria.

Correntes	$T_{Inicial} (^{\circ}C)$	$T_{Final} (^{\circ}C)$	$\Delta T (^{\circ}C)$	$\dot{n}C_p (kW / K)$	$\Delta H (kW)$
Correntes quentes	36,66	25	11,66	23,1902	270,3972
	79,7	36,66	43,04	26,9309	1159,1055
	111,61	79,7	31,91	7,9748	254,4752
	350	111,61	238,39	3,7407	891,7551
Correntes frias	29,68	31,45	1,77	6,8284	12,0863
	31,45	72,55	41,1	11,8198	485,7935
	72,55	79,51	6,96	106,6236	742,1000
	79,51	97,78	18,27	4,9914	91,1922
	97,78	98,13	0,35	4305,5772	1506,9520
	98,13	200	101,87	3,5179	358,3651

As Figuras 6 e 7 mostram as curvas compostas para as correntes quentes e frias, respectivamente. Com a obtenção das duas curvas compostas, para se obter a curva composta da integração energética, a qual abrange a demanda energética externa necessária para aquecer ou resfriar o sistema, dados por $Q_{UQ,min}$ e $Q_{UF,min}$, respectivamente, o ΔT_{min} , sendo o ponto de estrangulamento entre as curvas, e além disso, a área de troca térmica, a qual se representa apenas na área entre as curvas compostas quente e fria. A curva composta da integração energética está apresentada na Figura 8.

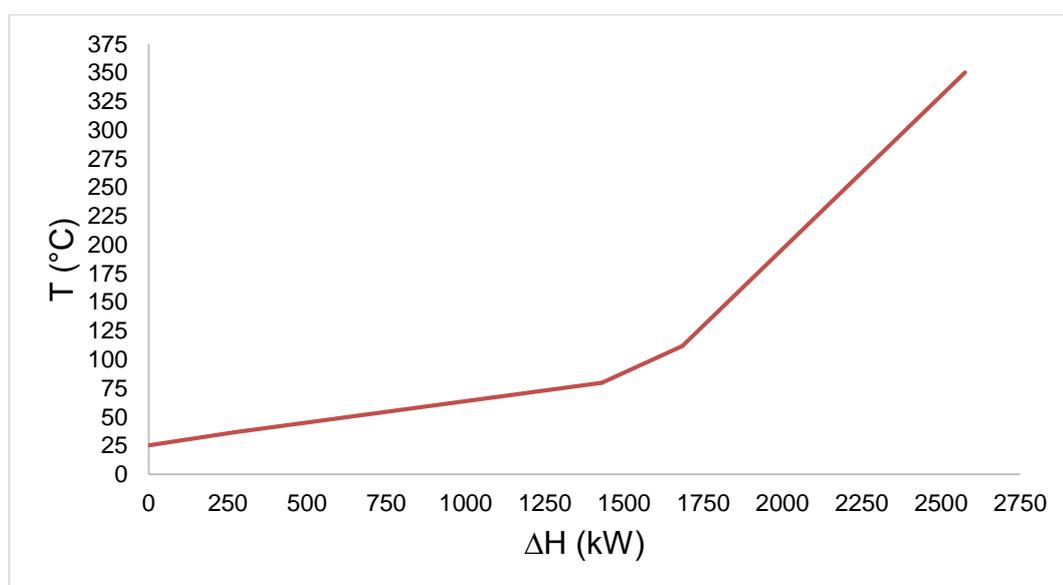


Figura 6 – Curva composta quente de temperatura vs. variação de entalpia.
Fonte: Própria autora.

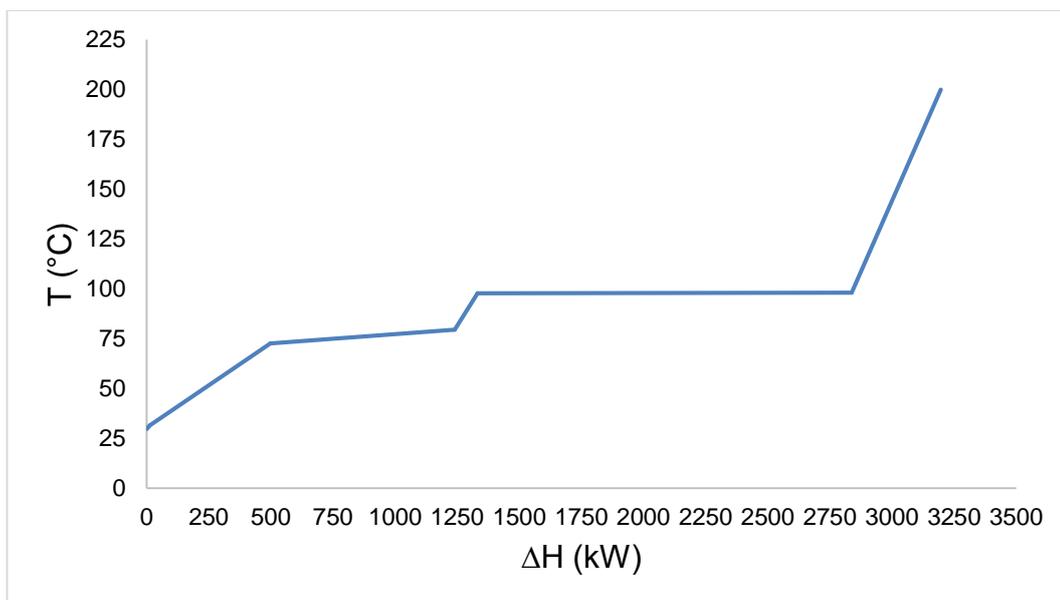


Figura 7 – Curva composta fria de temperatura vs. variação de entalpia.
Fonte: Própria autora.

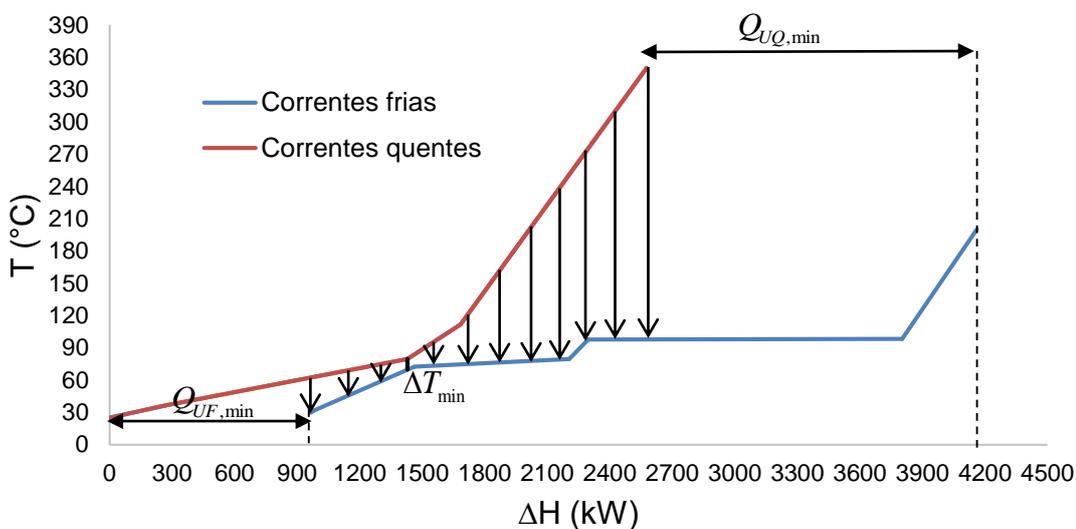


Figura 8 – Curvas compostas quente e fria de temperatura vs. variação de entalpia, para a integração energética.
Fonte: Própria autora.

Por meio da Figura 8, pode-se observar que, com os valores obtidos nos cálculos da cascata de valor para $Q_{UQ,min}$ e $Q_{UF,min}$, tem-se um valor para a distância mínima entre as curvas de exatamente 10, sendo conseqüentemente o valor do ΔT_{min} requerido. Além disso, pode-se perceber a área entre as curvas, região destacada pelas setas, a qual é definida por ser a área onde ocorrerá a troca térmica entre as

correntes, ou seja, a área onde o calor em excesso das correntes quentes será fornecido às correntes frias.

4.4.4 Rede de trocadores de calor

Em posse dos dados da cascata de calor, tem-se que a temperatura do ponto de estrangulamento (*pinch*) é de 74,70°C, dessa forma, a região *pinch* varia de 69,7°C a 79,7°C. Essa é uma importante consideração, pois com base na metodologia *Pinch*, não é possível a troca térmica entre as correntes na região denominada *pinch*. (RELVAS et al., 2000; NETO 2005; TURTON et al., 2009). Os dados necessários para os cálculos da rede de trocadores de calor, estão dispostos na Figura 9.

Os melhores resultados obtidos, com base nas restrições apresentadas na metodologia, referentes às Eqs (53) e (55), estão apresentados nas Figuras 10 e 11.

Como esquematizado na Figura 10, na região acima do *pinch*, possui quatro correntes frias para duas correntes quentes, logo, condiz com o que se é pedido pela Eq. (52). No entanto, foi necessária uma divisão da Corrente 6-8 (V), ou seja, foi preciso dividir sua vazão, buscando com isso, diminuir sua capacidade calorífica e variação de entalpia, para que essa corrente respeite o requisito necessário da Eq. (53). Com a realização dos cálculos, conforme mostra a Figura 11, a porcentagem de divisão da corrente foi de 62,9721%, buscando obter a mesma variação de entalpia da Corrente 13-14 (LV).

Com as todas as correntes respeitando as restrições, fez-se os cálculos necessários para a integração, começou-se pela Corrente 6-8 (V), uma vez que ela pode fornecer toda sua energia disponível para a Corrente 13-14 (LV), dessa forma, a Eq. (65) e (66) apresenta o cálculo e o resultado para esta integração:

$$707,36 = 101,632(T_{13-14,f}^{LV} - 77,55) \quad (65)$$

$$T_{13-14,f}^{LV} = 84,51(^{\circ}C) \quad (66)$$

seguindo dessa maneira, sucessivamente, com todas as integrações presentes na Figura 11. Para aquecer a Corrente 3-4 (V), utilizou-se a Corrente 6-8.2 (V), como mostra as Eqs. (67) e (68):

$$358,3651 = 1,5678(T_{6-8,f}^V - 79,7) \quad (67)$$

$$T_{6-8.2,f}^V = 308,2821(^{\circ}C) \quad (68)$$

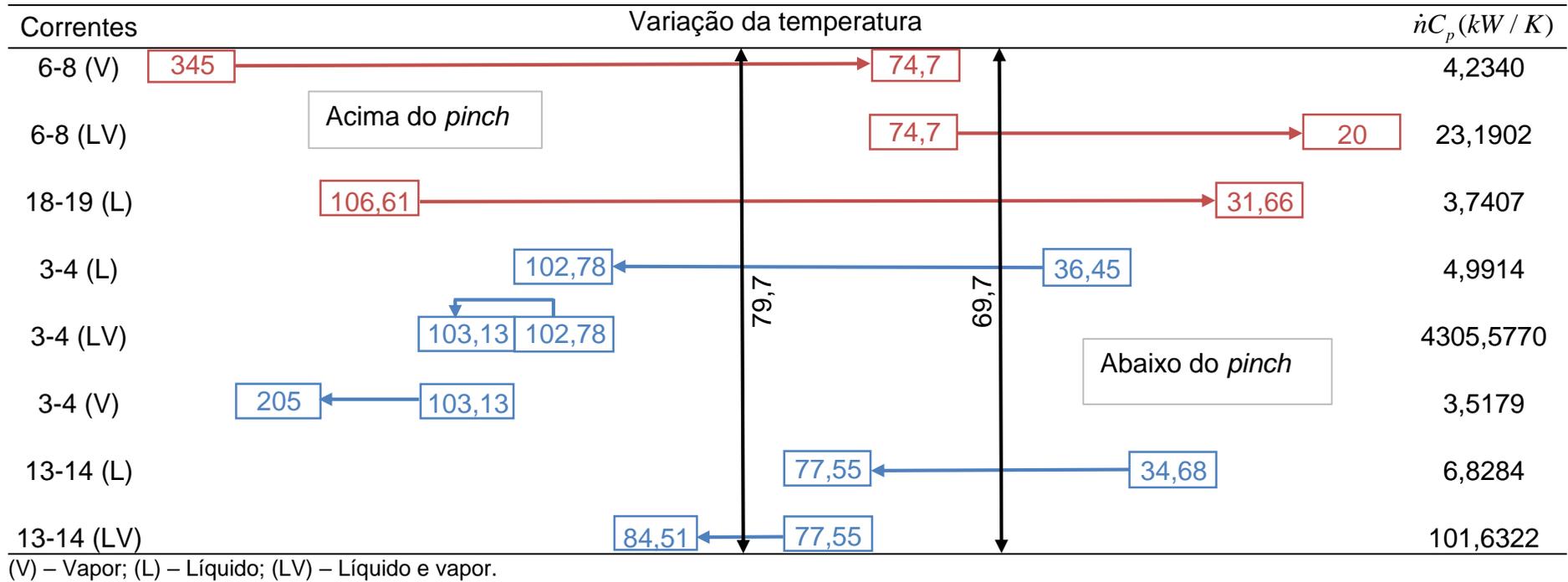


Figura 9 – Análise para construção da rede de trocadores de calor acima e abaixo do pinch.

Fonte: Própria autora.

Como era esperado a corrente quente obter mais energia que a corrente fria, foi necessário recalcular a quantidade de energia que restou na Corrente 6-8.2 (V), para que fosse reutilizada novamente. Dessa maneira, as Eqs. (69) e (70) apresentam os cálculos necessários:

$$\Delta H_{6-8.2,f} = 1,5678(345 - 308,282) \quad (69)$$

$$\Delta H_{6-8.2,f} = 57,56547 \text{ (kW)} \quad (70)$$

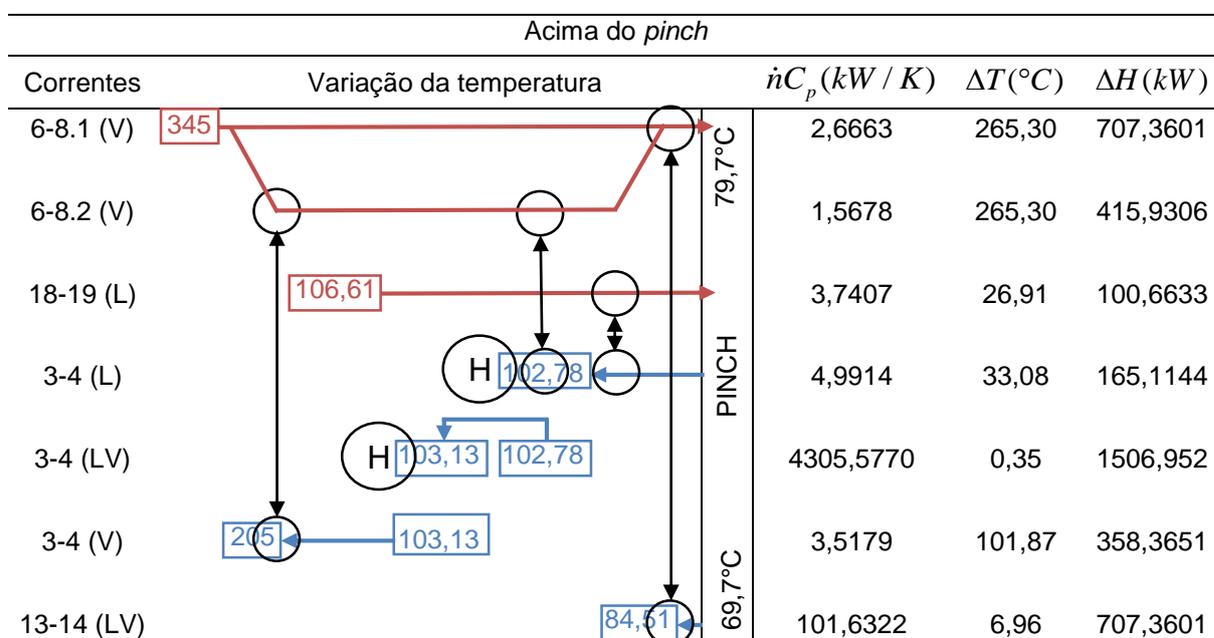
A única corrente fria que ainda que pode ser aquecida, na região acima do *pinch* é a Corrente 3-4 (L), para isso, juntou as correntes quentes restantes e se calculou a nova temperatura, após a troca térmica entre elas, apresentada nas Eqs. (71) e (72), para a troca com a Corrente 18-19(L) e Eqs. (73) e (74), para a troca com a Corrente 6-8.2 (V).

$$100,6633 = 4,9914(T_{3-4,f}^L - 69,70) \quad (71)$$

$$T_{3-4,f}^L = 89,8675 \text{ (}^\circ\text{C)} \quad (72)$$

$$57,5655 = 4,9914(T_{3-4,f}^L - 89,8675) \quad (73)$$

$$T_{3-4,f}^L = 101,4005 \text{ (}^\circ\text{C)} \quad (74)$$



(V) – Vapor; (L) – Líquido; (LV) – Líquido e vapor.

Figura 10 – Rede de trocadores de calor acima da região *pinch*.

Fonte: Própria autora.

Após serem feitas todas as possíveis integrações, calcula-se a demanda de energia que ainda será necessária ser fornecida ao sistema, para o aquecimento

dessas correntes frias, por meio de utilidades. Para isso, calculou-se a variação de entalpia para o intervalo de temperatura que ainda resta. As Eqs. (75) e (76) apresentam o valor de ΔH para a Corrente 3-4 (L), enquanto a Eq. (77) apresenta o valor de ΔH para a corrente 3-4 (LV):

$$\Delta H_{3-4}^L = 4,9914(101,40 - 110,035) \quad (75)$$

$$\Delta H_{3-4}^L = 6,8856(kW) \quad (76)$$

$$\Delta H_{3-4}^{LV} = 1506,952(kW) \quad (77)$$

Abaixo do <i>pinch</i>					
Correntes		Variação da temperatura	$\dot{n}C_p (kW / K)$	$\Delta T(^{\circ}C)$	$\Delta H(kW)$
6-8 (LV)	79,7°C PINCH 69,7°C		23,1902	54,70	1268,5010
18-19 (L)			3,7407	48,04	179,7052
3-4 (L)			4,9914	33,25	165,9629
13-14 (L)			6,828429	35,02	239,1316

(V) – Vapor; (L) – Líquido; (LV) – Líquido e vapor.

Figura 11 – Rede de trocadores de calor abaixo da região *pinch*.

Fonte: Própria autora.

Da mesma maneira que foram realizados os cálculos para a região acima do *pinch*, calculou-se a integração entre as correntes para a região abaixo do ponto de estrangulamento. Primeiramente, avaliou-se as restrições, e assim, concluiu-se que o número de correntes quentes é igual ao número de correntes frias, estando adequado à metodologia. Diferentemente da região acima do *pinch* não foi necessária a divisão de correntes para a realização dos cálculos, pois, da maneira disposta dos trocadores de calor na Figura 11, ambas as correntes frias possuem valor de capacidade calorífica menor que da Corrente 6-8 (LV). Assim, a Corrente 3-4 (L) e a Corrente 13-14(L) servirão para resfriar a Corrente 6-8 (LV). Os cálculos foram realizados utilizando a Eq. (6), em que realizou-se primeiro a integração com a Corrente 13-14 (L), pelas Eqs. (78) e (79). Logo após, calculou-se a integração para a outra corrente fria, pelas Eqs. (80) e (81).

$$239,1306 = 23,1902(79,7 - T_{6-8,f}^{LV}) \quad (78)$$

$$T_{6-8,f}^{LV} = 69,3883(^{\circ}C) \quad (79)$$

$$165,9641 = 23,1902(69,3883 - T_{6-8,f}^{LV}) \quad (80)$$

$$T_{6-8,f}^{LV} = 62,2316(^{\circ}C) \quad (81)$$

Como é de se observar pela Eq. (81) não foi possível resfriar a Corrente 6-8(LV) até sua temperatura desejada, para isso foi necessário a implementação de um resfriador, tendo sua potência calculada nas Eqs. (82) e (83):

$$\Delta H_{6-8,f}^{LV} = 23,1902(62,2316 - 20) \quad (82)$$

$$\Delta H_{6-8,f}^{LV} = 979,3573(kW) \quad (83)$$

Como a Corrente 18-19 (L) nem pôde participar da integração com as correntes, também foi necessário o fornecimento de uma utilidade fria para o seu arrefecimento, sendo a potência calculada na Eq. (84):

$$\Delta H_{18-19}^L = 179,7032(kW) \quad (84)$$

Em posse desses dados de demanda de energia a ser atribuída ou retirada do sistema após a integração entre as correntes, fez-se a Tabela 26, que apresenta os dados de somatórios de energia antes e depois da integração e os valores provenientes da cascata de calor.

Tabela 26 – Dados de energia a serem fornecidas e/ou retiradas do sistema antes e depois da integração na rede de trocadores, assim como, os obtidos após os cálculos da integração energética.

Utilidades	$\Delta H(kW)$	Demanda de energia (kW/h)
Fornecida antes da integração	3205,0000	3205,0000
Retirada antes da integração	-2693,3700	2693,3700
Fornecida depois da integração	1513,8380	1513,8380
Retirada depois da integração	-1159,0600	1159,0600
Fornecida pela cascata de calor	1468,4680	1468,6479
Retirada pela cascata de calor	-965,3092	965,3092

Como é possível observar na Tabela 26, os resultados obtidos por meio da integração entre as correntes em uma rede de trocadores, trouxe uma minimização de utilidades superior à 50%, tanto para energia fornecida ao sistema, como retirada. No entanto, ao comparar os resultados obtidos pela construção da cascata de calor, não foi possível obter o mesmo valor para essas energias calculadas. Isso se dá ao fato da rede de trocadores ter sido feita por meios convencionais, por tentativa e erro, e para valores mais próximos, seria necessária a utilização de um software específico

para Integração Energética, tendo em vista a dificuldade de alcançar valores idênticos. Um outro motivo para isso, são as trocas térmicas, que não são avaliadas, dentro da região do *pinch*, uma vez que essa área é desconsiderada para os cálculos da rede de trocadores de calor (KEMP, 2007).

Como resultado final da rede de trocadores de calor, é possível observar um aumento na quantidade de trocadores de calor que será necessário adicionar ao fluxograma de processo. A partir da Figura 1, pode-se observar que há uma necessidade inicial de dois aquecedores e três resfriadores, para controlar a temperatura das correntes. Considerando novamente que as subcorrentes pertencem a uma corrente, e que a divisão foi realizada apenas para os cálculos, é possível obter um total de cinco trocadores de calor que farão troca térmica entre as correntes, porém mantem-se um aquecedor e dois resfriadores para o controle adequado das temperaturas.

4.4.5 Fluxograma contendo integração entre as correntes e sua viabilidade econômica

Com todos os cálculos realizados, o número necessário de trocadores de calor e o conhecimento de quais correntes irão trocar calor entre si, foi possível a construção do novo fluxograma de processos para a produção da Acetona a partir da reação de oxidação do Álcool Isopropílico, apresentado na Figura 12.

A partir do novo fluxograma (Figura 12), é possível observar os cinco trocadores de calor (TC-101, TC-102, TC-103, TC-104 e TC-105) responsáveis pela utilização das correntes do sistema para a realização da troca térmica. Dessa forma, baseando-se nos dados obtidos pela Integração Energética, as correntes quentes 6-8 e 18-19 trocam energia com as correntes frias 3-4 e 13-14.

A disposição desses trocadores foi resultado da rede de trocadores de calor. Na Figura 12 também é possível observar a representação da divisão da corrente 6-8, com a utilização de um separador (M-103) para a troca térmica acima do *pinch*, assim como, a utilização de um mixer (M-101) para unir novamente essa corrente, como descrito na troca térmica abaixo do *pinch*. Além disso, nota-se a distribuição dos resfriadores (R-101 e R-102) e do aquecedor (A-101), os quais permaneceram utilizados, porém com menos necessidade de utilidade gasta como energia.

Em comparação com o processo antes da Integração, apresentado na Figura 1, observa-se um rearranjo mais complexo para as correntes do processo, como também, a necessidade de se inserir três trocadores e dois mixers, além dos que já havia.

Para a realização de uma estimativa dessa economia, foi encontrado um valor médio para utilidades frias e quentes, gasto anualmente por indústrias em dados dispostos na literatura (RELVAS et al., 2002). A Tabela 27 apresenta os preços médios para essas utilidades, considerando independente da temperatura a ser utilizada:

Tabela 27 – Preço médio de utilidades a serem usadas em trocadores de calor.

Utilidades	Preço médio	Unidade
Vapor	120	Euros/(kW.ano)
Refrigeração	10	Euros/(kW.ano)

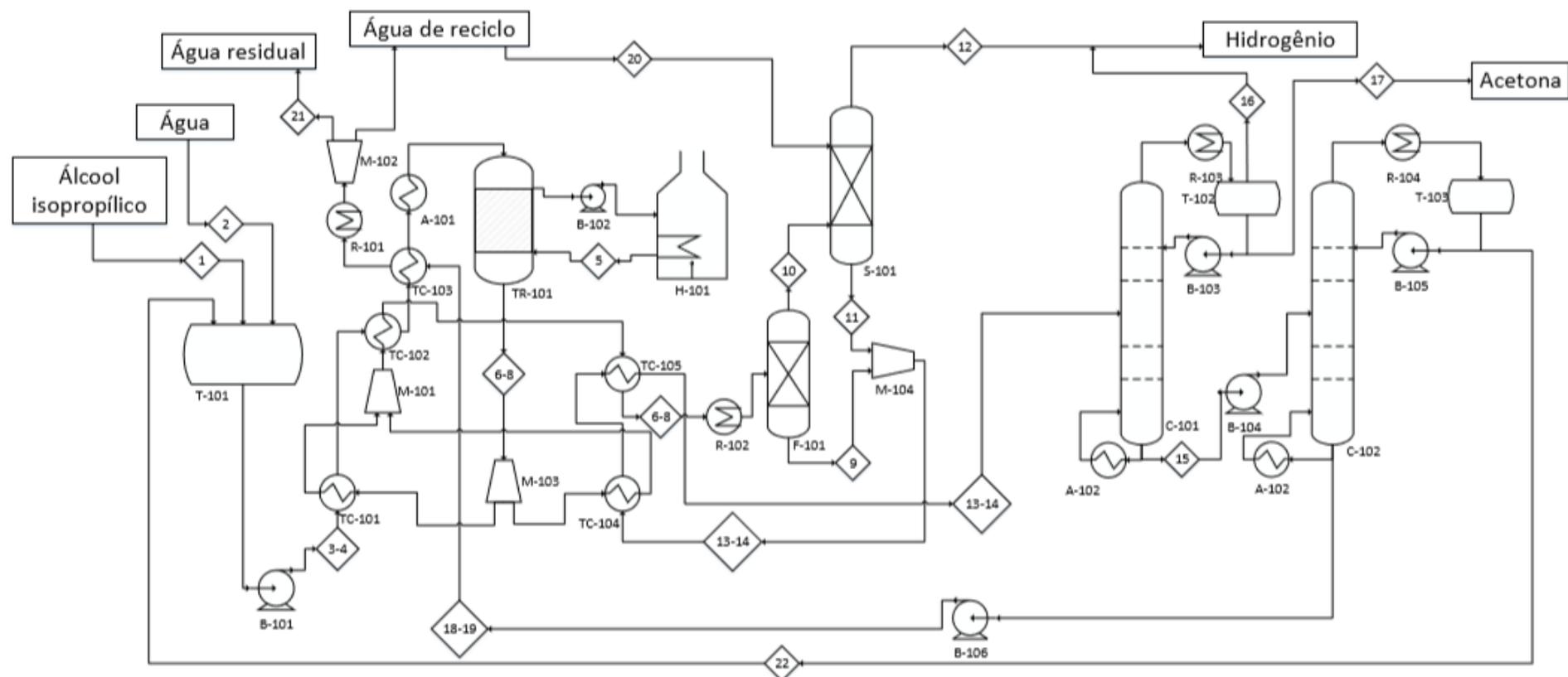
Fonte: RELVAS et al., 2000.

De posse aos dados provenientes das Tabelas 26 e 27, calculou-se tanto em euro, como em reais, os valores gastos antes e depois da Integração, considerando um valor de aproximadamente R\$4,50 por euro. Com isso, obteve-se os resultados da Tabela 28.

Tabela 28 – Custos anuais de utilidades antes e depois da Integração Energética.

Utilidades	Euro/ano	Real/ano
Fornecida antes da Integração	384.600,00 €	R\$ 1.730.700,00
Retirada antes da Integração	26.933,68 €	R\$ 121.201,58
Total antes da Integração	411.533,68 €	R\$ 1.851.901,58
Fornecida depois da Integração	181.660,51 €	R\$ 817.472,30
Retirada depois da Integração	11.590,61 €	R\$ 52.157,73
Total depois da Integração	193.251,12 €	R\$ 869.630,02

Ao avaliar a Tabela 28, foi possível perceber uma queda no gasto com energia de R\$ 1.851.901,58 para R\$ 869.630,02 anuais. Esse valor representa uma redução de aproximadamente 53% em relação aos gastos antecedentes da Integração Energética. Esse consumo faz com que, mesmo que a longo prazo, o investimento nesta técnica seja bastante eficaz, gerando grandes benefícios econômicos, resultados de grandes lucros financeiros e por consequência a preservação do meio ambiente, devido à redução na emissão de gases de caldeiras, para a geração de vapor, por exemplo.



Legenda:	A-101 Aquecedor	TC-104 Trocador 4	A-102 Aquecedor	R-104 Resfriador
T-101 Tanque de mistura	R-101 Resfriador	TC-105 Trocador 5	R-103 Resfriador	T-103 Tanque de refluxo
B-101 Bomba	M-102 Separador	R-102 Resfriador	T-102 Tanque de refluxo	B-105 Bomba
TC-101 Trocador 1	B-102 Bomba	F-101 Tanque flash	B-103 Bomba	B-106 Bomba
TC-102 Trocador 2	TR-101 Tanque de reação	S-101 Scrubber	B-104 Bomba	
M-101 Mixer	H-101 Forno de aquecimento	M-104 Mixer	C-102 Coluna Isopropanol	
TC-103 Trocador 3	M-103 Separador	C-101 Coluna Acetona	A-103 Aquecedor	

Figura 12 – Fluxograma do processo de produção de Acetona a partir da oxidação do Álcool Isopropílico contendo o resultado da integração entre correntes.

Fonte: adaptado de ARDA et al. (2009), TOHĂNEANU et al. (2014) e LLAETA et al. (2015).

5 CONCLUSÕES

A metodologia *Pinch* aplicada no desenvolvimento deste estudo, mostrou ser um meio convencional eficiente para a aplicação da técnica de otimização de processos, por Integração Energética, em plantas industriais. Com a implementação de três trocadores de calor em uma planta de produção de acetona a partir do álcool isopropílico, foi possível reduzir em torno de 53% o consumo de energia proveniente de utilidades quentes e frias, sem comprometer a qualidade e eficiência do processo.

A recuperação energética das correntes do processo é capaz de proporcionar uma grande economia de energia, trazendo benefícios econômicos para a indústria. A partir de uma estimativa da análise de redução de custos, foi possível reduzir o gasto anual com utilidades quentes e frias, de R\$ 1.851.901,58 para R\$ 869.630,02.

Dessa maneira, conclui-se que a implementação da Integração Energética, como meio de otimização do processo é bastante eficaz e, mesmo que seja a longo prazo, o investimento nessa melhoria no processo de produção, pode trazer grandes lucros financeiros, assim como, a contribuição com a preservação do meio ambiente.

Para fins de melhores resultados, sugere-se o aprofundamento no estudo da viabilidade econômica, buscando a relação entre o custo total, o custo de energia e o custo de capital com um diferencial mínimo de temperatura (ΔT_{\min}). Dessa forma, é possível a determinação de uma diferença mínima de temperatura ótima para a obtenção da análise de menor custo para a produção. Além disso, fazer a contabilidade dos custos de implementação dos novos trocadores de calor e mudanças nas correntes do processo, para completar a análise de viabilidade econômica do estudo.

REFERÊNCIAS

ANEEL – Agência Nacional de Energia Elétrica. **Atlas de Energia Elétrica do Brasil**. 3, ed. Brasília. 2008.

ANAPOLSKI, J. L. P., INDRUSIAK, M. L. S. **Síntese energética de uma rede de trocadores de calor de um processo de refino de óleo de soja**. Revista Perspectiva, v. 39, n. 146, p. 27-42. Erechim. 2015.

ARAUJO, Everaldo Cesar da Costa. **Trocadores de calor**. 1 ed. Universidade Federal de São Carlos. São Carlos. 108 p. 2011.

ARDA, Ü., ACARSER, M. S., GÜNGÖR, S. E. KÜÇÜK, A. **Acetone production**. EGE University. Bornova, Izmir. 2009.

BARANENKO, V. I., KIROV, V. S. **Solubility of hydrogen in water in a broad temperature and pressure range**. Revista Atomnaya Énergiya, v. 66, n. 1, p. 24-28. 1987.

BAZZO, E. **Geração de vapor**. Editora da UFSC. 2ned. 216 p. 1995.

BENINCA, M. **Integração energética de uma planta de eteno com aspectos de flexibilidade: aplicação da análise *pinch* em conjunto com a otimização matemática**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Universidade Federal do Rio Grande do Sul. 113 p. Porto Alegre, 2008.

BIZZO, W. A. **Geração, distribuição e utilização de vapor**. UNICAMP. 2003.

BRUNJES, A. S., BOGART, M. J. P. **The binary systems etanol-n-butanol, acetone-water and isopropanol-water**. Ind. Eng. Chem, v. 35, p. 255-260. 1943.

BRUNNER, E. **Solubility of hydrogen in 10 organic solvents at 298.15, and 375.15 K**. J. Chem. Eng, v. 30, p. 269-273. 1985.

CORTINOVIS, G. F., SONG, T. W. **Funcionamento de uma torre de resfriamento de água**. Escola Politécnica da USP. 2017. Disponível em: <http://www.hottopos.com/regeq14/giorgia.pdf>. Acesso em: Outubro de 2017.

ÇENGEL, Y. A., GHAJAR, A. J. **Transferência de calor e massa: uma abordagem prática**. Editora McGraw Hill. 4 ed. 902 p. 2012.

FALEIROS, R. R., LUIZ, S. L. **Integração energética em uma planta de formaldeído e análise de sua viabilidade econômica**. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Química). Universidade Federal de Alfenas. 53 p. Poços de Caldas. 2014.

FANGER, A. AMBROZIN, A. R. P. **Síntese verde da acetona: uma alternativa ao uso de dicromato de potássio**. Sétima Jornada Científica e Tecnológica do IFSULMINAS. Poços de Caldas, Minas Gerais. 2015.

FERREIRA, A. K. **Torre de resfriamento didática**. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Tecnologia em Manutenção Industrial). Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Medianeira. 38 p. 2012.

FRANCISCO, R. P. **Estudo termodinâmico da queima de combustíveis em caldeiras usando balanços de energia**. Dissertação (Mestrado em Engenharia da Energia). Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais. Universidade Federal de São João Del-Rei. São João Del Rei. 148 p. 2012.

FRESHWATER, D. C., PIKE, K. A. **Vapor-liquid equilibrium data for systems of acetone-methanol isopropanol**. J. Chem. Eng., Data 12, p. 179-183. 1967.

GOLDEMBERG, J., LUCON, O. **Energia e meio ambiente no Brasil**. Estudos Avançados. 2007.

GREEN, D. W., PERRY, R. H. **Perry's chemical engineers' handbook**. Editora Mcgraw-Hill Professi. 8 ed. 2400 p. 2007.

GUNDERSEN, T., NAESS, L. **The syntesis of cost optimal heat exchanger networks: an industrail review of state of the art**. Computers & Chemical Engineering, Great Britain, v. 12, n. 6, p. 503- 530, 1987.

GUNDERSEN, T. **A process integration primer**. International Energy Agency. SINTEF Energy Research. 2000.

HIMMELBLAU, D. M., RIGGS, J. B. **Engenharia química: princípios e cálculos**. Editora LTC. 8 ed. 836 p. Rio de Janeiro, 2014.

JUNIOR, A. R., BONELLI, V. V., OLIVEIRA, A. S. **Protocolo de Quioto: viabilidade econômica e sustentabilidade dos projetos de créditos de carbono.** Revista Eletrônica de Gestão de Negócios – eGesta, p. 51-72. 2006.

JÚNIOR, W. T. V. **Métodos de preparação industrial de solventes e reagente químicos: Acetona.** Revista Virtual de Química, v. 3, n. 4. 2011.

JÚNIOR, J. A. C., LACAVA, P. T. **Emissões em processos de combustão.** Editora UFSC. 2007.

KEMP, I. C. **Pinch analysis and process integration: A user guide on process integration for the eficiente use of energy.** Editora Butterworth-Heinemann. 2 ed. 415p. 2007.

KORETSKY, M. D. **Termodinâmica para engenharia química.** Editora LTC. 1 ed. 502p. Rio de Janeiro. 2014.

LIPORACE, F. S., PESSOA, F. L. P., QUEIROZ, E. M. **Heat exchanger network synthesis considering changing phase streams.** Thermal Engineering, v. 3, n. 2, p. 87-95. December, 2004.

LLACTA, A. R. C., ESTRADA, F. A. F., GIL, K. A. F., MORENO, M. E. S. **Design of na acetone production plant via catalytic dehydrogenation of isopropyl alcohol.** Universidad Nacional de Ingeniaria. Lima, Peru. 2015.

MARQUES, C. **Torres de resfriamento: Estudo de torres de resfriamento.** Centro Universitário Jorge Amado – UNIJORGE. Salvador. 2014.

MATOS, R. S. **Refrigeração.** Universidade Federal do Paraná. 2017. Disponível em: <http://ftp.demec.ufpr.br/disciplinas/TM250/Refrigeracao/Apostila%20Refrigeracao%20A7%20A3o.pdf>. Acesso: Outubro de 2017.

MORAN, M. J., SHAPIRO, H. N. **Princípios de termodinâmica para engenharia.** Editora LTC. 6 ed. 583-585 p. 2009.

NEOSCHIL, J., LEIBOVICI, C. F. **A solution of Rachford-Rice equations for multiphase systems.** Fluid Phase Equilibria. Revista Elsevier Science, p. 217-221. 1995.

NETO, J. N. S. **Metodologia para aplicação de integração energética numa planta industrial**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Universidade Federal da Bahia. 88p. Salvador, Bahia. 2005.

PERA, H. **Geradores de vapor: um compêndio sobre conversão de energia com vistas à preservação da ecologia**. Editora Fama. São Paulo. 1990.

PESSOA, F. L., QUEIROZ, E. M. **Integração de processos: uma ferramenta para minimizar o consumo energético e o impacto ambiental**. Brasil: E-Papers Serviços Editoriais Ltda. 2005.

REINDERS W., MINJER, C. H. **The system water-acetone-chloroform**. Recl. Trav. Chim. Pays-bas, v. 66, p. 573-604. 1947.

RELVAS, S., FERNANDES, M. C., MATOS, H. A., NUNES, C. P. **Integração de Processos: Uma metodologia de otimização energética e ambiental**. Polarpress, Lda. 1 ed. 129p. Setubal, Portugal. 2000.

RODRIGUES, J. V. F. **Integração energética dos processos de stripping e de secagem de uma unidade de produção de PVC em suspensão**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Universidade de Coimbra. 113p. 2012.

SAMPAIO, F. S. **Torre de resfriamento: modelagem, simulação e testes experimentais para apoio ao ensino de engenharia mecânica**. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Mecânica). Universidade de Brasília. 171 p. Brasília. 2013.

SANTOS, M. A. **Inventário de emissão de gases de efeito estufa derivadas de hidrelétricas**. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE. Rio de Janeiro. 147p. 2000.

SHAEIWITZ, J. A., TURTON, R. **Acetone production from isopropyl alcohol: an example debottlenecking problem and outcomes assessment tool**. Chemical Engineering Education. West Virginia University. Morgantown. 1999.

SIFNIADES, S., LEVY, A. B. **Acetone**. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. 151-169p. Morristown, New Jersey. 2005.

SMITH, J. M., VAN NESS, H. C., ABBOTT M. M. **Introdução à termodinâmica da engenharia química**. Editora LTC. 7, ed. 644 p. 2007.

TOHĂNEANU, M. C., PLEȘU, V., IANCU, P., BUMBAC, G., RUIZ, A. E. B., RUIZ, J. B. **Simulation and process integration of clean acetone plant.** AIDIC – The Italian Association of Chemical Engineering. CEt – Chemical Engineering Transactions. Volume 39. 469-474 p. 2014.

TURTON, R., BAILIE, R. C., WHITING, W. B., SHAEIWITZ, J.A., BHATTACHARYYA, D. **Analysis, synthesis and design of chemical processes.** 3 ed. Editora Prentice Hall. New Jersey, 2009.