

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ - UFC
CENTRO DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA**

**CÍCERO JATAÍ CAVALCANTE JÚNIOR
0276565**

**SÍNTESE DE UM PROCESSO DE CONVERSÃO DE
GLICEROL EM PROPILENO GLICOL UTILIZANDO O
SOFTWARE HYSYS®**

**FORTALEZA
2010**

CÍCERO JATAÍ CAVALCANTE JÚNIOR

**SÍNTESE DE UM PROCESSO DE CONVERSÃO DE
GLICEROL EM PROPILENO GLICOL UTILIZANDO O
SOFTWARE HYSYS®**

Monografia submetida à
Coordenação do Curso de
Graduação em Engenharia
Química, da Universidade Federal
do Ceará, como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Bacharel em Engenharia Química.

Orientadores: Prof. Dr. Fabiano
André Narciso Fernandes e Prof.
Dr. Samuel Jorge Marques
Cartaxo.

Co-orientador: Engenheiro
Químico Francisco de Assis da
Silva Mota.

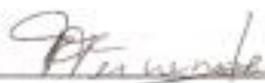
CÍCERO JATAÍ CAVALCANTE JÚNIOR

**SÍNTESE DE UM PROCESSO DE CONVERSÃO DE
GLICEROL EM PROPILENO GLICOL UTILIZANDO O
SOFTWARE HYSYS®**

Monografia submetida à Coordenação do Curso de Graduação em Engenharia Química, da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Química.

Aprovada em 26/11/2010

BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Fabiano André Narciso Fernandes (Orientador)
Universidade Federal do Ceará - UFC



Prof. MSc. Francisco Murilo Tavares de Luna (Avaliador)
Universidade Federal do Ceará - UFC



Prof. Dr. Samuel Jorge Marques Cartaxo (Orientador)
Universidade Federal do Ceará - UFC

AGRADECIMENTOS

Primeiramente a Deus, por me dar paz, saúde e força para superar os todos os obstáculos.

Aos meus pais, Irivan e Ana, que sempre me deram todo o apoio, incentivando para que eu alcançasse meus objetivos.

As minhas irmãs Ciana, Ivana, Liana e Andrea que me incentivarão na realização deste feito.

A todos os meus familiares, em especial aos meus tios, João e Irineuda, pelo apoio incondicional, recebendo-me como filho em sua residência.

A minha namorada, Rosimeire, pela paciência e a compreensão pela distância.

Aos meus orientadores, Professor Dr. Fabiano André Narciso Fernandes e Professor Dr. Samuel Jorge Marques Cartaxo, pela orientação durante a vida acadêmica e pela disposição de sempre ajudar quando necessário.

Ao meu co-orientador, Engenheiro Químico Francisco de Assis da Silva Mota, pela amizade construída, disposição e capacidade de sempre orientar para busca de objetivos importantes no desenvolvimento deste trabalho.

A todos os meus amigos, em especial as verdadeiras amizades formadas durante a minha graduação.

Enfim, agradeço a todos que contribuíram de forma direta ou indireta, para que este projeto se tornasse realidade.

RESUMO

Este trabalho apresenta o desenvolvimento de um processo de conversão de glicerol em propileno glicol. Devido à crescente preocupação com aquecimento global, o uso de combustíveis alternativos está se tornando cada vez mais frequente em todo o mundo. Neste contexto, o biodiesel ganha destaque como possível substituto do diesel oriundo do petróleo. Para cada 90 m³ de biodiesel produzido por reação de transesterificação, são gerados, aproximadamente, 10 m³ de glicerina. Hoje, com a grande quantidade de glicerol no mercado mundial, o preço deste produto tem diminuído. Isto indica que a viabilização comercial do biodiesel passa pelo consumo desse volume extra de glicerina. O glicerol pode ser convertido em 1,2 propanodiol, também chamado de propileno glicol, utilizando catalisador heterogêneo, através de uma reação chamada de hidrogenólise do glicerol. O propileno glicol é uma solução potencial para dar valor à grande quantidade de glicerol existente no mercado. Ele é um produto com aplicações em indústrias de alimentos, cosméticos, farmacêuticas entre outras. Utilizou-se o software HYSYS® da Aspen Tech na elaboração da simulação e dimensionamento dos equipamentos do processo. Foram realizados diversos estudos no processo a fim de obter as melhores condições para operar a planta, de forma que essas condições ideais foram determinadas através de um balanço entre os custos operacionais, custos com equipamentos e segurança. Glicerol é convertido em propileno glicol em um reator tubular de leito fixo na temperatura de 230 °C e pressão de 15 atm, obtendo assim, 77,11% de conversão de glicerol. Os equipamentos presentes no processo são: bombas, torres de destilação, compressor, trocadores de calor e vaso flash. A unidade tem uma capacidade de produção de 107 L/h de propileno glicol com 99,20% de pureza. Por fim, são expostos os *datasheets* dos equipamentos dimensionados.

Palavras-chave: Glicerina. Propileno Glicol. Simulação.

ABSTRACT

This work shows the development of a process for converting glycerol to propylene glycol. Due to growing concern about global warming, the use of alternative fuels is becoming more and more frequent worldwide. In this context, the biodiesel is highlighted as a possible substitute for diesel from petroleum. For each 90 m³ of biodiesel produced by transesterification reaction, approximately, 10 m³ of glycerin are generated. Nowadays, the price of glycerin has decreased due to the large amount of glycerol in the world. It indicates that the commercial feasibility of biodiesel go through the use of this extra volume of glycerin. Glycerol can be converted into 1,2 propanediol, also known as propylene glycol, using heterogeneous catalyst, through a reaction called glycerol hydrogenolysis. Propylene glycol is a potential solution to give value to the large amount of glycerol in the market. It's a product with a lot of applications such as in food, cosmetics, pharmaceutical and others industries. It was used the software HYSYS® from Aspen Tech in the simulation and design of process equipment. Several studies in the process to obtain the best conditions to operate the plant, so that these optimal conditions were determined by an economic balance between operating costs, equipments costs and safety. Glycerol is converted to propylene glycol in a tubular fixed bed reactor at a temperature of 230 ° C and pressure of 15 atm, thus obtaining 77.11% conversion of glycerol. The equipments used in the process are pumps, distillation towers, compressors, heat exchangers and flash vessels. The unit has a production capacity of 107 L/h of propylene glycol with 99.20% purity. Finally, have exposed datasheet sized equipment.

Keyword: Glycerin. Propylene Glycol. Simulation.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1	Modelo ilustrativo da reação de transesterificação de triglicerídeo.....	14
FIGURA 2	Reações para a produção de glicerol a partir de propeno.....	17
FIGURA 3	Reações envolvidas na hidrogenólise de glicerol.....	22
FIGURA 4	<i>Flowsheet</i> do processo no HYSYS®.....	35
FIGURA 5	Efeito da temperatura e pressão da reação na conversão de glicerol.....	36
FIGURA 6	Efeito da razão molar (H ₂ /Glicerol) na quantidade de PG produzida no reator PBR-1.....	36
FIGURA 7	Perfil de temperatura dentro do reator PBR-1.....	37
FIGURA 8	Efeito da temperatura da corrente de alimentação do vaso VF-1 na quantidade de PG produzida como produto de topo deste mesmo equipamento.....	39
FIGURA 9	Efeito da temperatura da corrente de alimentação do vaso VF-1 na quantidade de PG produzido como produto de fundo deste mesmo equipamento.....	39
FIGURA 10	Efeito da temperatura da corrente de alimentação do vaso VF-1 na carga térmica necessária para chegar a essa temperatura.....	40
FIGURA 11	Influência da razão de refluxo e do número de estágios na quantidade de água no produto de topo da torre de destilação TD-1.....	41
FIGURA 12	Influência da razão de refluxo e do número de estágios na carga térmica do refeedor da torre de destilação TD-1.....	41
FIGURA 13	Influência da razão de refluxo e do prato de alimentação na quantidade de água no produto de topo da torre de destilação TD-1.....	42
FIGURA 14	Influência da razão de refluxo e do número de estágios na quantidade de glicerol no produto de fundo da torre de destilação TD-2.....	43
FIGURA 15	Influência da razão de refluxo e do número de estágios na carga térmica do refeedor da torre de destilação TD-2.....	44
FIGURA 16	Influência da razão de refluxo e do prato de alimentação na quantidade de glicerol no produto de fundo da torre de destilação TD-2.....	44
FIGURA 17	Influência da razão de refluxo e do número de estágios na quantidade de PG no produto de fundo da torre destilação TD-3.....	45

FIGURA 18	Influência da razão de refluxo e do número de estágios na carga térmica do refeedor da torre destilação TD-3.....	46
FIGURA 19	Influência da razão de refluxo e do prato de alimentação na quantidade de PG no produto de fundo da torre de destilação TD-3.....	46
FIGURA 20	Varição da temperatura com a taxa de calor no trocador TC-1.....	47
FIGURA 21	Varição da temperatura com a taxa de calor no trocador TC-2.....	48

LISTA DE TABELAS

TABELA 1	Propriedades físicas do glicerol.....	16
TABELA 2	Principais setores industriais que consomem glicerol.....	17
TABELA 3	Aplicações para a transformação do glicerol.....	18
TABELA 4	Propriedades físicas do PG.....	19
TABELA 5	Parâmetros cinéticos das reações de hidrogenólise de glicerol.....	25
TABELA 6	Comparação da energia requerida e do gasto com utilidades sem e com integração energética.....	48
TABELA 7	<i>Datasheet</i> da bomba B-1.....	54
TABELA 8	<i>Datasheet</i> da bomba B-2.....	54
TABELA 9	<i>Datasheet</i> do compressor C-1.....	54
TABELA 10	<i>Datasheet</i> do vaso flash VF-1.....	55
TABELA 11	<i>Datasheet</i> do trocador de calor TC-1.....	55
TABELA 12	<i>Datasheet</i> do trocador de calor TC-2.....	55
TABELA 13	<i>Datasheet</i> do trocador de calor TC-3.....	56
TABELA 14	<i>Datasheet</i> do trocador de calor TC-4.....	57
TABELA 15	<i>Datasheet</i> do trocador de calor TC-5.....	57
TABELA 16	<i>Datasheet</i> do refeedor da TD-1.....	58
TABELA 17	<i>Datasheet</i> do condensador da TD-1.....	58
TABELA 18	<i>Datasheet</i> do refeedor da TD-2.....	59
TABELA 19	<i>Datasheet</i> do condensador da TD-2.....	59
TABELA 20	<i>Datasheet</i> do refeedor da TD-3.....	60
TABELA 21	<i>Datasheet</i> do condensador da TD-3.....	61
TABELA 22	<i>Datasheet</i> da torre de destilação TD-1.....	61
TABELA 23	<i>Datasheet</i> da torre de destilação TD-2.....	62
TABELA 24	<i>Datasheet</i> da torre de destilação TD-3.....	62
TABELA 25	<i>Datasheet</i> do reator PBR-1.....	62

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	11
1.1	Objetivos.....	12
1.1.1	Objetivo Geral.....	12
1.1.2	Objetivos Específicos.....	12
1.2	Metodologias.....	12
1.3	Apresentação.....	13
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	14
2.1	Biodiesel.....	14
2.2	Glicerol.....	15
2.2.1	Propriedades Físicas do Glicerol.....	16
2.2.2	Métodos Tradicionais de Obtenção do Glicerol.....	16
2.2.3	Mercado do Glicerol.....	17
2.3	Propileno Glicol.....	18
2.3.1	Propriedades Físicas do Propileno Glicol.....	19
2.3.2	Mercado do Propileno Glicol.....	20
2.4	Hidrogenólise do Glicerol.....	21
2.4.1	Cinética da Reação de Hidrogenólise do Glicerol.....	23
2.5	Simuladores de Processo.....	25
2.5.1	Hysys®.....	26
2.6	Pacote Termodinâmico.....	26
2.7	Equipamentos de Processo.....	27
2.7.1	Bomba.....	27
2.7.2	Compressor.....	28
2.7.3	Reator.....	28
2.7.4	Trocador de Calor.....	29
2.7.5	Torre de Destilação Flash.....	30
2.7.6	Torre de Destilação Fracionada.....	31
2.7.6.1	Shortcut.....	31

3	DESENVOLVIMENTO E OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO.....	34
3.1	Flowsheet do Processo.....	34
3.2	Reator PBR-1.....	35
3.3	Processos de Separação.....	38
3.3.1	Vaso <i>Flash</i> VF-1.....	38
3.3.2	Torre de Destilação TD-1.....	40
3.3.3	Torre de Destilação TD-2.....	43
3.3.4	Torre de Destilação TD-3.....	45
4	INTEGRAÇÃO ENERGÉTICA.....	47
5	CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS.....	49
	REFERÊNCIAS.....	51
	ANEXOS.....	54

1 INTRODUÇÃO

1.1 Contextualização

O século XX pode ser definido como o século do petróleo. A sociedade acostumou-se a usufruir do conforto oferecido por esta matéria-prima não renovável, na forma de combustíveis e produtos químicos de uso diário.

Devido o aumento da demanda de energia, é natural que no futuro aconteça o esgotamento das reservas de petróleo de fácil extração, com isso, principalmente nos países desenvolvidos, têm incentivado a procura por fontes renováveis, que possam substituir ou pelo menos amenizar o uso de combustíveis de origem fóssil.

Neste contexto, o biodiesel ganha destaque como possível substituto do diesel oriundo do petróleo. Esse biocombustível é gerado através da reação de óleos vegetais ou gorduras animais com álcool de cadeia curta (metanol ou etanol), em uma reação chamada de transesterificação (PINTO *et al.*, 2005).

No processo de produção do biodiesel ocorre a geração de um subproduto chamado de glicerol bruto ou glicerina. A glicerina é constituída de basicamente 80% de glicerol (MOTA *et al.*, 2009). O glicerol é uma substância com diversas aplicações na indústria química. Entretanto, com o aumento da produção de biodiesel, a quantidade de glicerol no mercado é muito maior que a demanda, o que faz com que o preço desse produto diminua (CHUN *et al.*, 2007). Devido a isso, é necessária a busca por alternativas para a conversão de glicerol em produtos de maior valor agregado, tornando cada vez mais viável o processo de produção de biodiesel.

Atentos a isso, vários pesquisadores focaram seus estudos para a glicerina, até então tratada pelas indústrias como um resíduo de baixo valor comercial. Dentre os processos estudados de transformação de glicerol, pode-se destacar a conversão em 1,2 propanodiol, também chamado de propileno glicol (PG). O propileno glicol é uma substância de grande

aplicação em indústrias de alimentos, cosméticos e produtos farmacêuticos. A reação de conversão de glicerol em propileno glicol é chamada de hidrogenólise do glicerol (CHUN *et al.*, 2007).

1.2 Objetivos

1.2.1 *Objetivo Geral*

Utilizar os conhecimentos de Engenharia Química na síntese de um processo de transformação de um subproduto, glicerol, em um produto de maior valor agregado, propileno glicol, através do uso de simuladores de processo, que é uma das ferramentas mais importantes utilizadas pelas indústrias não só na fase de elaboração do processo, mas também durante a operação da unidade.

1.2.2 *Objetivos Específicos*

- Elaborar o *flowsheet* do processo;
- Simular o processo utilizando o software HYSYS®;
- Otimizar o processo;
- Dimensionar os equipamentos.

1.3 Metodologias

Primeiramente, realizou-se uma pesquisa bibliográfica em artigos científicos sobre reação de hidrogenólise do glicerol em propileno glicol, com intuito de levantar dados

sobre: catalisadores utilizados nessa reação; condições operacionais (pressão e temperatura) que é produzido o PG com alta seletividade; mecanismo da reação; modelo cinético da reação. Em seguida, o *flowsheet* do processo foi elaborado e simulado utilizando o software HYSYS® da Aspen Tech. Este programa permite simular processos em diversas condições, objetivando encontrar a melhor situação de funcionamento da planta.

1.4 Apresentação

Esta monografia é constituída de seis Capítulos, incluindo esta introdução. No capítulo 2 é apresentado a forma de obtenção e mercado do biodiesel, glicerol e propileno glicol. Também no capítulo 2 é apresentado o estudo bibliográfico da reação de hidrogenólise do glicerol, importância do uso de simuladores de processos, pacote termodinâmico utilizado na simulação e introdução das operações unitárias presentes no processo elaborado. No capítulo 3 está detalhado o *flowsheet* do processo sintetizado e um estudo de como foram escolhidas as condições operacionais dos principais equipamentos presentes na unidade desenvolvida. O capítulo 4 aborda a importância da utilização de integração energética. No capítulo 5, conclui-se o trabalho e sugeriram-se assuntos para serem estudados em trabalhos futuros.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Biodiesel

A crescente preocupação com aquecimento global e com o possível esgotamento dos combustíveis fósseis vem incentivando o desenvolvimento de substitutos para os derivados do petróleo, resultando na produção de combustíveis alternativos, como exemplo o biodiesel (PINTO *et al.*, 2005).

A utilização de biodiesel como combustível vem apresentando um potencial promissor no mundo inteiro, devido a sua enorme contribuição ambiental. No entanto, a comercialização do biodiesel ainda apresenta alguns gargalos tecnológicos, surgindo como obstáculos para sua comercialização o preço da matéria-prima e os custos operacionais (FERRARI *et al.*, 2005).

O biodiesel pode ser obtido por meio de reação de óleos vegetais ou gorduras animais com alcoóis (metanol ou etanol), na presença de catalisador ácido ou básico ou até mesmo em catálise heterogênea, em uma reação conhecida como transesterificação. A estequiometria dessa reação requer uma razão molar de álcool: triglicerídeo de 3:1 (PINTO *et al.*, 2005). Na Figura 1 está ilustrada essa reação.

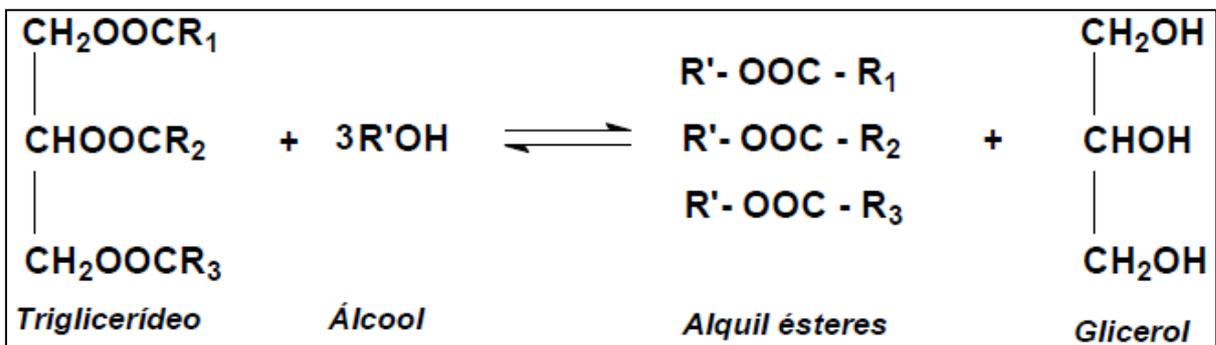


Figura 1- Modelo ilustrativo da reação de transesterificação de triglicerídeo.
Fonte: FERREIRA (2009)

A Lei nº 11.097, de 13 de janeiro de 2005, estabelece a obrigatoriedade da adição de um percentual mínimo de biodiesel ao óleo diesel comercializado em qualquer parte do território nacional. Em 2008, o diesel vendido no Brasil passou a conter, obrigatoriamente, 3% de biodiesel (B3). Em 2013 está previsto o aumento deste percentual para 5% (B5), mas o governo pretende a antecipação desta meta (MOTA *et al.*, 2009).

Um dos principais subprodutos de uma usina de biodiesel é o glicerol bruto, também conhecido como glicerina. Alguns produtores de biodiesel purificam e refinam o glicerol bruto para que possam vendê-lo. Outros descartam esse subproduto como um resíduo. A primeira razão por este descarte é porque o refino da glicerina é complexo e ainda de custo elevado (CHIU, 2006).

Para cada 90 m³ de biodiesel produzido por transesterificação são gerados, aproximadamente, 10 m³ de glicerina. As projeções mostram uma produção de cerca de 100 mil toneladas de glicerina por ano com a implementação do B3 em 2008 e cerca de 250 mil toneladas por ano a partir de 2013, com implementação do B5. Quantidade muito superior do que as 30 mil toneladas de glicerol consumidas por ano no Brasil segundo a Associação Brasileira da Indústria Química (ABIQUIM) (MOTA *et al.*, 2009). Isto indica que a viabilização comercial do biodiesel passa pelo consumo deste volume extra de glicerina, buscando aplicações de larga escala e agregando valor à cadeia produtiva do biodiesel.

2.2 Glicerol

O glicerol ou 1,2,3 propanotriol, nome dado pela IUPAC (1993), é um composto orgânico pertencente a função álcool com três hidroxilas em sua fórmula molecular C₃H₈O₃. O termo glicerol aplica-se somente ao componente químico puro. O termo glicerina aplica-se aos produtos comerciais purificados, normalmente, contendo pelo menos 95% de glicerol. Existem várias tipos de glicerina no mercado. Estes tipos diferem em seu conteúdo de glicerol e em outras características, tais como cor, odor e impurezas. Em geral, a glicerina gerada no processo de produção de biodiesel contém aproximadamente 80% de glicerol, além de água, álcool e um pouco de biodiesel (MOTA *et al.*, 2009).

2.2.1 Propriedades Físicas do Glicerol

O glicerol é um líquido viscoso, de sabor doce, incolor, completamente solúvel em água e álcool, ligeiramente solúvel em éter etílico, acetato de etila e dioxano, e insolúvel em hidrocarbonetos. Algumas propriedades físico-químicas do glicerol estão listadas na Tabela 1.

Tabela 1- Propriedades físicas do glicerol.

PROPRIEDADES	VALORES
Fórmula Química	$C_3H_8O_3$
Massa Molecular	92,09 g/mol
Densidade (20 °C)	1,261 g/cm ³
Viscosidade (20 °C)	1,5 Pa.s
Ponto de fusão	18,8 °C
Ponto de ebulição (1 atm)	290 °C

Fonte: RAHMAT *et al.* (2010)

2.2.2 Métodos Tradicionais de Obtenção do Glicerol

O glicerol pode ser produzido por via química ou fermentativa. Em 1779, Scheele descobriu o glicerol pelo aquecimento de uma mistura de óxido de chumbo com azeite de oliva. Tradicionalmente, o glicerol é obtido como subproduto em três diferentes processos: fabricação de sabão, produção de ácidos graxos e produção de biodiesel (CHUN *et al.*, 2007). O glicerol pode ser obtido de forma purificada a partir de derivados do petróleo, por cloração a altas temperaturas, mas devido à formação de produtos prejudiciais ao meio ambiente essa rota entrou em declínio (MOTA *et al.*, 2009). A Figura 2 ilustra as reações envolvidas nessa rota.

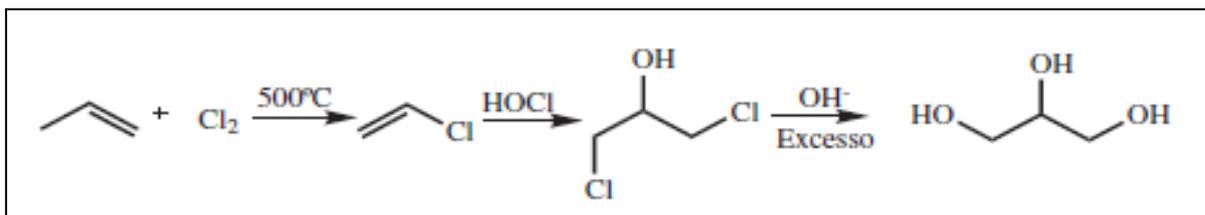


Figura 2 - Reações para a produção de glicerol a partir de propeno.
 Fonte: MOTA *et al.* (2009)

2.2.3 Mercado do Glicerol

O glicerol tem grande aplicação nos setores de cosméticos, higiene pessoal, alimentos, medicamentos e fumo. A Tabela 2 mostra a distribuição percentual de aplicações mais usuais do glicerol.

Tabela 2 – Principais setores industriais que consomem glicerol.

APLICAÇÕES	CONSUMO (%)
Cosmética/Detergentes/Farmacêutica	28
Resinas	6
Alimentos e Bebidas	8
Poliglicerois	12
Tabaco	3
Filmes de celulose	5
Ésteres	13
Papel	1
Revenda	14
Outras	10

Fonte: MOTA *et al.* (2009)

Por conta dos mercados tradicionais do glicerol ter uma capacidade de absorção limitada, torna-se necessário o descobrimento de novas rotas de aplicação, de forma a equilibrar a balança econômica desse produto frente a sua enorme produção (FERREIRA, 2009).

O preço do glicerol tem diminuído nos últimos anos devido à grande quantidade desse produto no mercado mundial. Em 1995 o preço desse produto era de US\$ 1,50 o kg, enquanto que em 2006 o preço já estava ente US\$ 0,50 e US\$ 1,00 o kg (CHIU, 2006).

Estima-se que em todo o mundo a produção de glicerol alcançará 1,2 milhões de toneladas por volta de 2012, por conta do aumento da produção de biodiesel (MOTA *et al.*, 2009). Devido a isso, é desejável a conversão do glicerol em substâncias de maior valor agregado. A Tabela 3 apresenta os principais processos estudados pelos pesquisadores para a transformação de glicerol em outras substâncias.

Tabela 3 – Aplicações para a transformação do glicerol.

PRODUTO	REAÇÃO	USOS
Acroleína	Desidratação de uma mistura de água e glicerol em fase gasosa	Produção de ácido acrílico, polímeros super absorventes e detergentes
Etanol	Fermentação do glicerol com <i>Escherichia coli</i>	Uso como combustível e aditivo a combustíveis
Hidrogênio	Reforma em fase aquosa com catalisador de Ni-Sn	Produção de energia elétrica
Propileno Glicol	Hidrogenólise do glicerol	Produção de resinas de poliéster, produtos farmacêuticos e tintas. É usado também como anticongelante
Triacetina	Reação com ácido acético	Aditivos a combustíveis

Fonte: RAHMAT *et al.* (2010)

Dentre essas novas rotas de aplicações do glicerol, focaremos nosso estudo no desenvolvimento de um processo de transformação do glicerol em 1,2 propanodiol. Essa substância é uma solução potencial para dar valor à grande quantidade de glicerol existente no mercado.

2.3 Propileno Glicol

O 1,2 propanodiol, também conhecido como propileno glicol (PG) é um produto com aplicações em indústrias de alimentos, bebidas, cosméticos, farmacêuticas, entre outras. Ele é produzido tradicionalmente na indústria petroquímica pelo processo de hidratação de óxido de propileno (CHIU, 2006).

2.3.1 Propriedades Físicas do Propileno Glicol

O PG é um líquido incolor, solúvel em água, de viscosidade média e não tóxico. Algumas propriedades físico-químicas do PG estão listadas na Tabela 4.

Tabela 4 - Propriedades físicas do PG.

PROPRIEDADES	VALORES
Fórmula Química	$C_3H_8O_2$
Massa Molecular	76,09 g/mol
Densidade (20 °C)	1,038 g/cm ³
Viscosidade (25 °C)	0,0486 Pa.s
Ponto de fusão	-59 °C
Ponto de ebulição (1 atm)	188,2 °C

Fonte: CHIU (2006)

São listadas abaixo algumas vantagens do PG:

- a) Ação umectante: O PG tem a habilidade de atrair e reter água em um produto. Ele é um dos materiais mais efetivos aprovados como umectante para alimentos, sendo superior a outros compostos como sorbitol, manitol e glicerina em sua habilidade de reter água.
- b) Baixa toxicidade: A baixa toxicidade do PG é única entre os glicóis e permite que seja utilizado como aditivo direto em alimentos e produtos farmacêuticos.
- c) Excelente ação como solvente: O PG é completamente miscível em água e muitos materiais orgânicos como álcoois, ésteres, éteres, aldeídos, assim como muitos óleos e gorduras vegetais e animais. Esta propriedade é benéfica na solubilização e estabilização de produtos para cosméticos e alimentos.
- d) Odor e cor: Estas propriedades facilitam seu uso em formulações, pois ele pode desempenhar como planejado sem impactar em outras propriedades do produto.

- e) Plastificante: PG pode agir como plastificante em um material. Isto é possível devido a sua viscosidade, propriedades umectantes, baixa volatilidade e compatibilidade com muitos compostos.

2.3.2 Mercado do Propileno Glicol

Devido o PG possuir tantas propriedades físicas diferentes, ele se tornou uma excelente escolha para as indústrias de cosméticos, alimentos e farmacêuticas. São produzidas mais de 450 mil toneladas de PG por ano nos Estados Unidos e vendidos em torno de US\$ 1,56 a US\$ 2,20 o kg. O mercado do PG cresce 4% ao ano. Além do mais, a demanda de PG é cerca de três vezes a demanda de glicerol (CHIU, 2006). Algumas das aplicações mais comuns do PG incluem:

- a) Agente de acoplamento em formulações de filtros solares, xampus, cremes de barbear e outros produtos similares;
- b) Como um hidratante em medicamentos, cosméticos, alimentos, pastas de dentes, enxaguatórios bucais, e produtos de tabaco;
- c) Fixador para perfumes;
- d) Fluido Anticongelante;
- e) Solvente para aromas na indústria de aromas, essências e fragrâncias;
- f) Solvente para tintas de impressão;
- g) Umectante para resinas naturais;
- h) Um meio de transferência de calor para baixas temperaturas em sistemas de resfriamento em cervejarias e indústrias de laticínios, assim como outros

equipamentos de refrigeração possuindo serpentinas de resfriamento em contato direto com alimentos ou bebidas.

2.4 Hidrogenólise do Glicerol

A hidrogenólise é uma reação química catalítica que quebra a ligação de uma molécula orgânica com simultânea adição de hidrogênio no fragmento da molécula resultante. Através da hidrogenólise do glicerol em presença de catalisador metálico e hidrogênio, poderão ser obtidas como produtos as seguintes substâncias: 1,2 propanodiol, 1,3 propanodiol ou etileno glicol. O produto obtido nessa reação irá depender das condições usadas na reação e do tipo de catalisador (CHUN *et al.*, 2007).

Os catalisadores mais utilizados nesta reação são baseados em metais como: Ni, Pd, Ru, Cu, Cr com suporte de alumina (Al_2O_3). As condições operacionais aplicadas nessa reação são: $T=200-300\text{ }^\circ\text{C}$ e $P= 15-300\text{ atm}$ (MOTA *et al.*, 2009). Muitos estudos estão sendo feitos com intuito de viabilizar comercialmente a produção de PG a partir de glicerol. Estes estudos estão focados em encontrar as melhores condições econômicas de se realizar a hidrogenólise do glicerol, onde estas condições seriam temperatura e pressão mais amenas, seletividade alta para PG, boa conversão de glicerol e catalisador de longa vida útil.

Segundo Chun *et al.* (2007), estudos mostram que os alcoóis são resistentes as reações de hidrogenação. Desta forma, como proposto por Dasari *et al.* (2005) a hidrogenólise do glicerol ocorre através de um mecanismo de duas reações consecutivas. Primeiramente glicerol é desidratado a hidroxiacetona, também conhecido como acetol, e posteriormente este acetol é hidrogenado a propileno glicol. A Figura 3 ilustra as reações envolvidas na hidrogenólise do glicerol.

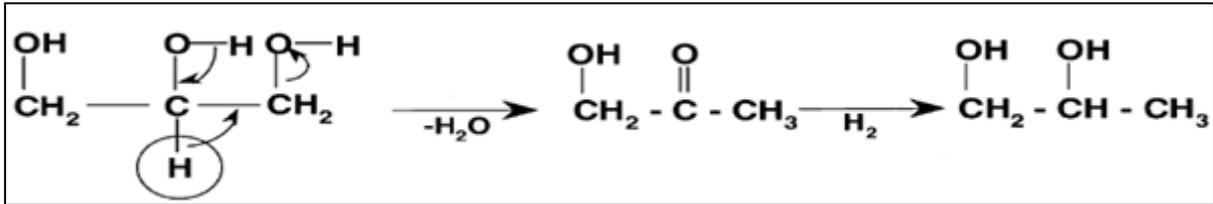


Figura 3 - Reações envolvidas na hidrogenólise de glicerol.
 Fonte: DASARI *et al.* (2005)

Dasari *et al.* (2005) conseguiram produzir PG de glicerol em condições moderadas de pressões e temperaturas. Os autores conseguiram isolar acetol relativamente puro de uma solução de 10% molar em glicerol em ausência de hidrogênio em condições de 200 °C e 0,65 atm utilizando cromito de cobre (Cu/Cr) como catalisador. Depois disso, o acetol formado na primeira reação foi hidrogenado a 200 °C e 15 atm, utilizando catalisador similar ao utilizado na primeira reação. Os melhores resultados obtidos foram de 55% de conversão de glicerol e 85% de seletividade de PG.

Chiu (2006) conseguiu conversões de 100% de glicerol e seletividade de mais de 90% de PG em condições moderadas de pressões e temperaturas. Primeiramente, usando a técnica de destilação reativa conseguiu produzir acetol de glicerol com seletividade de mais de 90% de acetol. Nesta primeira reação, as melhores condições operacionais encontradas foram de 220 a 230 °C de temperatura, pressão de 0,967 atm, catalisador de Cu/Cr, com um total de 2,5% de massa de glicerol e solução de 90% molar em glicerol. Depois disso, acetol foi hidrogenado em pressão atmosférica na temperatura de 200 °C, utilizando o mesmo catalisador da primeira reação.

Yuan *et al.* (2010) estudaram a hidrogenólise do glicerol a 180 °C e 30 atm de pressão sobre catalisador de Cu/MnO. Os melhores resultados foram conversões de glicerol de 82% e seletividade de PG de 95%.

Lahr e Shanks (2005) foram os primeiros pesquisadores a se preocupar com a cinética da reação de hidrogenólise do glicerol. Desenvolveram um modelo cinético para essa reação baseado no modelo de Langmuir-Hinshelwood. Infelizmente, segundo os próprios autores, o modelo somente mostrava uma visão global da reação de hidrogenólise e não capturava todos os passos envolvidos em um mecanismo detalhado.

Zhou *et al.* (2010) encontraram conversões de glicerol de 81,5% e seletividade de PG de 93% utilizando catalisador Cu/ZnO suportado com Al₂O₃. Os melhores resultados encontrados foram: razão molar de Cu/Zn/Al igual a 1:1:0.5; temperatura de reação de 230 °C; pressão de H₂ de 30 atm; razão molar de alimentação (H₂/glicerol) de 5:1; solução de 90% molar em glicerol. Segundo os autores, a desidratação de glicerol ocorre nos sítios catalíticos do ZnO e a hidrogenação do acetol nos sítios catalíticos do Cu. Os autores também desenvolveram rigorosos e confiáveis modelos cinéticos para a hidrogenólise de glicerol a PG. Os modelos desenvolvidos são baseados no modelo de Langmuir-Hinshelwood e pode ser plenamente usado em simulações e dimensionamentos de reatores para essa reação.

Como o presente trabalho pretende desenvolver um processo de produção de PG a partir de glicerol em condições amenas, foram utilizados na simulação os modelos cinéticos desenvolvidos por Zhou *et al.* (2010).

2.4.1 Cinética da Reação de Hidrogenólise do Glicerol

Dados cinéticos são de grande importância no desenvolvimento de um scale-up de um processo químico. A disponibilidade de dados cinéticos confiáveis para simular uma reação química é de suma importância para economizar custos no dimensionamento de um reator.

Existem dois modelos amplamente conhecidos para determinar a velocidade de reação química. O primeiro é a lei das potências. O outro é o modelo de Langmuir-Hinshelwood.

Dada a reação química abaixo:



A velocidade da reação química baseada na lei das potências é mostrada na Equação 2:

$$r = kC_A^a \quad (2)$$

Em que: r é a velocidade da reação em termo de volume de reator; C_A é a concentração molar de A; a é a ordem da reação; k é a velocidade específica de reação com unidades apropriadas a velocidade da reação.

A velocidade específica de reação é determinada pela equação de Arrhenius, como mostrada na Equação 3:

$$k = A * e^{\left(\frac{-E_A}{R \cdot T}\right)} \quad (3)$$

Em que: A é o fator pré-exponencial, ou fator de frequência, com unidade igual à velocidade específica de reação; E_A é a energia de ativação com unidades que faça com que (E_A/RT) torne-se adimensional; R é a constante dos gases ideais; T é a temperatura em Kelvin.

A equação 4 mostra a fórmula que descreve o modelo de Langmuir – Hinshelwood.

$$\text{Velocidade da reação} = \frac{(\text{Termos cinéticos}) * (\text{Força motriz})}{(\text{Termos de adsorção})} \quad (4)$$

As expressões das velocidades das reações propostas por Zhou *et al.* (2010) são mostrados nas equações 5 e 6.

$$r_1 = \frac{k_1 * b_G * c_G}{1 + b_G * c_G + b_A * c_A + b_P * c_P} \quad (5)$$

$$r_2 = \frac{k_2 * b_A * c_A * b_H * P_H}{(1 + b_G * c_G + b_A * c_A + b_P * c_P) * (1 + \sqrt{b_H * P_H})^2} \quad (6)$$

Em que: r_1 é a velocidade da reação de desidratação de glicerol em termo de massa de catalisador; r_2 é a velocidade da reação de hidrogenação de acetol em termo de massa de catalisador; k_1 é a velocidade específica da reação de desidratação de glicerol; k_2 é a velocidade específica da reação de hidrogenação do glicerol; c_G , c_A , c_P são as concentrações molares de glicerol, acetol e PG, respectivamente; P_H é a pressão de hidrogênio; b_G , b_A , b_P e b_H são os parâmetros de adsorção do glicerol, acetol, PG e hidrogênio, respectivamente.

Os parâmetros cinéticos da hidrogenólise de glicerol para PG determinados por Zhou *et al.*(2010) são expostos na Tabela 5.

Tabela 5 – Parâmetros cinéticos das reações de hidrogenólise de glicerol.

PARÂMETROS	FATOR FREQUÊNCIA	ENERGIA DE ATIVAÇÃO (kJ.mol ⁻¹)
k_1 (mol.gcat ⁻¹ .s ⁻¹)	$1,54 \times 10^4$	86,56
k_2 (mol.gcat ⁻¹ .s ⁻¹)	$7,16 \times 10^3$	57,80
b_G (m ³ .mol ⁻¹)	$2,22 \times 10^{-3}$	36,42
b_A (m ³ .mol ⁻¹)	$8,73 \times 10^{-3}$	25,94
b_P (m ³ .mol ⁻¹)	$5,8 \times 10^{-3}$	25,77
b_H (MPa ⁻¹)	$1,86 \times 10^{-5}$	36,24

Fonte: ZHOU *et al.* (2010)

2.5 Simuladores de Processo

Existem diversos programas para simular processos no estado estacionário e transiente. Os programas mais frequentemente usados e as companhias que os distribuem são: HYSYS® e ASPEN PLUS® (Aspen Tech), CHEMCAD® (Chemstations), DESIGN II® (WinSim) e PROVISION® (Simulation Sciences) (PETERS *et al.*, 2003).

Além de contar com ferramentas para simular a maior parte dos principais tipos de equipamentos de processos, os mais completos desses programas têm rotinas para gerar

propriedades físicas de centenas de espécies químicas, seja a partir de tabelas embutidas, seja por métodos de estimação. Entre os dados armazenados incluem-se pontos de fusão e de ebulição, massas específicas de líquidos, constantes críticas, capacidade caloríficas, calores latentes, solubilidades e pressões de vapor.

Os programas de simulação de processos usam normalmente um método iterativo para resolver os balanços de massa e energia. Consideram-se as unidades sequencialmente até se encontrar o final do “*loop*”. Em seguida o laço é finalizado, atribuem-se valores apropriados às variáveis desconhecidas e efetua-se o cálculo iterativamente até se obter convergência satisfatória.

2.5.1 Hysys®

O HYSYS® é um software da Aspen Tech utilizado para simular e dimensionar plantas de processos químicos. O software HYSYS® tem uma interface amigável e com possibilidade de simular no estado estacionário ou dinâmico. O programa permite simular o processo em condições desejadas, objetivando encontrar operações com menor custo possível. Este software combina uma operação modular com um algoritmo de solução não sequencial, ou seja, as soluções podem ser obtidas por múltiplas direções. O simulador disponibiliza uma enorme diversidade de operações unitárias, pacotes termodinâmicos, componentes químicos e suas propriedades, permitindo o dimensionamento de equipamentos e estruturação da malha de controle. O usuário também pode alimentar o software com substâncias que não estão presentes no programa (HAMID, 2007).

2.6 Pacote Termodinâmico

O pacote termodinâmico utilizado no simulador de processo tem a função de prever todas as propriedades termodinâmicas das espécies envolvidas no processo (PETERS *et al.*, 2003).

A seleção do pacote termodinâmico mais adequado a um dado processo é dependente das seguintes condições: tipo de espécies químicas envolvidas (polar ou apolar); condições operacionais (pressão e temperatura) a que estão sujeitas o processo; tipo de transformações que ocorrem (condensação, vaporização, dissolução, etc.) (SEADER; HENLEY, 2006).

Como no presente trabalho usam-se substâncias polares e gases leves, foi escolhido o modelo de atividade UNIQUAC para prever as propriedades termodinâmicas. Esse modelo utiliza-se de estudos de termodinâmica molecular de soluções líquidas no conceito de composição local. Além do mais, segundo Seader e Henley (2006) este tipo de modelo é o mais apropriado para gerar dados termodinâmicos confiáveis nessas situações.

2.7 Equipamentos do Processo

2.7.1 Bomba

As bombas são equipamentos usados para deslocar líquido através de tubulações. As bombas são classificadas em bombas dinâmicas, como as bombas centrífugas, e as bombas de deslocamento positivo, como as bombas de pistão e de diafragma (TOWLER; SINNOT, 2008). A potência requerida pela bomba é calculada pela equação 7.

$$\text{Potência da Bomba} = \frac{\Delta P_B * Q_B}{\eta_B} * 100 \quad (7)$$

Em que: ΔP_B é a diferença de pressão na bomba; Q_B é a vazão volumétrica do fluido que passa na bomba; η_B é a eficiência da bomba.

2.7.2 Compressor

Os compressores são equipamentos que realizam o transporte dos gases através de tubulações. Os compressores podem ser equipamentos com pás rotativas ou em cilindro com pistões com movimentação alternativa (TOWLER e SINNOT, 2008). A potência requerida por um compressor é calculada pela equação 8.

$$\text{Potência do Compressor} = \frac{\Delta P_c * Q_c}{\eta_c} * 100 \quad (8)$$

Em que: ΔP_C é a diferença de pressão no compressor; Q_C é a vazão volumétrica do fluido que passa no compressor; η_C é a eficiência do compressor.

2.7.3 Reator

O reator é o equipamento onde as matérias-primas são transformadas nos produtos. Os reatores podem ser classificados segundo o modo de operação, como batelada e contínuo; fase presente, como homogêneo e heterogêneo; padrão de fluxo, como tanque agitado, tubular, leito fixo e leito fluidizado (TOWLER e SINNOT, 2008).

O reator de leito fixo é um reator tubular recheado de partículas de catalisador sólido. Este sistema é frequentemente mais utilizado para catalisar reações gasosas. Uma vantagem do reator de leito fixo é que ele produz a mais alta conversão por massa de catalisador dentre os reatores de catálise heterogênea. Entretanto, é difícil controlar a temperatura do leito catalítico e também pode ocorrer formação de canal preferencial de fluxo do fluido dentro do reator (FOGLER, 2002).

A densidade típica do meio reacional em reatores de leito fixo está entre 200 e 800 kg de catalisador por metro cúbico de reator e a perda de pressão nesse tipo de reator está entre 5 e 15 psi (SILLA, 2003).

A equação de projeto de um reator heterogêneo de leito fixo é mostrada na equação 9.

$$\frac{dF_A}{dW} = r'_A \quad (9)$$

Em que: F_A é a vazão molar do componente A; W é a massa de catalisador necessária para que ocorra a reação; r'_A é a velocidade da reação em termos de massa de catalisador.

2.7.4 Trocador de Calor

Trocadores de calor são equipamentos que tem o propósito de transferir calor entre duas ou mais correntes em um processo químico, sendo amplamente usados em diversos tipos de indústria. Pode-se utilizá-los no aquecimento e resfriamento de ambientes, no condicionamento de ar, na produção de energia, na recuperação de calor e no processo químico. Dentre os diversos tipos de trocadores existentes, podemos destacar os multitubulares ou de casco-e-tubos. Sendo um equipamento compacto, esse tipo de unidade tem como vantagem trocar uma maior quantidade de calor em um volume relativamente pequeno (TOWLER e SINNOT, 2008).

A sequencia de cálculo para determinar a quantidade de energia transferida em um trocador de calor com uma passagem no casco e n passagens nos tubos para escoamento em contracorrente é mostrado através das equações 10, 11 e 12.

$$\Delta T_{ML} = \frac{(T_1 - t_2)(T_2 - t_1)}{\ln \frac{(T_1 - t_2)}{(T_2 - t_1)}} \quad (10)$$

$$F_T = \frac{(\sqrt{R^2 + 1}) * \ln \left(\frac{1 - S}{1 - R * S} \right)}{R - 1 * \ln \frac{2 - S * (R + 1 - \sqrt{R^2 + 1})}{2 - S * (R + 1 + \sqrt{R^2 + 1})}} \quad (11)$$

$$Q = U * A * F_T * \Delta T_{ML} \quad (12)$$

Em que: Q é o calor transferido por unidade de tempo; U é o coeficiente global de transferência de calor; A é a área de troca térmica; ΔT_{ML} é a média logarítmica da diferença de temperatura; F_T é o fator de correção para a ΔT_{ML} ; T_i é a temperatura de entrada (i=1) e saída (i=2) do fluido quente; t_i é a temperatura de entrada (i=1) e saída (i=2) do fluido frio; R é calculado pela fórmula $(T_1 - T_2)/(t_2 - t_1)$; S é calculado pela fórmula $(t_2 - t_1)/(T_1 - t_1)$.

2.7.5 Torre de Destilação Flash

O vaso *flash* é uma torre vertical onde ocorre uma destilação em um único estágio de equilíbrio. A alimentação é parcialmente vaporizada, resultando em um vapor como produto de topo, rico no componente mais volátil, e um líquido como produto de fundo, rico no componente menos volátil (SEADER e HENLEY, 2006). O cálculo do flash é mostrado através da equação 13.

$$\sum_i \frac{z_i * K_i}{1 + V * (K_i - 1)} = 1 \quad (13)$$

Em que: z_i é a fração molar do componente i na corrente de alimentação do vaso *flash*; K_i é a razão de equilíbrio e é calculado pela fórmula y_i/x_i ; V é a porcentagem molar de

vapor no vaso *flash*; L é a porcentagem molar de líquido no vaso *flash*; y_i é a fração molar do componente i no vapor; x_i é a fração molar do componente i no líquido.

2.7.6 Torre de Destilação Fracionada

A destilação consiste na operação unitária de separação mais amplamente utilizada nas indústrias química e petroquímica. O processo de separação é baseado na diferença de volatilidade dos constituintes. Existem algumas variáveis importantes no dimensionamento de uma coluna de destilação. Dentre elas, podemos destacar a razão de refluxo e carga térmica do refeedor. Com o aumento da razão de refluxo, o custo inicialmente da coluna é diminuído, pois é necessário menos estágios para separar, no entanto, há um aumento na carga térmica do refeedor (PETERS *et al.*, 2003).

As torres de destilação podem ser classificadas em torres de pratos e de recheio. Dentre os principais tipos de pratos estão: prato perfurado, prato com borbulhadores e prato com válvulas. E dentre os principais tipos de recheios estão: recheios randômicos (anéis de Raschig; selas de Berl e anéis de Pall) e recheios estruturados (Grade Glitsch) (SEADER e HENLEY, 2006).

A torre de recheio é favorecida em colunas de diâmetros menores que 60 cm e em pressões baixas. O diâmetro do recheio não deve ser maior que 1/8 (um oitavo) do diâmetro da torre de destilação. A altura do recheio não pode ser maior que 6 m (PETERS *et al.*, 2006).

2.7.6.1 “Shortcut”

Os métodos de *shortcut* servem para determinar alguns parâmetros importantes que serão utilizados no dimensionamento de uma coluna de destilação. A sequência de cálculo realizada é baseada nas correlações de Fenske, Underwood, Gilliland e Kirkbride. Através da equação de Fenske determina-se o número mínimo de estágios necessários para

realizar a separação, considerando refluxo total. A equação de Fenske é mostrada na equação 14.

$$N_m = \frac{\ln\left(\frac{x_{LK}}{x_{HK}}\right)_d * \ln\left(\frac{x_{HK}}{x_{LK}}\right)_b}{\alpha_{LK}} \quad (14)$$

Em que: N_m é o número mínimo de estágios; x_{LK} é a fração molar do componente leve, sendo 'd' no destilado e 'b' no produto de fundo; x_{HK} é a fração molar do componente pesado, sendo 'd' no destilado e 'b' no produto de fundo; α_{LK} é a volatilidade relativa do componente leve em relação ao pesado.

Depois de calcular o número mínimo de estágios usam-se as equações de Underwood para calcular a razão de refluxo mínima, considerando número infinito de estágios. Segundo Seader e Henley (2006), a razão de refluxo de uma coluna de destilação deverá ser de 1,1 a 1,5 vezes a razão de refluxo mínima. As equações de Underwood são mostradas nas equações 15 e 16.

$$\sum \frac{\alpha_i \times x_{i,d}}{\alpha_i - \theta} = R_m + 1 \quad (15)$$

$$\sum \frac{\alpha_i \times x_{i,f}}{\alpha_i - \theta} = 1 - q \quad (16)$$

Em que: α_i é a volatilidade relativa do componente i em relação a algum componente, geralmente o pesado; $x_{i,d}$ é a fração molar do componente i no topo no refluxo mínimo; $x_{i,f}$ é a fração molar do componente i na alimentação; R_m é a razão de refluxo mínima; θ é a raiz da equação; q é o calor para vaporizar 1 mol da alimentação dividido pelo calor latente molar da alimentação.

Em seguida, usa-se a correlação de Gilliland para determinar o número de estágios teóricos necessários para realizar a separação. A equação de Gilliland é mostrada na equação 17.

$$\frac{N - N_m}{N + 1} = 0,75 * \left[1 - \left(\frac{R - R_m}{R + 1} \right)^{0,566} \right] \quad (17)$$

Em que: **N** é o número de estágio teóricos; **R** é a razão de refluxo escolhida.

Por fim, usa-se a equação de Kirkbride para determinar o prato de alimentação. A equação de Kirkbride é mostrada na equação 18.

$$\log \left(\frac{N_D}{N_B} \right) = 0,206 * \log \left\{ \left(\frac{B}{D} \right) * \left(\frac{x_{HK,F}}{x_{LK,F}} \right) * \left[\frac{x_{LK,B}}{x_{HK,D}} \right]^2 \right\} \quad (18)$$

Em que: **B** é o fluxo molar do produto de fundo; **D** é o fluxo molar do destilado; **N_B** é o número de estágios de equilíbrio abaixo do prato de alimentação; **N_D** é o número de estágios de equilíbrio acima do prato alimentação; **x_{LK}** é a fração molar do componente leve, sendo 'F' na alimentação e 'B' no produto de fundo; **x_{HK}** é a fração molar do componente pesado, sendo 'F' na alimentação e 'B' no produto de fundo.

3 DESENVOLVIMENTO E OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO

Foram realizados diversos estudos para se chegar ao *flowsheet* final do processo. A seguir, é mostrada uma descrição geral do processo e logo após são mostrados os estudos de como foram determinadas as condições operacionais dos principais equipamentos presentes nesta unidade. De forma que, na escolha dessas condições levou-se em conta um balanço entre os custos operacionais, custos com matérias-primas, custos com equipamentos e segurança na operação da planta.

3.1 *Flowsheet* do Processo

O processo sintetizado de produção de PG a partir de glicerol tem capacidade de alimentação de 379 L/h de glicerol puro, 11 L/h de água e 210 L/h de hidrogênio puro. A vazão de glicerol foi escolhida com intuito de que a planta elaborada fosse classificada como uma planta piloto. A vazão de água foi definida de forma que a mistura da corrente de glicerol puro com a corrente de água, formasse uma solução de 90% molar em glicerol. A vazão volumétrica de hidrogênio foi escolhida com base na razão molar (H_2 /glicerol). Primeiramente, uma corrente de glicerol puro é misturada com uma corrente de água para formar uma solução de 90% molar em glicerol. Depois disso, essa solução é misturada com um reciclo de glicerol proveniente da torre de destilação TD-2. Em seguida, essa mistura passa por dois trocadores de calor em série, para aproveitar o calor do efluente do reator tubular de leito fixo PBR-1. Logo após, essa corrente é misturada com uma corrente de hidrogênio puro na mesma pressão e vazão molar. A mistura resultante alimenta o reator PBR-1.

O efluente do reator PBR-1 passa por três trocadores de calor em série e em seguida, alimenta o vaso de separação *flash* VF-1 com o intuito de promover a separação de hidrogênio como produto de topo. O produto de fundo do vaso VF-1 alimenta a coluna de destilação TD-1 para que haja a separação de água como produto de topo. O produto de fundo

dessa coluna alimenta a coluna de destilação TD-2 para promover a separação de glicerol não reagido como produto de fundo. Este glicerol é reciclado para o processo.

O produto de topo da torre TD-2 alimenta a coluna de destilação TD-3 para promover a separação de acetol como destilado e PG como produto de fundo. Em seguida, esses produtos são resfriados e estocados em tanques apropriados. A unidade desenvolvida tem capacidade de produção de 107 L/h de PG com 99,2% de pureza. O *flowsheet* do processo desenvolvido é mostrado na Figura 4.

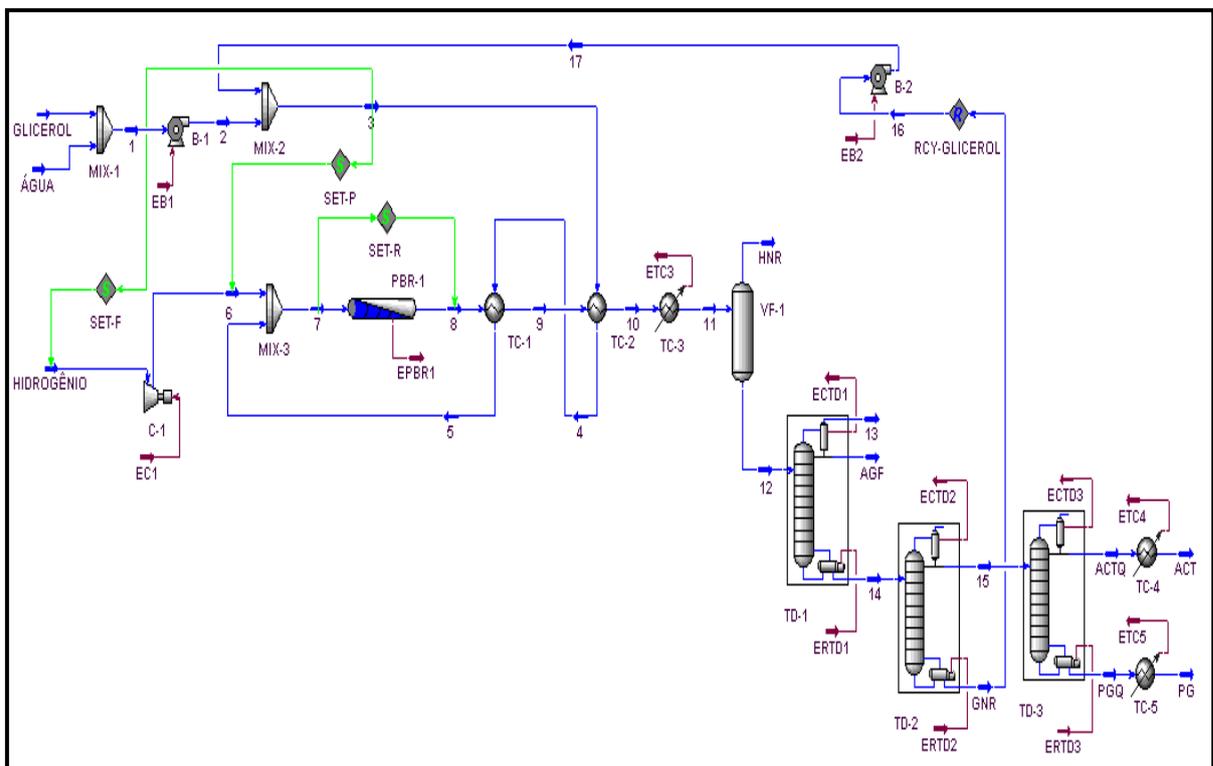


Figura 4 – *Flowsheet* do processo no HYSYS®.

3.2 Reator PBR-1

A reação foi realizada em diversas situações no software HYSYS® com o intuito de chegar ao melhor arranjo possível. No dimensionamento do reator PBR-1, considerou-se uma quantidade de 400 kg de catalisador por metro cúbico do reator, queda de pressão de 10 psi (aproximadamente 0,68 atm) e tempo de residência de 1 h. As Figuras 5, 6 e 7 mostram os resultados do estudo realizado no reator PBR-1 .

A seletividade de PG é baixa quando a reação ultrapassa 230 °C e em pressões menores que 15 atm. O tempo de residência dessa reação está entre 45 minutos a 2 horas (ZHOU et al., 2010).

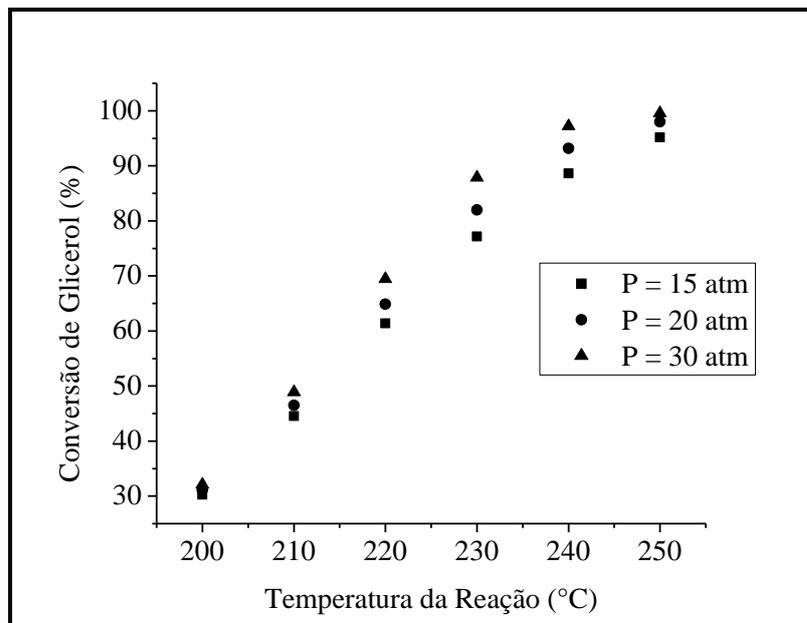


Figura 5 – Efeito da temperatura e pressão da reação na conversão de glicerol. [Volume reacional = 0,7 m³; Fluxo volumétrico = 710 L/h]

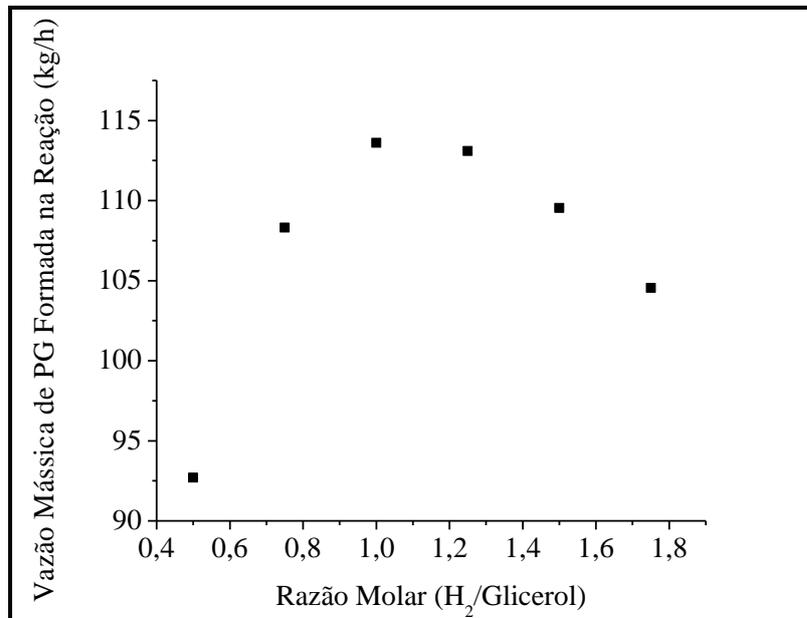


Figura 6 – Efeito da razão molar (H₂/Glicerol) na quantidade de PG produzida no reator PBR-1. [Volume reacional = 0,7 m³; Temperatura da reação = 230 °C; Pressão da reação = 15 atm]

Analisando os resultados da Figura 5, percebe-se que a temperatura tem uma influência mais significativa na conversão de glicerol do que a pressão. Para cada aumento de 5% na temperatura da reação, a conversão de glicerol aumenta em torno de 20%, enquanto que para um aumento de 30% na pressão da reação, a conversão de glicerol aumenta 5%. Assim, o ideal é que a reação fosse realizada na menor pressão possível, da faixa estudada, pois isso tornaria o processo mais seguro e de custo reduzido.

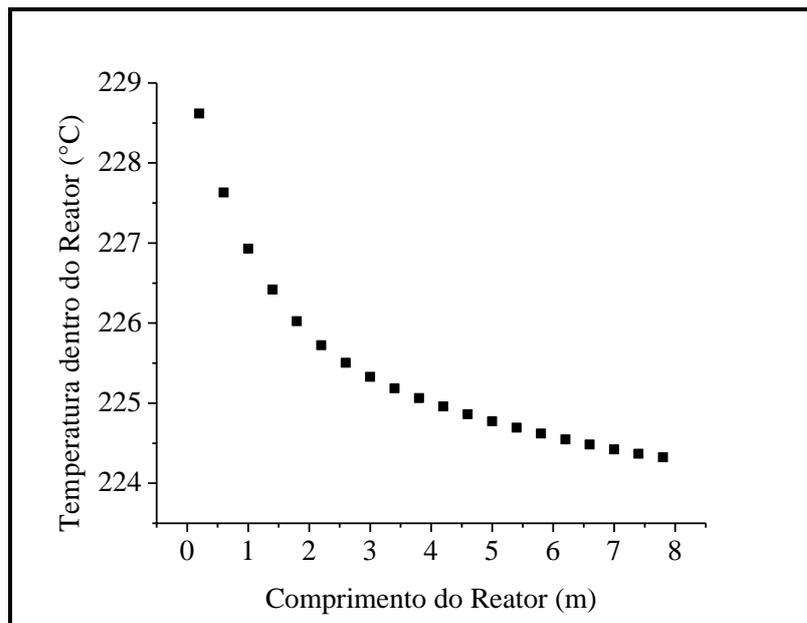


Figura 7 – Perfil de temperatura dentro do reator PBR-1.
[Pressão da reação = 15atm]

Considerando os fatores de conversão de glicerol, seletividade de PG, segurança de operação e custo de materiais, as melhores condições de realizar a hidrogenólise do glicerol é na pressão de 15 atm e temperatura de 230 °C. A Figura 6 mostra que a razão molar (H_2 /glicerol) igual a 1 é melhor situação para realizar a reação, pois nessa razão consegue-se produzir a maior quantidade de PG. Através da Figura 7 percebemos que a reação é endotérmica, pois a temperatura decresce dentro do reator, o que se não for controlado acarretará em uma diminuição da conversão de glicerol. Logo, precisamos adicionar calor na reação para manter a temperatura da mesma em 230 °C. O reator PBR-1 é do tipo tubular de leito fixo. O volume do PBR-1 é de 0,7 m³, comprimento de 8 m e diâmetro de 33,4 cm. Outros dados do dimensionamento do reator PBR-1 são mostrados nos anexos, no *datasheet* deste equipamento.

3.3 Processos de Separação

Os processos de separação presentes na planta e os respectivos equipamentos para realizá-los são: separação de hidrogênio em um vaso *flash* (VF-1); separação de água em uma coluna de destilação atmosférica (TD-1); separação de glicerol em uma coluna de destilação atmosférica (TD-2) e separação de PG em uma coluna de destilação atmosférica (TD-3).

3.3.1 Vaso Flash VF-1

Como mostrado na Figura 4, depois da reação, ocorre à separação de hidrogênio não reagido no vaso *flash* VF-1. Foram realizados estudos nesse equipamento, a fim de encontrar as melhores condições para realizar essa separação.

As Figuras 8 e 9 mostram o efeito da temperatura de alimentação do vaso *flash* na quantidade de PG produzida como produto de topo e como produto de fundo, respectivamente. A Figura 10 mostra a quantidade de energia necessária para diminuir a temperatura do efluente do reator PBR-1 até a temperatura desejada da corrente de alimentação do vaso VF-1.

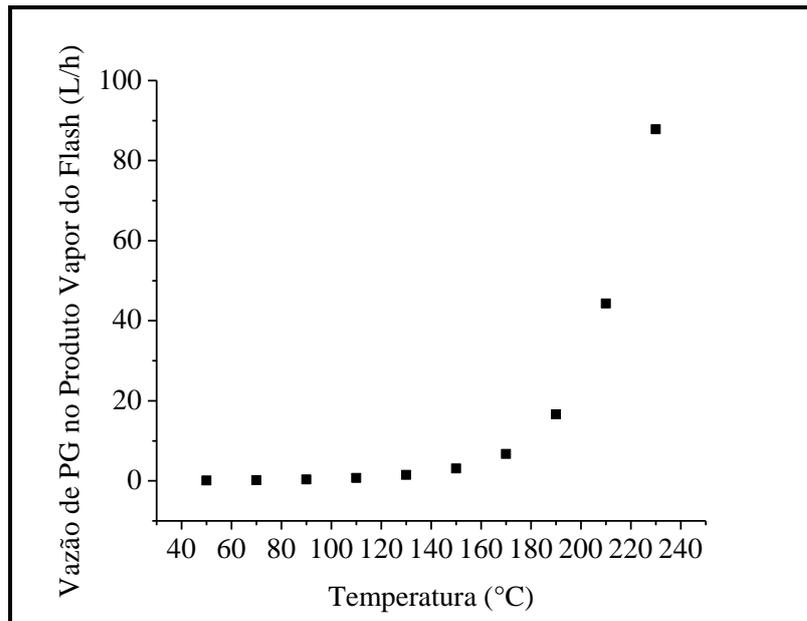


Figura 8 – Efeito da temperatura da corrente de alimentação do vaso VF-1 na quantidade de PG produzida como produto de topo deste mesmo equipamento.

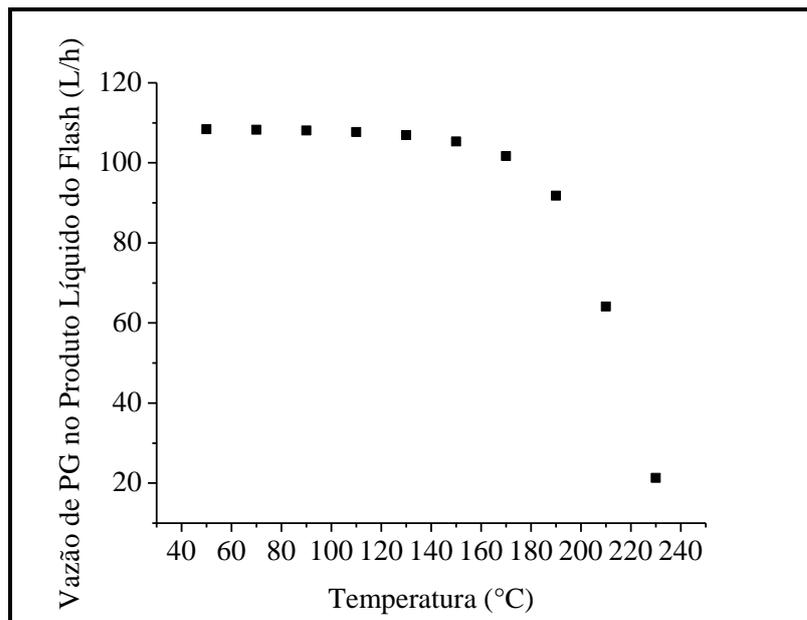


Figura 9 – Efeito da temperatura da corrente de alimentação do vaso VF-1 na quantidade de PG produzido como produto de fundo deste mesmo equipamento.

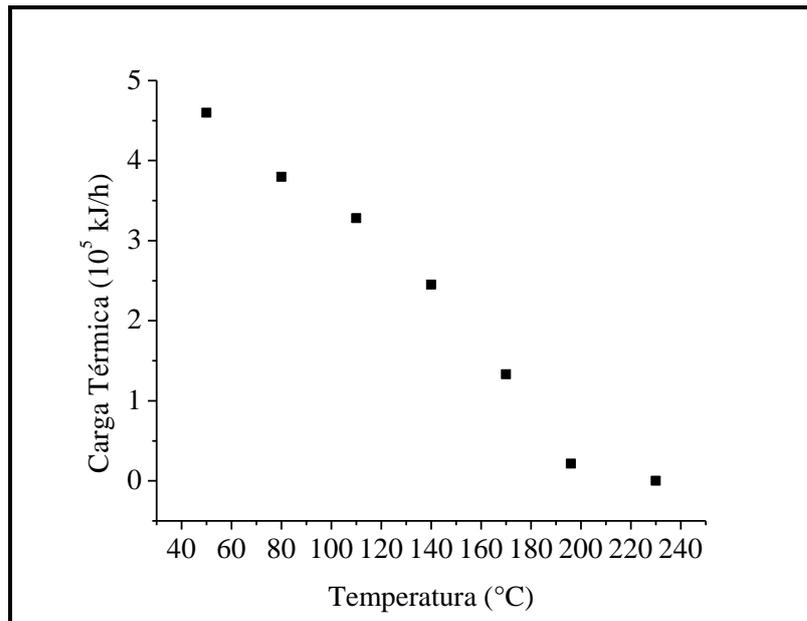


Figura 10 – Efeito da temperatura da corrente de alimentação do vaso VF-1 na carga térmica necessária para chegar a essa temperatura.

Através dos resultados da Figura 8, percebemos que perderemos muito do produto desejado, PG, se não resfriarmos o efluente do reator PBR-1, antes de entrar no vaso VF-1. Na Figura 9, percebemos que quanto menor for à temperatura de alimentação do vaso *flash* VF-1, mais PG é produzido como produto de fundo, que é o desejado. No entanto, analisando a Figura 10, notamos que é necessário um gasto considerável de energia para resfriar o efluente do reator PBR-1. Analisando a Figura 9, percebemos também que a vazão de PG produzida como produto de fundo do vaso VF-1 é praticamente constante abaixo de 140 °C. Quando a temperatura é diminuída de 140 °C para 50 °C há um aumento de 87% na carga térmica necessária para resfriar a corrente do reator PBR-1, enquanto que há um aumento de apenas 2% na quantidade de PG produzida como produto de fundo do *flash* VF-1. Desta forma, o vaso *flash* VF-1 será operado na temperatura de alimentação de 140 °C. Dados do dimensionamento do vaso VF-1 são mostrados nos anexos, no *datasheet* deste equipamento.

3.3.2 Torre de Destilação TD-1

A separação de água foi realizada em uma coluna destilação atmosférica (TD-1). O número mínimo de estágios e razão de refluxo mínima são 9,9 e 0,69, respectivamente. O número de estágios teóricos calculados está entre 21 e 27. O prato de alimentação calculado

está entre 10 e 15. A influência da razão de refluxo na composição molar de água no produto de topo e na carga térmica do refeedor é mostrada nas Figuras 11 e 12. A influência do prato de alimentação na composição molar de água no produto de topo é mostrada na Figura 13.

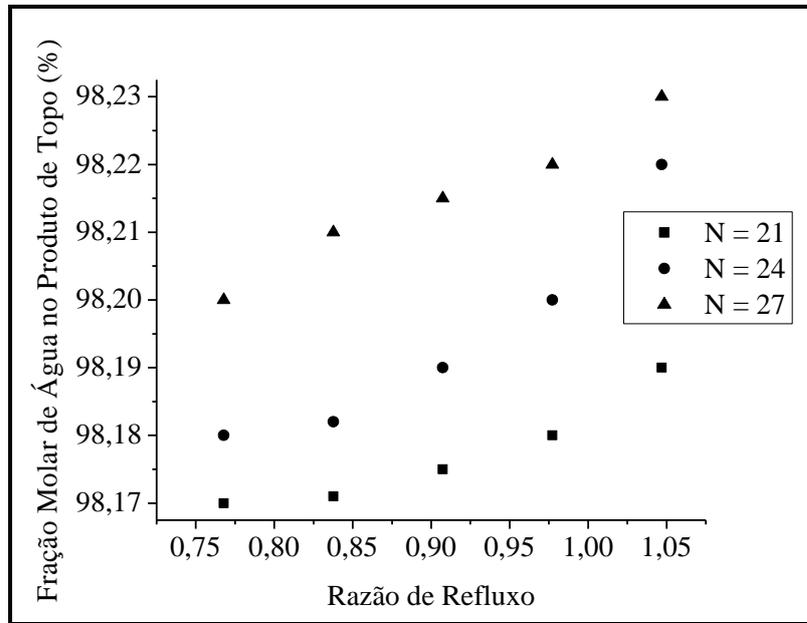


Figura 11 – Influência da razão de refluxo e do número de estágios na quantidade de água no produto de topo da torre de destilação TD-1.

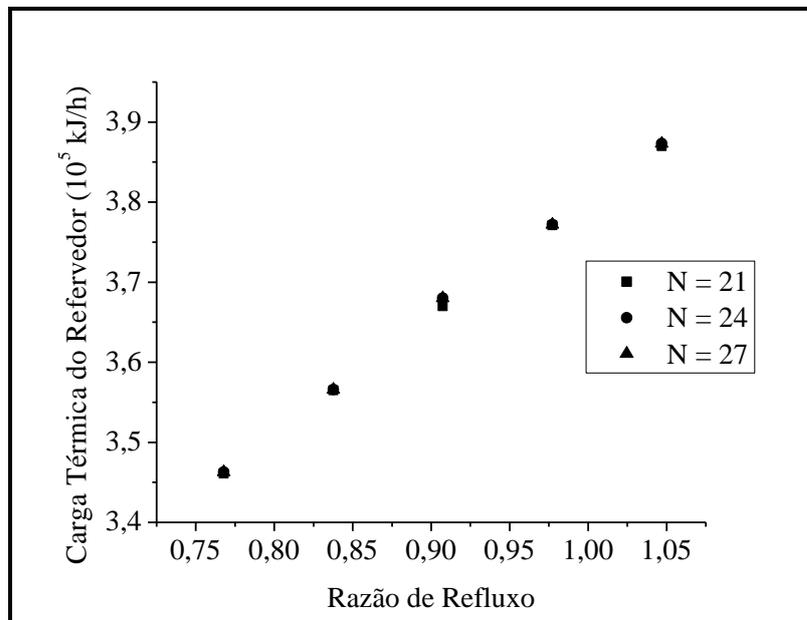


Figura 12 – Influência da razão de refluxo e do número de estágios na carga térmica do refeedor da torre de destilação TD-1.

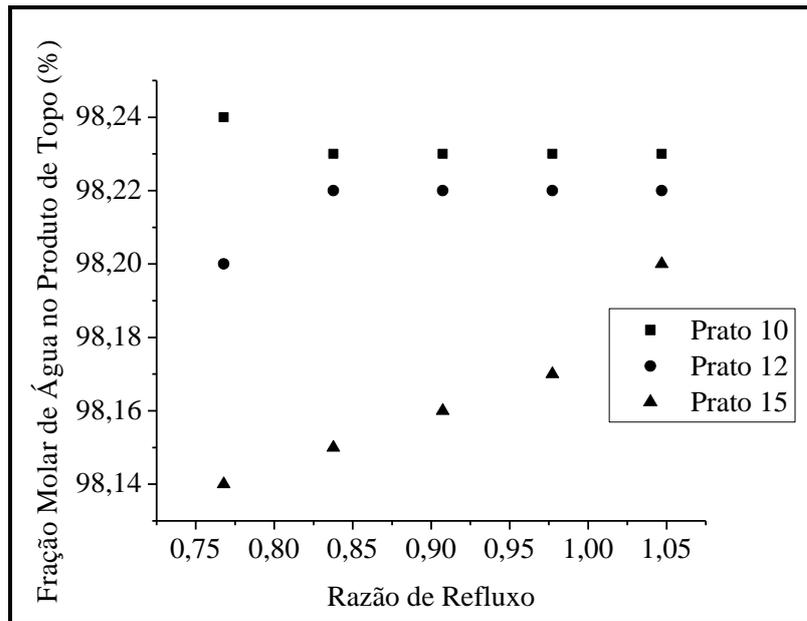


Figura 13 – Influência da razão de refluxo e do prato de alimentação na quantidade de água no produto de topo da torre de destilação TD-1. [N = 21]

Analisando os resultados da Figura 11, percebemos que se aumentar a razão de refluxo, aumenta a fração molar de água no produto de topo, mas analisando os resultados da Figura 12, percebemos que o aumento da razão de refluxo também acarreta em um aumento na carga térmica do refeedor. Um aumento de 10% na razão de refluxo acarreta em um aumento de apenas 0,003% na fração de água no produto de topo. No entanto, um aumento de 10% na razão de refluxo acarreta em um aumento de 3% na carga térmica do refeedor. Desta forma, realizando a separação na menor razão de refluxo possível se conseguirá uma boa separação e uma economia no consumo de utilidades industriais. Nas Figuras 11 e 12 concluímos também que o número de estágios teóricos não influencia nem na melhora da separação nem na diminuição da carga térmica do refeedor. No entanto, quanto menos estágios teóricos a coluna de destilação TD-1 tiver, menos materiais serão utilizados em sua construção. A Figura 13 mostra que quanto mais perto do fundo da coluna estiver a alimentação, menos êxito conseguirá na separação. Desta forma, o prato de alimentação ideal para a torre TD-1 é o prato 10. A torre TD-1 é do tipo de recheio, possui 21 estágios de equilíbrio e diâmetro de 0,61 m. Ela opera com uma razão de refluxo de 0,77 e com alimentação no décimo estágio. Outros dados do dimensionamento da torre TD-1 são mostrados nos anexos, no *datasheet* deste equipamento.

3.3.3 Torre de Destilação TD-2

A separação de glicerol foi realizada em uma coluna de destilação atmosférica (TD-2). O número mínimo de estágios e razão de refluxo mínima são 5,44 e 0,03, respectivamente. O número de estágios teóricos calculados está entre 18 e 40. O prato de alimentação calculado está entre 9 e 18. A influência da razão de refluxo na composição molar de glicerol no produto de fundo e na carga térmica utilizada no refeedor é mostrada nas Figuras 14 e 15. A influência do prato de alimentação na composição molar de glicerol no produto de fundo é mostrada na Figura 16.

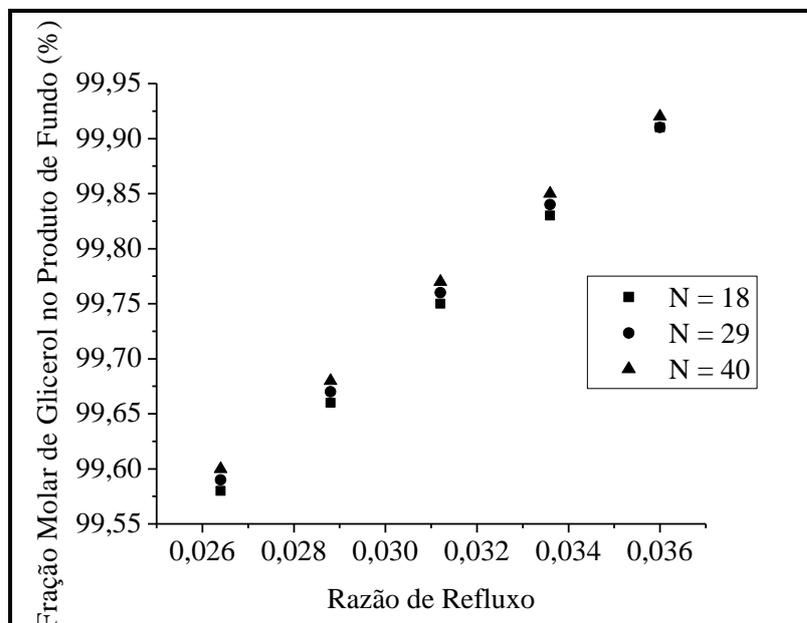


Figura 14 – Influência da razão de refluxo e do número de estágios na quantidade de glicerol no produto de fundo da torre de destilação TD-2.

Analisando os resultados das Figuras 14 e 15, percebemos que um aumento de 10% na razão de refluxo acarreta em um aumento de 0,08% na fração de glicerol no produto de fundo e um aumento de 0,2% na carga térmica do refeedor. Desta forma, a razão de refluxo poderá ser qualquer uma da faixa estudada, pois ela não influencia em melhoria considerável da separação e nem em uma economia considerável da carga térmica do refeedor. Através das Figuras 14 e 15, concluímos também que a coluna de destilação poderá conter 18 estágios teóricos, pois isso não influenciará na eficiência de torre TD-2 e ao mesmo tempo, economizará materiais na construção desse equipamento.

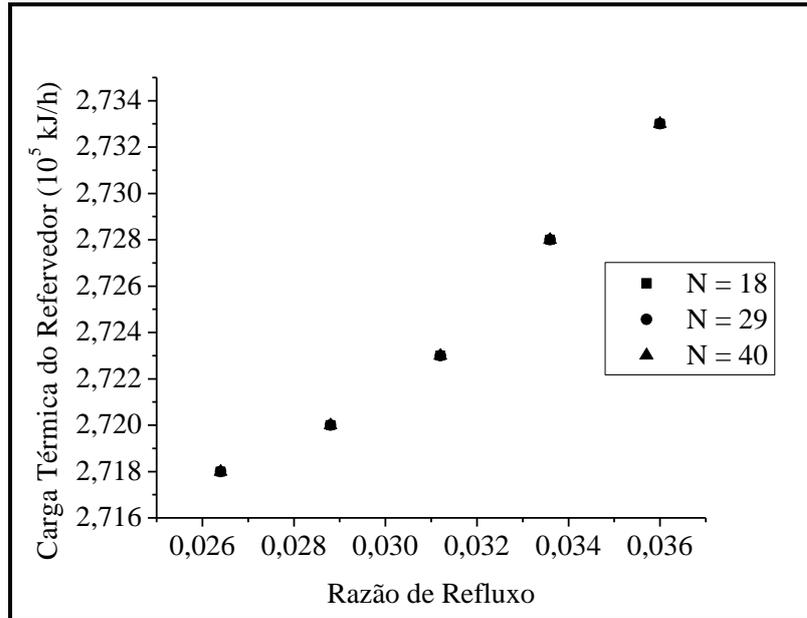


Figura 15 – Influência da razão de refluxo e do número de estágios na carga térmica do refeedor da torre de destilação TD-2.

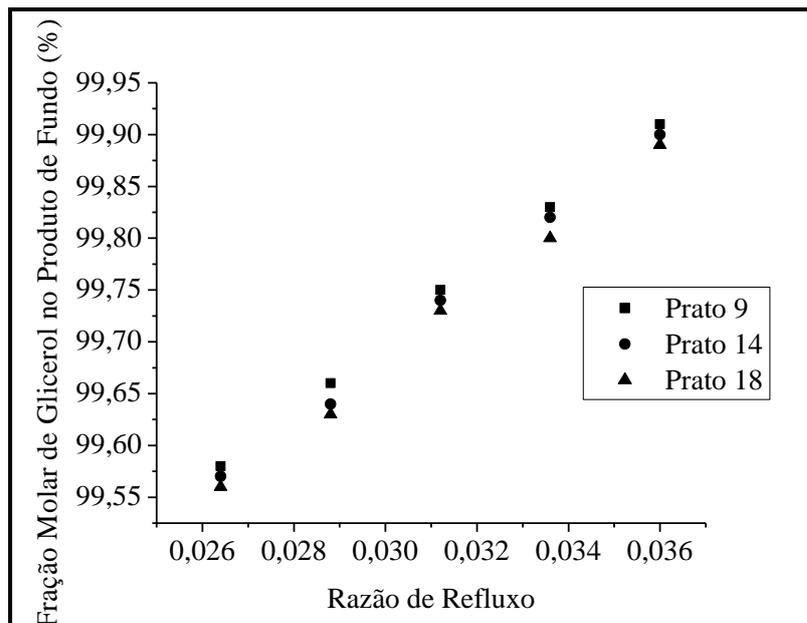


Figura 16 – Influência da razão de refluxo e do prato de alimentação na quantidade de glicerol no produto de fundo da torre de destilação TD-2.

Analisando a Figura 16 concluímos que alimentação poderá ser realizada em qualquer um dos pratos estudados. A torre TD-2 é do tipo de recheio, possui 18 estágios de equilíbrio e diâmetro de 0,3 m. Ela opera com uma razão de refluxo de 0,03 e com alimentação no nono estágio. Outros dados do dimensionamento da torre TD-2 são mostrados nos anexos, no *datasheet* deste equipamento.

3.3.4 Torre de Destilação TD-3

A separação de PG foi realizada em uma coluna de destilação atmosférica (TD-3). O número mínimo de estágios e razão de refluxo mínima são 11 e 0,52, respectivamente. O número de estágios teóricos calculados está entre 22 e 30. O prato de alimentação calculado está entre 8 e 14. A influência da razão de refluxo na composição molar de PG no produto de fundo e na carga térmica utilizada no refeedor é mostrada nas Figuras 17 e 18. A influência do prato de alimentação na composição molar de PG no produto de fundo é mostrada na Figura 19.

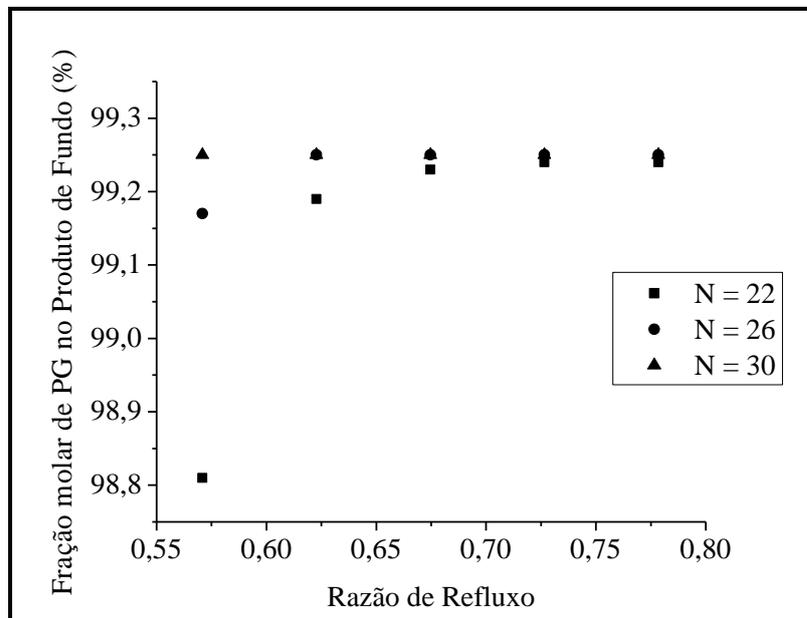


Figura 17 – Influência da razão de refluxo e do número de estágios na quantidade de PG no produto de fundo da torre destilação TD-3.

Através das Figuras 17 e 18, percebemos que um aumento de 10% na razão de refluxo acarreta em um aumento de 0,02% na fração de PG no produto de fundo e um aumento de 3% na carga térmica do refeedor. Na Figura 17 percebemos também que em baixas razões de refluxo, o aumento do número de estágios teóricos acarreta em uma melhora na separação. No entanto, com a utilização de baixos números de estágios teóricos, economizará materiais na construção da torre de destilação. Através da Figura 18 concluímos também que a quantidade de estágios teóricos não influencia na carga térmica do refeedor. Desta forma, deve-se optar por baixa razão de refluxo e baixo número de estágios teóricos.

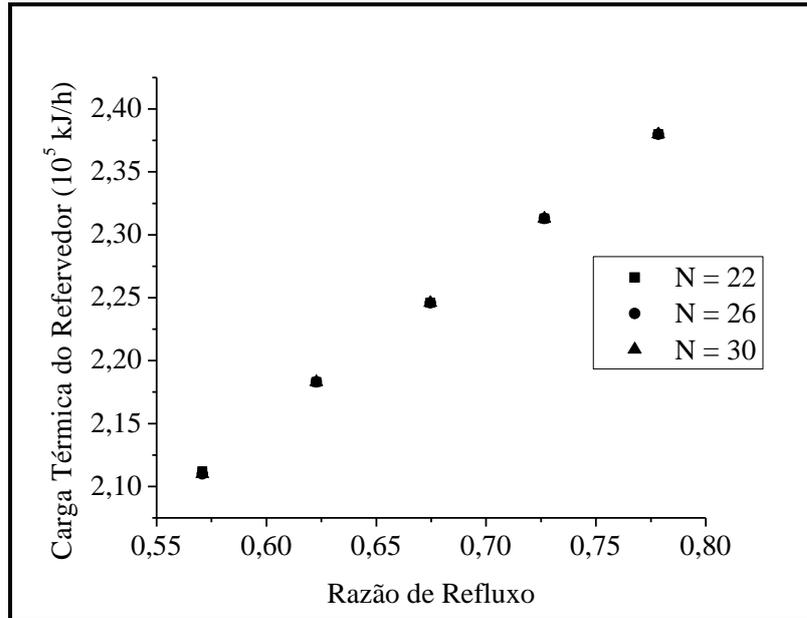


Figura 18 – Influência da razão de refluxo e do número de estágios na carga térmica do refeedor da torre destilação TD-3.

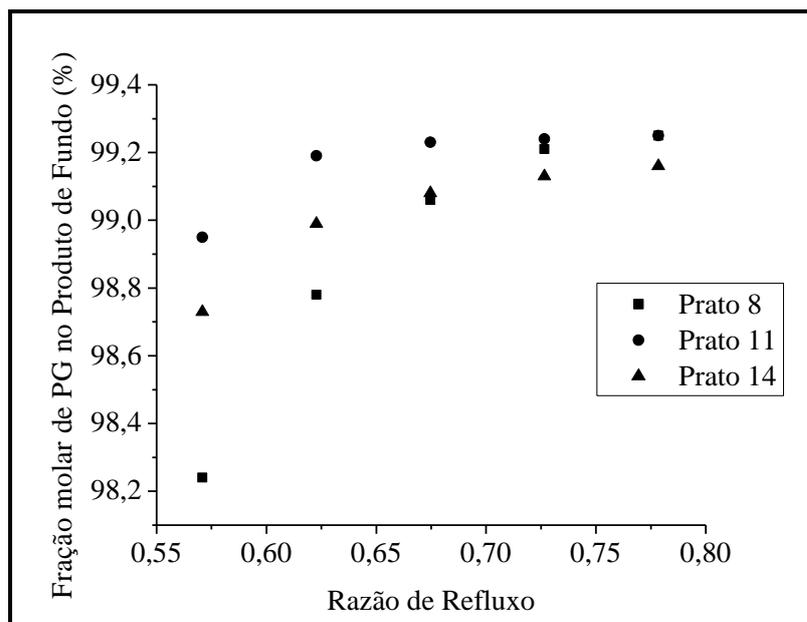


Figura 19 – Influência da razão de refluxo e do prato de alimentação na quantidade de PG no produto de fundo da torre destilação TD-3.

A Figura 19 mostra que alimentação poderá ser realizada em qualquer um dos pratos estudados, no entanto, com a alimentação no prato 11, obtém-se um leve melhora de 1% na separação. A torre TD-3 é do tipo de recheio, possui 22 estágios de equilíbrio e diâmetro de 0,3 m. Ela opera com uma razão de refluxo de 0,63 e com alimentação no décimo primeiro estágio. Outros dados do dimensionamento da torre TD-3 são mostrados nos anexos, no *datasheet* deste equipamento.

4 INTEGRAÇÃO ENERGÉTICA

A integração energética em um processo tem o intuito de aproveitar calor de correntes quentes a fim de aquecer correntes frias.

Como concluímos na seção 4.3.1., é extremamente necessário resfriar o efluente do reator PBR-1 antes de alimentar o vaso flash VF-1, por que se não perderíamos muito do nosso produto desejado, PG, como produto de topo desse equipamento. No entanto, para resfriar esse efluente até a temperatura ideal, acarretará em um consumo de utilidades industriais. Desta forma, é importante que se consiga realizar integração energética, a fim de diminuir o consumo de utilidades industriais no processo.

As integrações energéticas foram realizadas nos trocadores TC1 e TC2. As Figuras 20 e 21 mostram a variação da temperatura com a taxa de calor nos trocadores de calor TC-1 e TC-2, respectivamente. A escolha da alocação dos fluidos foi feita de acordo com a viscosidade da corrente. Alocou-se o fluido mais viscoso no casco do trocador.

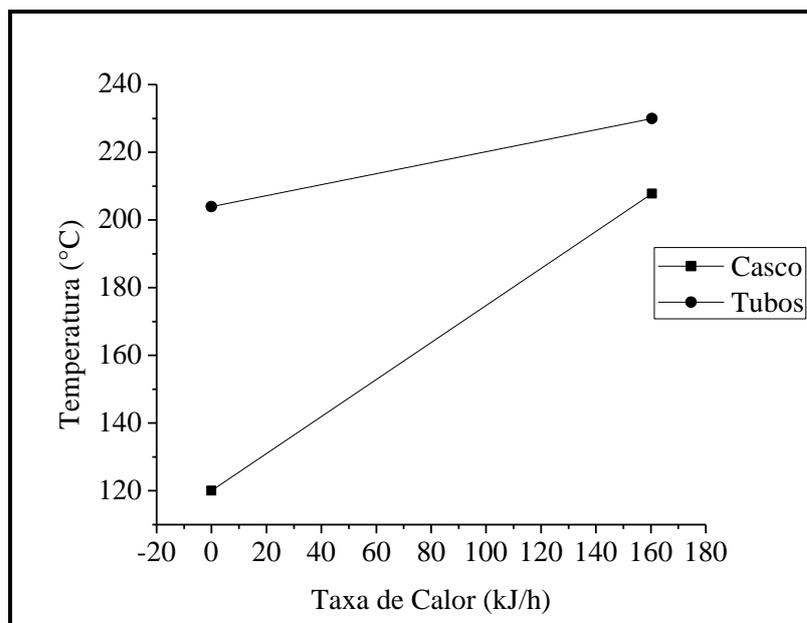


Figura 20 – Variação da temperatura com a taxa de calor no trocador TC-1.

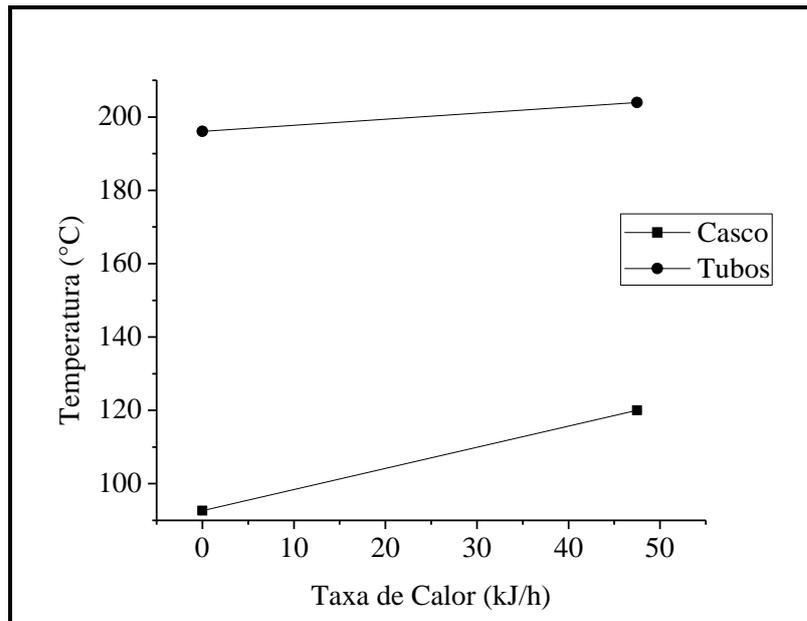


Figura 21 – Variação da temperatura com a taxa de calor no trocador TC-2.

Analisando os resultados apresentados das Figuras 20 e 21 concluímos que a integração energética dessas correntes foi realizada com sucesso, pois em nenhum momento as temperaturas das correntes quentes e frias se cruzaram dentro dos trocadores de calor.

A Tabela 6 mostra uma comparação do gasto energético e da quantidade de utilidades consumida em comparação à realização ou não de integração energética. Os dados levantados nessa tabela não levam em consideração os gastos com utilidades nos condensadores e refeedores das colunas de destilação.

Tabela 6 – Comparação da energia requerida e do gasto com utilidades sem e com integração energética.

PARÂMETROS	SEM INTEGRAÇÃO	COM INTEGRAÇÃO
Energia Requerida (10^8 J/h)	4,531	2,453
Gasto com Utilidades (L/h)	200 (Água – T = 29 °C)	95 (Água – T = 29 °C)

Analisando os resultados da Tabela 6 percebemos que com a utilização de integração energética economizará mais de 52,5% o consumo de água nesses dois trocadores de calor.

5 CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS

Nesse trabalho foi apresentada a simulação de um sistema de conversão de glicerol em propileno glicol. Utilizou-se o simulador de processo HYSYS® como ferramenta de auxílio para a formulação do processo. Com relação aos objetivos propostos, constatou-se que o simulador utilizado mostrou ser uma ferramenta poderosa no cálculo dos balanços de massa, balanços de energia e dimensionamento dos equipamentos. Os principais equipamentos presentes no processo são: bombas, compressor, colunas de destilação, reator de leito fixo e trocadores de calor. Diversas partes do processo foram estudadas com intuito de obter o melhor arranjo possível para a elaboração da planta, de forma que para escolha desse arranjo levaram-se em conta os seguintes parâmetros: menor consumo de utilidades industriais, segurança na planta e custo na compra de equipamentos.

O processo elaborado tem capacidade de alimentação de 379 L/h de glicerol puro, 11 L/h de água e 210 L/h de hidrogênio puro. A reação foi realizada em um reator de leito fixo (PBR-1) de capacidade de 0,7 m³, na temperatura de 230°C, pressão de 15 atm e utilizando um total de 280 kg de catalisador cromito de cobre (Cu/Cr) suportado com alumina, obtendo nessas condições 77,14% de conversão de glicerol. O vaso *flash* (VF-1) foi simulado com temperatura de entrada de 140°C e sua função era separar hidrogênio de forma que produzisse baixas quantidades de PG como produto de topo.

A torre de destilação (TD-1) tem como função promover a separação de água como produto de topo. Ela foi simulada com uma razão de refluxo de 0,77 e com 21 estágios teóricos. A torre de destilação (TD-2) tem como função promover a separação de glicerol como produto de fundo. Essa torre foi simulada com uma razão de refluxo de 0,03 e com 18 estágios teóricos. A torre de destilação (TD-3) tem como função promover a separação de propileno glicol como produto de fundo. Ela foi simulada com razão de refluxo de 0,62 e com 22 estágios teóricos. O propileno glicol é produzido com uma pureza molar de 99,20% e na quantidade de 107 L/h.

Através da utilização da integração energética das correntes quentes com as correntes frias consegue-se economizar mais de 52,5% do consumo de água de refrigeração.

Como trabalho futuro, pode-se explorar os seguintes itens:

1. Elaborar um processo que utilize glicerol bruto, oriundo de uma unidade de produção de biodiesel, sem necessidade de purificação.
2. Avaliação econômica para ter uma noção do preço da unidade.

REFERÊNCIAS

CHIU, C. W. **Catalytic conversion of glycerol to propylene glycol: synthesis and technology assessment**. 2006. 214 f. Dissertação (Doutorado em Engenharia Química) - Escola de pós-graduação, Universidade de Missouri, Columbia, EUA, 2006.

CHUN, H. Z.; BELTRAMINI, J. N.; FAN, Y. X.; LU, G. Q. Chemoselective catalytic conversion of glycerol as a biorenewable source to valuable commodity chemicals. **Chemical Society Reviews**, Australia, v. 37, n. 1, p. 527-549, nov. 2007.

DASARI, M.A.; KIATSIMKUL, P.P.; SUTTERLIN, W.R.; SUPPES, G.J.. Low-pressure hydrogenolysis of glycerol to propylene glycol. **Applied Catalysis A: General**, EUA, v. 281, n.1, p. 225-231, jan. 2005.

FERRARI, R. A.; OLIVEIRA, V. S.; SCABIO, A.. Biodiesel de soja – taxa de conversão em ésteres etílicos, caracterização físicoquímica e consumo em gerador de energia. **Química Nova**, v. 28, n. 1, p. 19-23, jan. 2005.

FERREIRA, M. O. **Purificação da glicerina bruta obtida a partir da transesterificação do óleo de algodão**. 2009. 127 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2009.

FOLLMANN, H. M. **Utilização de derivados da glicerina na produção de plastificantes**. 2009. 140 f. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Departamento de Química, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2009.

FOGLER, Scott H. **Elementos de engenharia das reações química**. 3. ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e científicos, 2002.

HAMID, M. K. A. **HYSYS: An Introduction to Chemical Engineering Simulation**. Apostila da Hamid, maio, 2007.

LAHR, D.G.; SHANKS, B.H.. Effect of sulfur and temperature on ruthenium- catalyzed glycerol hydrogenolysis to glycols. **Journal of Catalysis**, EUA, v. 232, n. 1, p. 386-394, maio, 2005.

MARTINS, D. F. **Contribuição ao estudo da reforma a vapor do glicerol em catalisadores Pt/C – Efeito do tamanho da partícula de Pt e do pH da solução de alimentação.** 2009. 91 f. Dissertação (Mestrado em Química) - Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2009.

MELO, A. N.; MOURA, E.; ANSELMO, G.; MESQUITA, M.; AQUINO, M.; COSTA, R.. **Normas para apresentação de trabalhos acadêmicos da Universidade Federal do Ceará.** Fortaleza, 2007.

MOTA, C. J. A.; SILVA, C. X. X. ; GONÇALVES, V. L. C.. Gliceroquímica: novos produtos e processos a partir da glicerina de produção de biodiesel. **Química Nova**, v. 32, n. 3, p. 639-648, mar. 2009.

MUSGUEIRA, L. C. **Obtenção de derivados oxigenados do glicerol de potencial uso como aditivos para combustíveis.** 2006. 51 f. Monografia (Bacharel em Química) - Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2006.

NETO, P. R. C.; ROSSI, L. F. S.; ZAGONEL et al. Produção de biocombustível alternativo ao óleo diesel através da transesterificação de óleo de soja usado em fritura. **Química Nova**, Curitiba, v. 200, p. 531-537, set. 1999.

PETERS, Max S.; TIMMERHAUS, Klaus D. WEST, Ronald E.. **Plant design and economics for chemical engineers.** 5. ed. New York: McGraw – Hill, 2003.

PINTO, A. G.; GUARIEIRO, L.N.; RESENDE, M.J.C. *et al.* Biodiesel: an overview. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, Salvador, v. 16, n. 16 (6B), p. 1313-1330, sep. 2005.

RAHMAT, N.; ABDULLAH, A. Z.; MOHAMED, A. R. Recent progress on innovative and potential technologies for glycerol transformation into fuel additives: A critical review. **Renewable and Sustainable Energy Review**, Malaysia, vol. 14, p. 987-1000, jan. 2010.

ROCHA, L. B. **Projeto de uma unidade de fracionamento atmosférico de petróleo utilizando HYSYS.** 2009. 116 f. Monografia (Bacharel em Engenharia Química) - Centro de Tecnologia, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2009.

SEADER, J. D.; HENLEY, Ernest J.. **Separation process principles.** 2. ed. USA: John Wiley & Son, 2006.

SILLA, Harry. **Chemical process engineering: design and economics.** New York: Marcel Dekker, 2003.

TOWLER, Gavin; SINNOT, Ray. **Chemical engineering design: principles, practice and economics of plant and process design**. USA: Elsevier, 2008.

YUAN, Z.; WANG, J.; WANG, L.; XIE, W.; CHEN, P.; HOU, Z.; ZHENG, X. Biodiesel derived glycerol hydrogenolysis to 1,2-propanediol on Cu/MgO catalysts. **Bioresource Technology**, China, v. 101, n. 1, p. 7088-7092, abr. 2010.

ZHOU, Z.; LI, X.; ZENG, T. HONG, W.; CHENG, Z.; YUAN, W. Kinetics of hydrogenolysis of glycerol of glycerol to propylene glycol over Cu-ZnO-Al₂O₃ catalysts. **Chinese Journal of Chemical Engineering**, China, v. 18, n. 3, p. 384-390, abr. 2010.

ANEXOS

O dimensionamento de todos os equipamentos foi realizado no software HYSYS®. Os *datasheets* dos equipamentos são mostrados da Tabela 7 até a Tabela 25.

Tabela 7 – *Datasheet* da bomba B-1.

<i>DATASHEET</i> BOMBA	EQUIPAMENTO: B-1
	DESCRIÇÃO: FLUXO
	TIPO: CENTRÍFUGA
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS	
Temperatura (°C)	30
Aumento de Pressão (atm)	14
Densidade específica	1,17
Capacidade (m ³ /s)	0,42
Altura (m)	135,7
Potência Hidráulica (kW)	0,2
Potência de Projeto (kW)	0,26
Eficiência (%)	77

Tabela 8 – *Datasheet* da bomba B-2.

<i>DATASHEET</i> BOMBA	EQUIPAMENTO: B-2
	DESCRIÇÃO: FLUXO
	TIPO: CENTRÍFUGA
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS	
Temperatura (°C)	286
Aumento de Pressão (atm)	14
Densidade específica	0,80
Capacidade (m ³ /s)	0,17
Altura (m)	198
Potência Hidráulica (kW)	0,08
Potência de Projeto (kW)	0,11
Eficiência (%)	73

Tabela 9 – *Datasheet* do compressor C-1.

<i>DATASHEET</i> COMPRESSOR	EQUIPAMENTO: C-1
	DESCRIÇÃO: FLUXO
	TIPO: CENTRÍFUGA HORIZONTAL
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS	
Temperatura de entrada (°C)	30
Temperatura de saída (°C)	505,6
Aumento de Pressão (atm)	14
Capacidade de projeto (kg/h)	16,14
Eficiência adiabática (%)	90
Potência do gás (kW)	33,74
Potência de projeto (kW)	37,16

Tabela 10 – *Datasheet* do vaso *flash* VF-1.

DATASHEET VASO SEPARADOR	EQUIPAMENTO: VF-1
	DESCRIÇÃO: SEPARAÇÃO
	TIPO: FLASH - VERTICAL
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS	
Temperatura de entrada	140 °C
Pressão de Entrada	14,32 atm
Pressão de Saída	1 atm
Velocidade Terminal (m/s)	5,22
Diâmetro interno (m)	0,6
Altura (m)	2,59
Razão Altura – Diâmetro	4,25
Área Total da Seção Transversal (m ²)	0,29
Tempo de Retenção (s)	540
Volume de Retenção (m ³)	0,09
Volume Total (m ³)	0,76

Tabela 11 – *Datasheet* do trocador de calor TC-1.

DATASHEET TROCADOR DE CALOR	EQUIPAMENTO: TC-1
	DESCRIÇÃO: TROCA DE CALOR
	TIPO: CASCO-TUBOS
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS	
Classificação Tema	BEM
Número de Passagens no Casco	1
Número de Passagens nos Tubos	1
Diâmetro Interno da Carcaça (cm)	12,7
Diâmetro Interno do Tubo (cm)	1,5
Diâmetro Externo do Tubo (cm)	1,9
Espaçamento do Tubo (cm)	2,4
Tipo de passo	Triangular
Comprimento do Tubo (m)	4,88
Número de Tubos	15
Número de Chicanas	91
Corte da Chicana (%)	25
Espaçamento da Chicana (cm)	5
Área de Superfície (m ²)	4,4
Queda de Pressão no Casco (kPa)	1,98
Queda de Pressão no Tubo (kPa)	5,33
MLDT (°C)	45,65
Coefficiente de transferência global (kJ/h.m ² .°C)	966,98
Energia Transferida (MJ/h)	160,24
Casco	Fluido Frio
Tubos	Fluido Quente

Tabela 12 – *Datasheet* do trocador de calor TC-2.

DATASHEET TROCADOR DE CALOR	EQUIPAMENTO: TC-2
	DESCRIÇÃO: TROCA DE CALOR
	TIPO: CASCO-TUBOS
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS	
Classificação Tema	BEM
Número de Passagens no Casco	1
Número de Passagens nos Tubos	2

DATASHEET TROCADOR DE CALOR	EQUIPAMENTO: TC-2	
	DESCRIÇÃO: TROCA DE CALOR	
	TIPO: CASCO-TUBOS	
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS		
Diâmetro Interno da Carcaça (cm)	12,7	
Diâmetro Interno do Tubo (cm)	1,5	
Diâmetro Externo do Tubo (cm)	1,9	
Espaçamento do Tubo (cm)	2,4	
Tipo de passo	Triangular	
Comprimento do Tubo (m)	1,18	
Número de Tubos	11	
Número de Chicanas	21	
Corte da Chicana (%)	25	
Espaçamento da Chicana (cm)	5,2	
Área de Superfície (m ²)	0,8	
Queda de Pressão no Casco (kPa)	0,54	
Queda de Pressão no Tubo (kPa)	9,54	
MLDT (°C)	92,98	
Coefficiente de transferência global (kJ/h.m ² .°C)	1053	
Energia Transferida (MJ/h)	47,45	
Casco	Fluido Frio	
Tubos	Fluido Quente	

Tabela 13 – *Datasheet* do trocador de calor TC-3.

DATASHEET TROCADOR DE CALOR	EQUIPAMENTO: TC-3	
	DESCRIÇÃO: TROCA DE CALOR	
	TIPO: CASCO-TUBOS	
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS		
Classificação Tema	BEM	
Número de Passagens no Casco	1	
Número de Passagens nos Tubos	2	
Diâmetro Interno da Carcaça (cm)	15,2	
Diâmetro Interno do Tubo (cm)	1,5	
Diâmetro Externo do Tubo (cm)	1,9	
Espaçamento do Tubo (cm)	2,4	
Tipo de passo	Triangular	
Comprimento do Tubo (m)	1,22	
Número de Tubos	16	
Número de Chicanas	20	
Corte da Chicana (%)	25	
Espaçamento da Chicana (cm)	5,3	
Área de Superfície (m ²)	1,2	
Queda de Pressão no Casco (kPa)	2,22	
Queda de Pressão no Tubo (kPa)	15,86	
MLDT (°C)	68,3	
Coefficiente de transferência global (kJ/h.m ² .°C)	4146,4	
Energia Transferida (MJ/h)	245,10	
Casco	Água de Refrigeração	
Tubos	Fluido de Processo	
Fluxo Mássico do Fluido de Utilidade (kg/h)	95	

Tabela 14 – *Datasheet* do trocador de calor TC-4.

<i>DATASHEET</i> TROCADOR DE CALOR		EQUIPAMENTO: TC-4
		DESCRIÇÃO: TROCA DE CALOR
		TIPO: CASCO-TUBOS
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS		
Classificação Tema	BEM	
Número de Passagens no Casco	1	
Número de Passagens nos Tubos	2	
Diâmetro Interno da Carcaça (cm)	12,7	
Diâmetro Interno do Tubo (cm)	1,5	
Diâmetro Externo do Tubo (cm)	1,9	
Espaçamento do Tubo (cm)	2,4	
Tipo de passo	Triangular	
Comprimento do Tubo (m)	4,88	
Número de Tubos	15	
Número de Chicanas	93	
Corte da Chicana (%)	25	
Espaçamento da Chicana (cm)	5	
Área de Superfície (m ²)	4,4	
Queda de Pressão no Casco (kPa)	0,31	
Queda de Pressão no Tubo (kPa)	0,43	
MLDT (°C)	43,6	
Coefficiente de transferência global (kJ/h.m ² .°C)	374,24	
Energia Transferida (MJ/h)	64,9	
Casco	Fluido de Processo	
Tubos	Água de Refrigeração	
Fluxo Mássico do Fluido de Utilidade (kg/h)	1200	

Tabela 15 – *Datasheet* do trocador de calor TC-5.

<i>DATASHEET</i> TROCADOR DE CALOR		EQUIPAMENTO: TC-5
		DESCRIÇÃO: TROCA DE CALOR
		TIPO: CASCO-TUBOS
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS		
Classificação Tema	BEM	
Número de Passagens no Casco	1	
Número de Passagens nos Tubos	2	
Diâmetro Interno da Carcaça (cm)	15	
Diâmetro Interno do Tubo (cm)	1,5	
Diâmetro Externo do Tubo (cm)	1,9	
Espaçamento do Tubo (cm)	2,4	
Tipo de passo	Triangular	
Comprimento do Tubo (m)	4,88	
Número de Tubos	15	
Número de Chicanas	93	
Corte da Chicana (%)	25	
Espaçamento da Chicana (cm)	5	
Área de Superfície (m ²)	4,4	
Queda de Pressão no Casco (kPa)	0,19	
Queda de Pressão no Tubo (kPa)	0,3	
MLDT (°C)	54,95	
Coefficiente de transferência global (kJ/h.m ² .°C)	296,4	
Energia Transferida (MJ/h)	54,75	

<i>DATASHEET</i> TROCADOR DE CALOR		EQUIPAMENTO: TC-5	
		DESCRIÇÃO: TROCA DE CALOR	
		TIPO: CASCO-TUBOS	
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS			
Casco		Fluido de Processo	
Tubos		Água de Refrigeração	
Fluxo Mássico do Fluido de Utilidade (kg/h)		1000	

Tabela 16 – *Datasheet* do refeedor da TD-1.

<i>DATASHEET</i> REFERVEDOR		EQUIPAMENTO: RTD-1	
		DESCRIÇÃO: AQUECIMENTO	
		TIPO: REFERVEDOR KETTLE TUBO U	
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS			
Classificação Tema		BKU	
Número de Passagens no Casco		1	
Número de Passagens nos Tubos		2	
Diâmetro Interno da Carcaça (cm)		30,5	
Diâmetro Interno do Tubo (cm)		1,5	
Diâmetro Externo do Tubo (cm)		1,9	
Espaçamento do Tubo (cm)		2,4	
Tipo de passo		Triangular	
Comprimento do Tubo (m)		1,22	
Número de Tubos		108	
Área de Superfície (m ²)		7,9	
Queda de Pressão no Casco (kPa)		4,53	
Queda de Pressão no Tubo (kPa)		15,78	
MLDT (°C)		206,7	
Coefficiente de transferência global (kJ/h.m ² .°C)		1601,43	
Energia Transferida (MJ/h)		345,24	
Casco		Fluido de Processo	
Tubos		Fluido de Utilidade – Óleo Térmico	
Fluxo Mássico do Fluido de Utilidade (kg/h)		5476,5	

Tabela 17 – *Datasheet* do condensador da TD-1.

<i>DATASHEET</i> CONDENSADOR		EQUIPAMENTO: CTD-1	
		DESCRIÇÃO: RESFRIAMENTO	
		TIPO: CONDENSADOR PARCIAL CASCO-TUBOS	
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS			
Classificação Tema		BEM	
Número de Passagens no Casco		1	
Número de Passagens nos Tubos		2	
Diâmetro Interno da Carcaça (cm)		12,7	
Diâmetro Interno do Tubo (cm)		1,5	
Diâmetro Externo do Tubo (cm)		1,9	
Espaçamento do Tubo (cm)		2,4	
Tipo de passo		Triangular	
Comprimento do Tubo (m)		1,22	
Número de Tubos		11	
Número de Chicanas		20	

<i>DATASHEET</i> CONDENSADOR	EQUIPAMENTO: CTD-1	
	DESCRIÇÃO: RESFRIAMENTO	
	TIPO: CONDENSADOR PARCIAL CASCO-TUBOS	
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS		
Corte da Chicana (%)	25	
Espaçamento da Chicana (cm)	5,34	
Área de Superfície (m ²)	0,8	
Queda de Pressão no Casco (kPa)	4,11	
Queda de Pressão no Tubo (kPa)	12,33	
MLDT (°C)	67,66	
Coefficiente de transferência global (kJ/h.m.°C)	10870,9	
Energia Transferida (MJ/h)	260	
Casco	Fluido de Processo	
Tubos	Fluido de Utilidade – Água de refrigeração	
Fluxo Mássico do Fluido de Utilidade (kg/h)	5799,79	

Tabela 18 – *Datasheet* do refervedor da TD-2.

<i>DATASHEET</i> REFERVEDOR	EQUIPAMENTO: RTD-2	
	DESCRIÇÃO: AQUECIMENTO	
	TIPO: REFERVEDOR KETTLE TUBO U	
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS		
Classificação Tema	BKU	
Número de Passagens no Casco	1	
Número de Passagens nos Tubos	2	
Diâmetro Interno da Carcaça (cm)	30,48	
Diâmetro Interno do Tubo (cm)	1,5	
Diâmetro Externo do Tubo (cm)	1,9	
Espaçamento do Tubo (cm)	2,4	
Tipo de passo	Triangular	
Comprimento do Tubo (m)	1,22	
Número de Tubos	108	
Área de Superfície (m ²)	7,9	
Queda de Pressão no Casco (kPa)	4,75	
Queda de Pressão no Tubo (kPa)	11,86	
MLDT (°C)	82,63	
Coefficiente de transferência global (kJ/h.m.°C)	1338,75	
Energia Transferida (MJ/h)	272,17	
Casco	Fluido de Processo	
Tubos	Fluido de Utilidade – Óleo Térmico	
Fluxo Mássico do Fluido de Utilidade (kg/h)	4317,53	

Tabela 19 – *Datasheet* do condensador da TD-2.

<i>DATASHEET</i> CONDENSADOR	EQUIPAMENTO: CTD-2	
	DESCRIÇÃO: RESFRIAMENTO	
	TIPO: CONDENSADOR PARCIAL CASCO-TUBOS	
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS		
Classificação Tema	BEM	

<i>DATASHEET</i> CONDENSADOR	EQUIPAMENTO: CTD-2	
	DESCRIÇÃO: RESFRIAMENTO	
	TIPO: CONDENSADOR PARCIAL CASCO-TUBOS	
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS		
Número de Passagens no Casco	1	
Número de Passagens nos Tubos	2	
Diâmetro Interno da Carcaça (cm)	12,7	
Diâmetro Interno do Tubo (cm)	1,5	
Diâmetro Externo do Tubo (cm)	1,9	
Espaçamento do Tubo (cm)	2,4	
Tipo de passo	Triangular	
Comprimento do Tubo (m)	1,22	
Número de Tubos	11	
Número de Chicanas	20	
Corte da Chicana (%)	25	
Espaçamento da Chicana (cm)	5,34	
Área de Superfície (m ²)	0,8	
Queda de Pressão no Casco (kPa)	12,3	
Queda de Pressão no Tubo (kPa)	9,75	
MLDT (°C)	131,76	
Coefficiente de transferência global (kJ/h.m.°C)	2938	
Energia Transferida (MJ/h)	227,7	
Casco	Fluido de Processo	
Tubos	Fluido de Utilidade – Água de refrigeração	
Fluxo Mássico do Fluido de Utilidade (kg/h)	5075,7	

Tabela 20 – *Datasheet* do refervedor da TD-3.

<i>DATASHEET</i> REFERVEDOR	EQUIPAMENTO: RTD-3	
	DESCRIÇÃO: AQUECIMENTO	
	TIPO: REFERVEDOR KETTLE TUBO U	
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS		
Classificação Tema	BKU	
Número de Passagens no Casco	1	
Número de Passagens nos Tubos	2	
Diâmetro Interno da Carcaça (cm)	12,7	
Diâmetro Interno do Tubo (cm)	1,5	
Diâmetro Externo do Tubo (cm)	1,9	
Espaçamento do Tubo (cm)	2,4	
Tipo de passo	Triangular	
Comprimento do Tubo (m)	1,22	
Número de Tubos	70	
Área de Superfície (m ²)	5	
Queda de Pressão no Casco (kPa)	3,46	
Queda de Pressão no Tubo (kPa)	16,56	
MLDT (°C)	183	
Coefficiente de transferência global (kJ/h.m.°C)	1721,54	
Energia Transferida (MJ/h)	217,68	
Casco	Fluido de Processo	
Tubos	Fluido de Utilidade – Óleo Térmico	
Fluxo Mássico do Fluido de Utilidade (kg/h)	3453,22	

Tabela 21 – *Datasheet* do condensador da TD-3.

<i>DATASHEET</i> CONDENSADOR	EQUIPAMENTO: CTD-3	
	DESCRIÇÃO: RESFRIAMENTO	
	TIPO: CONDENSADOR PARCIAL CASCO-TUBOS	
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS		
Classificação Tema	BEM	
Número de Passagens no Casco	1	
Número de Passagens nos Tubos	2	
Diâmetro Interno da Carcaça (cm)	12,7	
Diâmetro Interno do Tubo (cm)	1,5	
Diâmetro Externo do Tubo (cm)	1,9	
Espaçamento do Tubo (cm)	2,4	
Tipo de passo	Triangular	
Comprimento do Tubo (m)	1,22	
Número de Tubos	11	
Número de Chicanas	20	
Corte da Chicana (%)	15	
Espaçamento da Chicana (cm)	5,34	
Área de Superfície (m ²)	0,8	
Queda de Pressão no Casco (kPa)	11,31	
Queda de Pressão no Tubo (kPa)	8,34	
MLDT (°C)	116,11	
Fluido de Utilidade	Água de refrigeração	
Fluxo Mássico do Fluido de Utilidade (kg/h)	4712,7	
Coefficiente de transferência global (kJ/h.m ² .°C)	4917,43	
Energia Transferida (MJ/h)	211,42	
Casco	Fluido de Processo	
Tubos	Fluido de Utilidade – Água de refrigeração	
Fluxo Mássico do Fluido de Utilidade (kg/h)	4712,7	

Tabela 22 – *Datasheet* da torre de destilação TD-1.

<i>DATASHEET</i> COLUNA DE DESTILAÇÃO	EQUIPAMENTO: TD-1	
	DESCRIÇÃO: SEPARAÇÃO	
	TIPO: RECHEIO	
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS		
Seção	1	
Tipo de Recheio	Aneis de Raschig	
Diâmetro da Coluna (m)	0,4	
Diâmetro do Recheio (in)	2	
Número de estágios por seção	21	
Área da seção transversal (m ²)	0,16	
Altura da seção (m)	6,0	
Perda de Pressão por unidade de comprimento (kPa/m)	0,01	
Queda de Pressão total (kPa)	0,09	
Número de Peças de recheio	10609	
Estágio de Alimentação	10°	
Razão de refluxo	0,77	

Tabela 23 – *Datasheet* da torre de destilação TD-2.

<i>DATASHEET</i> COLUNA DE DESTILAÇÃO	EQUIPAMENTO: TD-2	
	DESCRIÇÃO: SEPARAÇÃO	
	TIPO: RECHEIO	
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS		
Seção	1	
Tipo de Recheio	Aneis de Raschig	
Diâmetro da Coluna (m)	0,3	
Diâmetro do Recheio (in)	1,5	
Número de estágios por seção	18	
Área da seção transversal (m ²)	0,07	
Altura da seção (m)	5,49	
Perda de Pressão por unidade de comprimento (kPa/m)	0,13	
Queda de Pressão total (kPa)	0,73	
Número de Peças de recheio	19096	
Estágio de Alimentação	9°	
Razão de refluxo	0,03	

Tabela 24 – *Datasheet* da torre de destilação TD-3.

<i>DATASHEET</i> COLUNA DE DESTILAÇÃO	EQUIPAMENTO: TD-3	
	DESCRIÇÃO: SEPARAÇÃO	
	TIPO: RECHEIO	
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS		
Seção	1	
Tipo de Recheio	Aneis de Raschig	
Diâmetro da Coluna(m)	0,3	
Diâmetro do Recheio (in)	1,5	
Número de estágios por seção	22	
Área da seção transversal (m ²)	0,07	
Altura da seção (m)	5,71	
Queda de Pressão por unidade de comprimento (kPa/m)	0,15	
Queda de Pressão total (kPa)	1	
Número de Peças de recheio	27583	
Estágio de Alimentação	11°	
Razão de Refluxo	0,62	

Tabela 25 – *Datasheet* do reator PBR-1.

<i>DATASHEET</i> REATOR	EQUIPAMENTO: PBR1	
	DESCRIÇÃO: REAÇÃO	
	TIPO: LEITO FIXO	
DADOS DE OPERAÇÃO E MECÂNICOS		
Número de tubos	1	
Diâmetro interno do tubo (cm)	33,38	
Comprimento do reator (m)	8	
Volume do reator (m ³)	0,7	
Queda de Pressão (atm)	0,68	
Energia para reação (kJ/h)	43820	
Massa de Catalisador (kg)	280	

