



CRISTIANO CARDOSO DE OLIVEIRA PATTO TOURINO

**ESTRATÉGIAS DE REDUÇÃO DE IMPACTO AMBIENTAL EM
UMA PLANTA DE PRODUÇÃO DE ACETONA**

**LAVRAS – MG
2021**

CRISTIANO CARDOSO DE OLIVEIRA PATTO TOURINO

**ESTRATÉGIAS DE REDUÇÃO DE IMPACTO AMBIENTAL EM UMA PLANTA DE
PRODUÇÃO DE ACETONA**

Monografia apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Curso de Engenharia Química, para a obtenção do título de Bacharel.

Prof (a). Dr (a). Lidja Dahiane Menezes Santos Borél
Orientadora

**LAVRAS – MG
2021**

CRISTIANO CARDOSO DE OLIVEIRA PATTO TOURINO

**ESTRATÉGIAS DE REDUÇÃO DE IMPACTO AMBIENTAL EM UMA PLANTA DE
PRODUÇÃO DE ACETONA**

**ENVIRONMENTAL IMPACT REDUCTION STRATEGIES IN AN ACETONE
PRODUCTION PLANT**

Monografia apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Curso de Engenharia Química, para a obtenção do título de Bacharel.

APROVADO em 18/11/2021.

Dra. Lidja Dahiane Menezes Santos Borél - UFLA

Dr. Tiago José Pires de Oliveira - UFLA

Dr. Luciano Jacob Correa - UFLA

Prof (a). Dr (a). Lidja Dahiane Menezes Santos Borél
Orientadora

**LAVRAS – MG
2021**

AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, à Deus por sempre ter olhado por mim e ter me agraciado com tantas bênçãos durante a minha vida. Agradeço por cada oportunidade oferecida a mim e por ter me guiado sempre pelos melhores caminhos. Que seja sempre feita a sua vontade!

Agradeço aos meus pais Josilene e Marcos, por terem acreditado em mim e por não terem medido esforços para que eu chegasse aqui, abrindo mão de realizar os seus sonhos para que eu realizasse o meu. Reconheço e sou grato por tudo que fizeram e fazem por mim. Obrigado pelo apoio, por me darem força e serem exemplo de vida para mim, espero um dia poder recompensá-los, eu amo vocês.

Agradeço a minha irmã LÍlian, por sempre estar ao meu lado, minha prima Joice, por ter sido tão companheira nos últimos anos e a toda minha família, que sempre esteve torcendo por mim, me apoiando e me colocando em suas orações, eu amo vocês.

Agradeço aos meus amigos, principalmente os Abacaxis, que fizeram esses anos de faculdade serem mágicos. Eu com certeza não teria chegado aqui sem o apoio e a amizade de vocês, que me acolheram e cuidaram tão bem de mim em momentos tão difíceis, obrigado por tudo que significam para mim, eu amo vocês.

Agradeço ao Núcleo de Estudos de Engenharia de Bioprocessos e à ProcEQ Jr, que foram tão importantes para minha formação profissional e pessoal, que me possibilitaram criar e desenvolver tantas habilidades. E agradeço pelas pessoas incríveis que colocaram no meu caminho, que tanto me ensinaram e são inspirações para mim.

Agradeço ao meu orientador de Iniciação Científica, Prof. Dr. José Guilherme Lembi, pela oportunidade que me deu de participar de um projeto de pesquisa tão relevante e por todos os ensinamentos que me transmitiu, muito obrigado por ter confiado em mim. Agradeço também a todos os colegas do Laboratório de Engenharia de Bioprocessos, que foram verdadeiros professores, me apoiaram e me ajudaram sempre que precisei, foram dois anos de muito crescimento, jamais me esquecerei de vocês.

Agradeço a todo o corpo docente da UFLA, principalmente os professores e técnicos da Engenharia Química, vocês são incríveis e foram extremamente importantes no meu processo para me tornar engenheiro químico. Especialmente gostaria de agradecer à minha orientadora de TCC,

Prof. Dra. Lidja Borel, que além de me apoiar neste trabalho, foi uma conselheira nos últimos anos, me acompanhando nos processos seletivos de estágio. Obrigado pela paciência de sempre.

Não poderia deixar de agradecer também à Prof. Dra. Suellen Nascimento, Prof. Dr. Tiago Pires, Prof. Dr. Irineu Petri e Prof. Dr. João Moreira, que se tornaram meus amigos, pessoas que tenho extremo carinho e que tanto me ajudaram durante a graduação, sentirei muita saudade de todas os momentos, conversas e cafés, vocês foram especiais e me marcaram muito.

Agradeço à Braskem, por me abrir as portas e pela experiência que me proporcionou, principalmente a equipe da Engenharia de Processos da Químicos 1 – BA, por todo conhecimento que me passaram, pelas oportunidades de aprendizado que me deram e, principalmente, por me mostrarem na prática a importância da engenharia química para o mundo.

Agradeço à Universidade Federal de Lavras pela oportunidade de ter sido aluno de uma instituição pública de referência, por ter me formado um cidadão consciente, por ter me transformado como pessoa e transformado meu futuro. Vida longa à UFLA, vida longa à educação pública brasileira de qualidade! Eu tenho muito orgulho de ser UFLA e sempre terei.

Por último fica aqui o meu agradecimento a todos não mencionados, se você passou pela minha vida saiba que com certeza eu aprendi com você e sou uma pessoa melhor por que te conheci!

RESUMO

Devido ao cenário atual de aumento da crise ambiental e a possibilidade de escassez de recursos naturais, tem se notado uma crescente preocupação de todos os segmentos da indústria em reduzir os impactos ambientais causados por suas operações, a fim de possibilitar a continuação dos seus processos e torná-los cada vez mais competitivos. Nesse sentido, o presente trabalho teve como objetivo realizar um estudo de redução do impacto ambiental de uma planta de produção de acetona, via desidrogenação do álcool isopropílico, através da implementação de modificações na planta, sendo elas a integração energética e o reciclo da corrente de descarte, visando a redução do consumo da energia, o consumo de água processo e a geração de efluentes. Para isso foram propostas alterações na planta, como reuso de água de descarte e a integração energética das correntes da planta, aplicando-se a metodologia Pinch, utilizando um ΔT_{\min} igual a 10 K. Os dados do processo utilizados neste trabalho foram obtidos a partir da simulação da planta de referência proposta por Turton *et al.* (2009), utilizando o *software* livre COCO, o qual também foi utilizado para validar as alterações propostas, por meio da comparação dos resultados obtidos em cada simulação. Os resultados mostraram que as modificações propostas na planta não alteraram significativamente as condições de processo e composição de correntes possibilitando a proposta de novo *layout* para a planta. Os resultados das simulações mostraram que as modificações propostas na planta foram efetivas. Quando comparada a planta proposta por Turton et al. (2009), simulada neste trabalho, a planta modificada apresentou uma redução 20,13% no indicador de energia, devido a integração energética, 46,17% no indicador de consumo de água de processo e 56,8% no indicador de geração de efluentes, devido ao reciclo da corrente de fundo da segunda torre de destilação, sem modificar a composição da corrente de acetona.

Palavras-chave: Integração Energética. Sustentabilidade. Isopropanol. Simulação de Processos.

ABSTRACT

Due to the current scenario of increasing environmental crisis and the possibility of scarcity of natural resources, there has been a growing concern of all industry segments to reduce the environmental impacts caused by their operations, in order to enable the continuation of their processes and make them more and more competitive. In this sense, the present work aimed to carry out a study to reduce the environmental impact of an acetone production plant, via dehydrogenation of isopropyl alcohol, through the implementation of modifications in the plant, namely the integration of energy and the recycling of the current of disposal, aiming to reduce energy consumption, process water consumption and effluent generation. For this purpose, changes in the plant were proposed, such as the reuse of waste water and the energy integration of the plant currents, applying the Pinch methodology, using a ΔT_{\min} equal to 10 K. The process data used in this work were obtained from of the reference plant simulation proposed by Turton et al. (2009), using the COCO free software, which was also used to validate the proposed changes, by comparing the results obtained in each simulation. The results showed that the proposed modifications in the plant did not significantly alter the process conditions and current composition, enabling the proposal of a new layout for the plant. The simulation results showed that the proposed modifications in the plant were effective. When compared to the plant proposed by Turton et al. (2009), simulated in this work, the modified plant presented a 20.13% reduction in the energy indicator, due to energy integration, 46.17% in the process water consumption indicator and 56.8% in the effluent generation indicator, due to the recycling of the bottom stream from the second distillation tower, without modifying the composition of the acetone stream.

Keywords: Energy Integration. Sustainability. Isopropanol. Process Simulation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Curva composta ilustrativa.	19
Figura 2 - Exemplo de tabela problema.....	20
Figura 3 - Exemplo diagrama de grade.	22
Figura 4 - Seção 1 da planta de acetona via desidrogenação do 2-propanol.....	24
Figura 5 - Seção 2 da planta de acetona via desidrogenação do 2-propanol.....	25
Figura 6 - Fluxograma do processo de síntese de acetona proposto por Turton et al. (2009), criado no simulador COCO.	27
Figura 7 - Entrada de dados da corrente 2 no software Hint.	30
Figura 8 - Entrada de dados da corrente 3 no software Hint.	31
Figura 9 - Fluxograma da planta de síntese de acetona com as modificações propostas.	36
Figura 10 - Necessidade de energia em função do ΔT_{min}	39
Figura 11 - Curvas compostas construídas para ΔT_{min} igual a 10 K.	40
Figura 12 - Cascata de energia.	41
Figura 13 - Diagrama de grade.	42
Figura 14 - Cascata de energia após divisão de corrente.....	43
Figura 15 - Diagrama de grade após divisão de corrente.	44
Figura 16 - Planta de produção de acetona integrada após mudanças propostas.	46

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Descrição da metodologia da simulação.	28
Tabela 2 - Comparação dos resultados encontrados na simulação e por Turton et al. (2009).	35
Tabela 3 - Comparação dos resultados encontrados na simulação da planta modificada e convencional.	37
Tabela 4 - Tabela de oportunidades.	38
Tabela 5 - Tabela de oportunidades após a divisão da corrente 2.	44
Tabela 6 - Comparação das necessidades de energia a serem fornecidas ou retiradas por utilidades da planta proposta por Turton et al. (2009) e a proposta neste trabalho.	45
Tabela 7 - Dados dos trocadores de calor da rede projetada.	47
Tabela 8 - Comparação dos consumos de utilidades da planta proposta por Turton et al. (2009) e a proposta neste trabalho.	48

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	10
2 OBJETIVO	12
2.1 Objetivo geral.....	12
2.2 Objetivos específicos.....	12
3 REFERENCIAL TEÓRICO	13
3.1 Acetona	13
3.2 Álcool Isopropílico.....	14
3.3 Simulação de processos	15
3.4 Integração de processos e métodos de integração.....	16
3.4.1 Método de Projeto pelo Ponto de Estrangulamento	17
3.5 Representação gráfica e interpretação do diagrama das curvas compostas.....	18
3.5.1 Curvas Compostas	18
3.5.2 Tabela do problema.....	19
3.5.3 Diagrama de grade	21
4 MATERIAL E MÉTODOS	23
4.1 Apresentação do estudo de caso	23
4.2 Simulação planta no simulador COCO	26
4.3 Melhorias na Planta	28
4.3.1 Integração energética	29
4.4 Indicadores ambientais	32
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	34
5.1 Simulação do processo convencional	34
5.2 Simulação do processo com as modificações propostas	36
5.3 Integração energética	38
5.4 Simulação da planta integrada energeticamente.....	46
5.5 Ecoindicadores	48
6 CONCLUSÕES.....	49
REFERÊNCIAS	50

1 INTRODUÇÃO

Em todos os segmentos da indústria há uma crescente preocupação em tornar os processos mais competitivos, além de diminuir os impactos causados pelas operações. Para isso é necessário otimizar os processos das plantas, de uma forma geral, sendo a integração energética uma importante ferramenta para atingir esse objetivo, visto que, além de permitir ganhos econômicos com a redução do consumo de energia com utilidades, também reduz a queima de combustíveis fósseis, responsáveis por emitirem os gases de efeito estufa (GEE's).

A escassez de água industrial prevista para as próximas décadas refletiu em regulamentos ambientais com maiores restrições em relação às emissões e descartes de efluentes, levando as indústrias de processo químico a realizarem esforços significativos para desenvolver práticas de fabricação sustentáveis, com utilização dos recursos hídricos de forma mais eficiente e responsável. Isso vai ao encontro da demanda social por uma qualidade de vida melhor e faz com que as empresas que optam por um sistema de produção mais limpa consigam manter sua capacidade de concorrência no mercado (LEEWONGTANAWIT *et al.*, 2008).

Segundo Xavier (2009), a produção mais limpa (P+L) é um sistema estruturado de acompanhamento da produção, que tem o intuito de identificar as fontes potenciais de desperdício e reduzir gradativamente a geração de resíduos do processo. A melhor forma de atingir esse objetivo e minimizar os impactos ambientais dos processos é através da aplicação de técnicas de gestão de resíduos, como a redução de desperdícios, a reutilização ou as técnicas de reciclo (KUPINEDA *et al.*, 2006).

A água é uma das matérias-primas mais usadas nas indústrias de processo e tem sido utilizada em grandes quantidades para fabricação de produtos químicos, petroquímicos, em refinarias de petróleo, para fabricação de alimentos e bebidas, na indústria têxtil, na indústria de papel e celulose. Tem finalidades muito distintas, como, por exemplo, agente de separação de materiais, reagente, utilidade para o aquecimento ou resfriamento, agente de limpeza de equipamento, entre outros (GROSSMANN e KARUPPIAH, 2006, TELES *et al.*, 2008).

O processo de produção de acetona (C_3H_6O) também utiliza água em diferentes etapas do processo, principalmente na lavagem dos gases que ocorre em uma coluna de absorção, e, por isso, é um potencial objeto de estudo para redução desse indicador. A acetona é um solvente muito utilizado por diversos ramos da indústria.

A produção mundial de acetona foi de aproximadamente 6,7 milhões de toneladas em 2020 e estima-se que a demanda seja crescente nos próximos anos, principalmente devido à sua aplicação como solvente, sendo a China, os EUA, países da Europa ocidental e Coreia do Sul os líderes mundiais de consumo desse produto. No Brasil, a Quiminvest e a Rhodia lideram a produção desse composto, fornecendo para o mercado nacional e internacional (FERNANDEZ, 2021).

Diante disso, este trabalho visou reduzir o impacto ambiental de uma planta de produção de acetona simulada com o auxílio do *software* de simulação de processos COCO, através da integração energética das correntes utilizando-se o método de Análise *Pinch*, e projetar a Rede de Trocadores de Calor, a fim de reduzir o consumo de energia e utilidades (vapor e água de resfriamento) no processo. Além disso, fez-se um estudo dessa planta desenvolvendo indicadores de consumo de energia, consumo de água e geração de resíduos a fim de se fazer um estudo dessas utilidades.

2 OBJETIVO

Nesta seção são apresentados os objetivos gerais e específicos para o desenvolvimento deste trabalho de conclusão de curso.

2.1 Objetivo geral

Reduzir o consumo de energia, água de processo e geração de efluentes por tonelada de produto em uma planta de produção de acetona simulada por meio de alterações no processo que resultem em menor impacto ambiental.

2.2 Objetivos específicos

- a) Simular uma planta de produção de acetona via desidrogenação do álcool isopropílico utilizando o simulador de processos COCO® e comparar com os dados da planta de referência apresentada por Turton *et al.*, 2009;
- b) Identificar possíveis melhorias no processo que tenham impacto nos indicadores ambientais do processo;
- c) Implementar a metodologia *Pinch* para integração energética das correntes do processo;
- d) Construir uma rede de troca térmica elaborada a partir do diagrama de grade e definir um novo fluxograma do processo, considerando a integração;
- e) Simular o novo fluxograma para avaliar o impacto das modificações propostas;
- f) Calcular os ecoindicadores de consumo de energia, consumo de água de processo e geração de efluentes para a planta de referência e a proposta, para avaliar o impacto das modificações.

3 REFERENCIAL TEÓRICO

Nesta seção é apresentada a fundamentação teórica sobre os aspectos envolvidos no processo. Inicialmente apresenta-se as características da acetona e do álcool isopropílico. Em seguida, é feita uma introdução à simulação e integração de processos e a apresentação de alguns métodos de integração possíveis, focando na Análise *Pinch* e suas técnicas de aplicação.

3.1 Acetona

A acetona é um composto orgânico de nome oficial 2-propanona, também denominada como dimetilcetona, propano-2-ona, β -ceto-propano ou simplesmente propanona e possui fórmula molecular CH_3COCH_3 . É o composto orgânico mais simples dentre os que apresentam a função cetona; apresenta peso molecular de $58,08 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$, funde a $179,15\text{K}$ e entra em ebulição em $329,45\text{K}$. É um líquido volátil, altamente inflamável, com odor e sabor característicos (O'NEIL, 2016).

Segundo Vellasco Júnior (2011), a acetona é um solvente muito utilizado no processo de produção de plásticos, sendo frequentemente utilizada como intermediário para a produção de metil metacrilato e bisfenol A, utilizados como matéria-prima para a obtenção de plásticos de policarbonato e resinas epóxi, que estão presentes na constituição desde garrafas plásticas até automóveis. Também é amplamente utilizada em cosméticos, removedores de goma, óleos e outras substâncias pegajosas dos tecidos crus, desengordurante de superfícies metálicas, dentre outras aplicações. Pode ser utilizada também como aditivo da gasolina, porque facilita a sua evaporação e a difusão dentro do motor, o que faz com que a eficiência do combustível seja elevada.

A produção industrial da acetona teve seu início durante a Primeira Guerra Mundial, devido à sua utilização no processo de produção da pólvora sem fumaça. Os principais meios de obtenção desse composto são a partir do processo fermentativo de grãos amiláceos, proposto por Chaim Weizmann, no qual se utiliza a bactéria *Clostridium acetobutylicum*, o processo de oxidação do cumeno, conhecido como Processo Hock e a partir da desidrogenação do álcool isopropílico. Grande parte da produção mundial de acetona é realizada pelo Processo Hock, porém nesse processo o produto principal é o fenol, sendo a acetona um subproduto, podendo apresentar

presença de aromáticos, o que reduz a sua qualidade comercial e pode até inviabilizar sua utilização para algumas aplicações (VELLASCO JUNIOR, 2011).

O processo fermentativo é bastante complexo, apresenta limitações como a quantidade de substrato, que deve ser muito bem controlada, uma vez que, em quantidade excessiva, pode inibir a ação fermentativa dos micro-organismos, e também requer condições estéreis para a operação, pois caso haja contaminação pode-se perder toda a produção. Além disso, gera grande volume de efluente que precisa ser tratado, pois o butanol é um subproduto do processo que é tóxico e precisa ser separado por destilação, o que ocasiona alta demanda energética (MONTEIRO E FERREIRA, 2019).

Portanto, a tecnologia de produção de acetona a partir da desidrogenação do álcool isopropílico se mostra mais interessante para construção de futuras plantas. Ressalta-se também que há formação de hidrogênio como subproduto, o que pode ser mais um ponto a favor para essa rota de produção, uma vez que uma pesquisa da PwC – PricewaterhouseCoopers sobre o mercado global de hidrogênio identificou uma crescente demanda para esse composto, em função do seu potencial papel como combustível na transição energética (CONSELHO MUNDIAL DE ENERGIA, 2021).

3.2 Álcool Isopropílico

O álcool isopropílico (IPA) é um composto orgânico cujo nome oficial é propan-2-ol, conhecido também como isopropanol ou 2- propanol. É um líquido incolor, explosivo e inflamável, com odor característico de álcoois. Possui fórmula C_3H_8O , massa molecular $60,10 \text{ g.mol}^{-1}$, apresenta ponto de fusão igual a $183,15K$ e ponto de ebulição igual a $355,75K$. É solúvel em água, em outros álcoois, clorofórmio, éter, glicerina, benzeno e acetona (O'NEIL, 2016).

Segundo Gonçalves e Minguita (2018), existem duas rotas principais para produção do álcool isopropílico: a primeira rota é a partir da hidratação do propileno de refinaria com adição de ácido sulfúrico, para gerar sulfato de isopropilo, que é posteriormente hidrolisado, formando ácido sulfúrico e IPA, e a segunda, que é mais viável, é a hidratação direta do propileno grau químico, utilizando resina ácida como catalisador, o que poupa o uso de ácido sulfúrico e apresenta apenas uma etapa de reação.

O IPA apresenta uma ampla gama de aplicações industriais, como no processo de produção de cosméticos, fármacos, revestimentos de superfície, tintas, pesticidas, resinas e produtos de limpeza doméstica. Geralmente é utilizado como solvente ou como reagente para produção de outros compostos, como ocorre no processo de produção de acetona (IHS MARKIT, 2015).

3.3 Simulação de processos

Segundo Stinghen (1998), o desenvolvimento dos *softwares* de simulação de processos trouxe grandes avanços para a engenharia de um modo geral, possibilitando, através de uma interface simples, a realização de cálculos de balanço de massa e energia, especificações de correntes, estudos de alterações nos equipamentos de processos e/ou das condições de operação. Com isso, os simuladores de processos se tornaram de grande importância para as indústrias, possibilitando-as a obter resultados de maneira mais rápida e segura.

Os simuladores de processos utilizam fluxogramas representados matematicamente por um conjunto de equações, que descrevem a interação das unidades do fluxograma e que, na maioria das vezes, não são lineares. Essas equações são específicas para cada equipamento do processo e definem as relações de propriedades físicas, entalpias, constantes de equilíbrio e outras propriedades termodinâmicas. Existem dois métodos para realização de simulações, são eles o sequencial modular e o de solução simultânea de equações (BIEGLER *et al.*, 1997).

Os métodos se diferenciam pela resolução das equações, sendo que o método de solução simultânea, como o próprio nome sugere, resolve o problema globalmente, com uma convergência simultânea das equações, enquanto que a abordagem modular sequencial é baseada no conceito de modularidade, que estende o conceito de engenharia química de operação unitária a um “cálculo unitário” do código de computador (isto é, a sub-rotina) responsável pelos cálculos de um equipamento. As equações para cada unidade de equipamento são agrupadas em uma sub-rotina ou módulo. Assim, cada módulo calcula os fluxos de saída para os fluxos de entrada e parâmetros fornecidos para esse equipamento (SOARES, 2003).

O COCO é um simulador com representação gráfica de processos químicos em estado estacionário, utiliza a abordagem modular sequencial e apresenta dados de compostos químicos baseado no ChemSep LITE. O *software* abrange um amplo conjunto de operações unitárias, como trocadores de calor, divisores/misturadores de correntes, colunas de destilação, compressores,

bombas e reatores. O COCO apresenta uma biblioteca termodinâmica bastante completa, que possui mais de 100 métodos de cálculo que possibilitam a criação de modelos simples de conversão, equilíbrio, CSTR, minimização de *Gibbs* ou reatores de vazão de *plug*, além de permitir que sejam adicionadas novas operações unitárias ou pacotes termodinâmicos e criados diagramas de fase, gráficos de propriedade e curvas de resíduos de sistemas ternários (CINTRA, 2020).

3.4 Integração de processos e métodos de integração

A integração do calor nas indústrias de processos químicos teve uma crescente importância a partir do início dos anos 1970, devido ao grande aumento no custo de combustível. Desde então, vem sendo utilizada para a análise do uso da energia e a diminuição do impacto ambiental de processos industriais (TURTON *et al.*, 2018).

Segundo Ensinas (2008), a aplicação da integração de processos na indústria tem se mostrado uma ferramenta fundamental para o projeto e o planejamento de suas atividades, reduzindo os custos operacionais e de investimento, além de minimizar o consumo de recursos naturais nesses processos integrados, devido ao melhor aproveitamento da energia e a redução do consumo de matérias-primas e água.

A integração energética é definida como o máximo de aproveitamento da energia disponível nas correntes de um processo específico, utilizando o mínimo de utilidades possível. A análise de integração pode ser aplicada tanto para novas redes de troca térmica quanto para as já existentes (FERNANDES JUNIOR, 2009).

Existem dois grandes grupos de estudo das redes de troca térmica: os Métodos de Síntese Sequencial e os Métodos de Síntese Simultânea (CERETO, 2004); nos quais estão presentes, frequentemente, três ferramentas principais: as regras heurísticas (baseadas na experiência sobre o projeto), os conceitos termodinâmicos e a utilização de técnicas de otimização (GUNDERSEN, 2000).

Segundo Cereto (2004), os Métodos de Síntese Sequencial dividem o problema em três estágios, a fim de reduzir a complexidade dos cálculos no projeto da rede de troca térmica. Esses estágios possuem objetivos diferentes, sendo que no primeiro busca-se o mínimo consumo de utilidades, no segundo estágio realiza-se a seleção dos trocadores de calor (mínimo número de trocadores ou mínima área) e no terceiro estágio determina-se a configuração da rede.

Os Métodos de Síntese Sequencial também são divididos em dois grupos: os Métodos Evolutivos (Método de Projeto Pelo Ponto de Estrangulamento, Método da Temperatura Dual e o Método do Pseudoponto de Estrangulamento) e as Técnicas de Programação Matemática (Programação Linear, Programação Linear Inteira Mista e Programação Não Linear) (FURMAN e SAHINIDIS, 2002). Segundo Yee e Grosman (1990), a principal limitação de aplicação desse método se deve a esse caráter de otimização isolada das etapas. Isso pode levar a um resultado diferente do ótimo, sendo que essas etapas não são analisadas simultaneamente.

Já os Métodos de Síntese Simultânea têm como finalidade determinar a solução ótima da rede de troca térmica, sem a necessidade de decompor o problema em estágios ou etapas, apresentando vantagem comparado ao Método de Síntese Sequencial nesse quesito. Porém, os cálculos são mais complexos, exigindo maior esforço computacional. Além de que, para serem aplicados industrialmente, são necessárias simplificações que dificultam sua utilização (CERETO, 2004).

3.4.1 Método de Projeto pelo Ponto de Estrangulamento

O Método de Projeto pelo Ponto de Estrangulamento utiliza a análise *Pinch*, como é denominada a técnica desenvolvida por Linhoff no final da década de 1970, que é muito utilizada no projeto de integração de processos. Essa tecnologia consiste no conceito do *Pinch Point* e caracteriza-se por apresentar ferramentas que permitem verificar o fluxo de energia dentro de um determinado processo e apontar o caminho mais econômico para se recuperar a energia, minimizando, dessa forma, a demanda de utilidades quentes e frias nesse processo (OLIVEIRA, 2014).

A análise *Pinch* é a metodologia mais explorada nos estudos de otimização do uso de energia em processos indústrias. Ela consiste em uma série de técnicas estruturadas nas Leis da Termodinâmica, o que permite a percepção mais apurada da interação processo-utilidade, consequentemente levando a uma determinação mais acertada da configuração para a rede de trocadores de calor (FERNANDES JUNIOR, 2009).

Segundo Ensinas (2008), a aplicação da análise *Pinch* na integração térmica é realizada em quatro fases, sendo elas: a coleta de dados referentes às demandas energéticas do processo em estudo e dos sistemas de utilidades disponíveis; o estabelecimento das metas (definição do

desempenho ótimo); o projeto inicial da rede de troca térmica e, por fim, a otimização do projeto, realizando simplificação de *layout* e análises de desempenho.

3.5 Representação gráfica e interpretação do diagrama das curvas compostas

A seguir são apresentados alguns conceitos importantes da análise *Pinch*, para a melhor compreensão do presente trabalho.

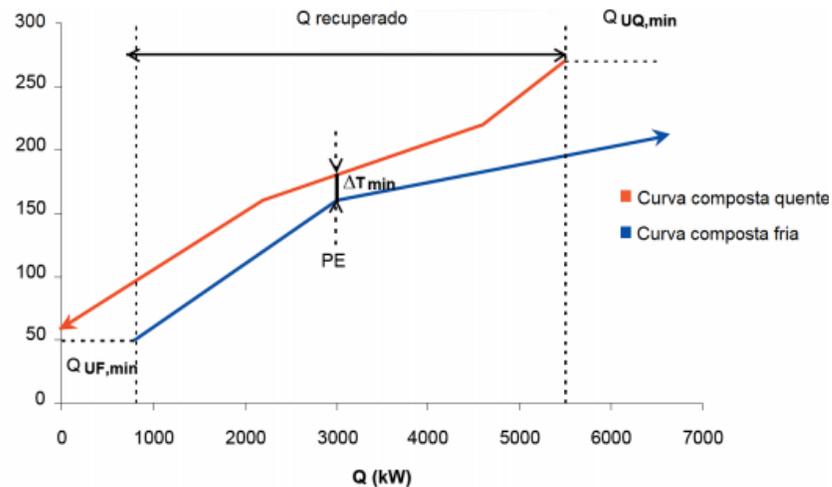
3.5.1 Curvas Compostas

As curvas compostas apresentam os perfis Temperatura-Entalpia de um processo. Elas representam graficamente as variações de entalpia das correntes quentes e frias. Essa é uma das principais ferramentas da tecnologia *Pinch* e permite a verificação da possibilidade de integração térmica e a necessidade de utilidades de maneira simplificada e prática (ENSINAS, 2008).

Para um processo específico, a curva composta quente é obtida pela soma das cargas térmicas necessárias para o resfriamento, ao passo que a curva composta fria é obtida pela soma das cargas térmicas necessárias para o aquecimento, resultando em valores acumulados para cada temperatura (TURTON *et al.*, 2009).

O *Pinch Point*, ou Ponto de Estrangulamento Energético, é o ponto em que há a menor diferença de temperatura entre as correntes quentes e frias nas curvas compostas. Essa informação é de extrema importância para o projeto de uma rede de trocadores de calor eficiente, sendo utilizada para definir um design que maximize a troca térmica (TURTON *et al.*, 2009). Na Figura 1 apresenta-se uma curva composta para um processo fictício.

Figura 1 - Curva composta ilustrativa.



Fonte: Faleiros e Luiz (2014).

O *Pinch Point* é muito importante para o projeto porque está diretamente relacionado com a recuperação energética dentro da rede de troca térmica, sendo que quanto maior for a diferença mínima de temperatura, menos energia térmica poderá ser reaproveitada. Por outro lado, as áreas de troca térmica dos trocadores de calor tenderão a ser menores, resultando em custos menores.

Além disso, segundo Cereto (2004), o *Pinch Point* é um “divisor de águas” do problema, uma vez que na região abaixo dele há sobra de energia térmica e na região acima há demanda de calor. Portanto, é possível inferir que acima do *Pinch* são requeridas utilidades quentes e abaixo utilidades frias. Nas regiões acima e abaixo do *Pinch*, existem partes em que as curvas quente e fria se sobrepõem, elas representam possíveis trocas térmicas entre as correntes de processo.

3.5.2 Tabela do problema

A construção da tabela do problema se apresenta como alternativa, ou complementação, do método gráfico. Também conhecida como algoritmo tabular, consiste em construir uma tabela com todos os intervalos de temperatura das correntes, realizar o balanço de energia e determinar as necessidades energéticas do problema por meio da construção de uma cascata de calor, como exemplificado na Figura 2. Os resultados são os mesmos que os do método gráfico, porém obtidos com mais facilidade (NAVARINI, 2019).

Figura 2 - Exemplo de tabela problema.

1	2				3	4	5	6	7	8
T' (°C)					ΔT_I (°C)	ΔMC_p (kW/°C)	ΔQ_i (kW)	Cascata de Calor (kW)		
260	1							$Q_{iq} = 0$		$Q_{iq} = 1000$
220					40	-18	-720	720	$Q_1 = -720$	1720
210		2			10	52	520	200	$Q_2 = 520$	1300
170				4	40	30	1200	-1000	$Q_3 = 1200$	0
150					20	-20	-400	-600	$Q_4 = -400$	400
60			3		90	-2	-180	-420	$Q_5 = -180$	580
50					10	-22	-220	-200	$Q_6 = -220$	800
MCp (kW/°C)	18	22	20	50				?		$Q_{cf} = 800$

Fonte: Relvas *et al.* (2000).

Segundo Relvas *et al.* (2000), o objetivo da construção da cascata é identificar, para cada intervalo de temperatura, a disponibilidade de quantidade de calor que existe entre as correntes do processo, de modo a transferir esse excesso de energia de cada nível superior para o próximo inferior. Para isso foi proposto um algoritmo a ser seguido.

Primeiro, dividir o processo em intervalos de temperatura, ajustando as temperaturas reais através das Equações (1) e (2), para encontrar as temperaturas corrigidas das correntes frias (T'_F) e quentes (T'_Q), respectivamente:

$$T'_F = T_F + \frac{\Delta T_{min}}{2} \quad (1)$$

$$T'_Q = T_Q - \frac{\Delta T_{min}}{2} \quad (2)$$

Essa correção nas temperaturas é feita para garantir que, em qualquer intervalo, as temperaturas das correntes quentes e frias apresentem diferença de temperatura igual ao ΔT_{min} ou maior, garantindo assim a transferência de calor nos trocadores (FALEIROS e LUIZ, 2014).

Após corrigir as temperaturas, efetuar o balanço energético para os novos intervalos, a partir da Equação 3:

$$Q_I = \left[\sum_{C \text{ Frias}} \dot{m} * C_{p_F} - \sum_{C \text{ Quentes}} \dot{m} * C_{p_Q} \right] * \Delta T_I' \quad (3)$$

Em que Q_I é a energia em forma de calor (kW) em cada intervalo I, $\Delta T_I'$ é a diferença entre as temperaturas corrigidas (K) e o termo entre colchetes determina a energia que pode ser transferida (kW/K) do intervalo I (RODRIGUES, 2012).

O próximo passo é a construção da tabela da cascata de calor. Ordena-se na primeira coluna as temperaturas corrigidas, por ordem decrescente; na segunda coluna ordena-se os intervalos entre cada temperatura corrigida, e nas colunas seguintes são determinados a variação de temperatura e o somatório dos $\dot{m}C_p$.

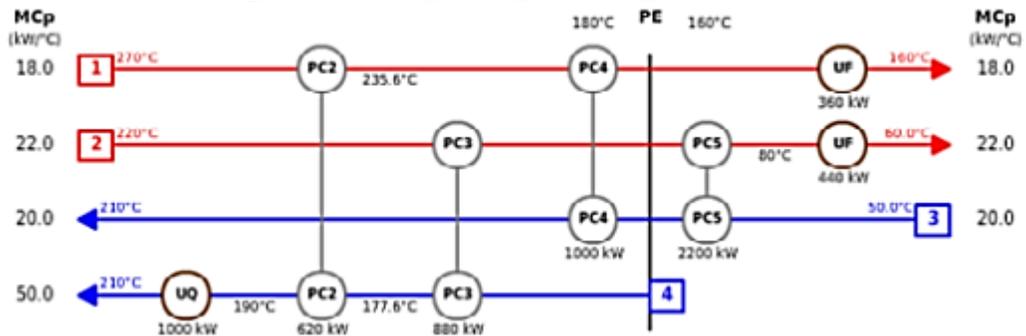
Após isso, deve-se construir uma coluna para a cascata inviável, considerando que nenhuma quantidade de calor externa é fornecida ao processo, o que resulta em um *déficit* de calor no final da cascata devido à transferência de calor de uma corrente de nível energético inferior para uma corrente de nível energético superior, o que é fisicamente impossível. Faz-se necessária, então, a construção de outra coluna para a cascata de calor viável, onde o fornecimento de calor é igual ao maior déficit de calor verificado na primeira coluna (RODRIGUES, 2012; FALEIROS e LUIZ, 2014).

A cascata de calor viável é capaz de determinar os consumos mínimos de energia e a quantidade mínima exigida de utilidades quentes e frias (RELVAS *et al.*, 2000).

3.5.3 Diagrama de grade

Segundo Fernandes (2009), o diagrama de grade, que foi apresentado por Linnhoff e Flower no ano de 1978, é uma maneira muito adequada de representar a rede de trocadores de calor, pois facilita a visualização das correntes em que ocorrerão as trocas térmicas propostas. É um diagrama que representa todas as correntes e subcorrentes (caso exista a divisão de correntes), com suas respectivas variações de temperatura e o valor de suas capacidades caloríficas, como apresentado na Figura 3.

Figura 3 - Exemplo diagrama de grade.



Fonte: Fernandes (2012).

Para a construção do diagrama de grade, as correntes quentes são agrupadas na parte superior e as correntes frias são agrupadas na parte inferior, ambas na horizontal. O sentido da corrente é correspondente à temperatura de entrada e de saída, sendo que as temperaturas de todas as correntes decrescem da esquerda para a direita. Uma reta vertical marca o *Pinch Point*, separando as regiões de possíveis trocas térmicas, abaixo e acima do *Pinch Point* (FALEIROS *et al.* 2014).

Para construir a rede de trocadores de calor, as seguintes regras de orientação devem ser seguidas:

- a) em cada zona, o projeto iniciou-se a partir do *Pinch Point*;
- b) nas zonas de temperaturas adjacentes ao *Pinch Point*, deve-se obedecer às seguintes restrições:
 - zona acima do *Pinch*: capacidade calorífica da corrente quente (C_{pQ}) deve ser menor ou igual à capacidade calorífica da corrente fria (C_{pF});
 - zona abaixo do *Pinch*: capacidade calorífica da corrente quente (C_{pQ}) deve ser maior ou igual à capacidade calorífica da corrente fria (C_{pF}).
- c) maximizar a carga energética de cada trocador atribuído;
- d) fornecer calor (através de utilidade quente) apenas acima do *Pinch* e remover calor apenas abaixo do *Pinch*.

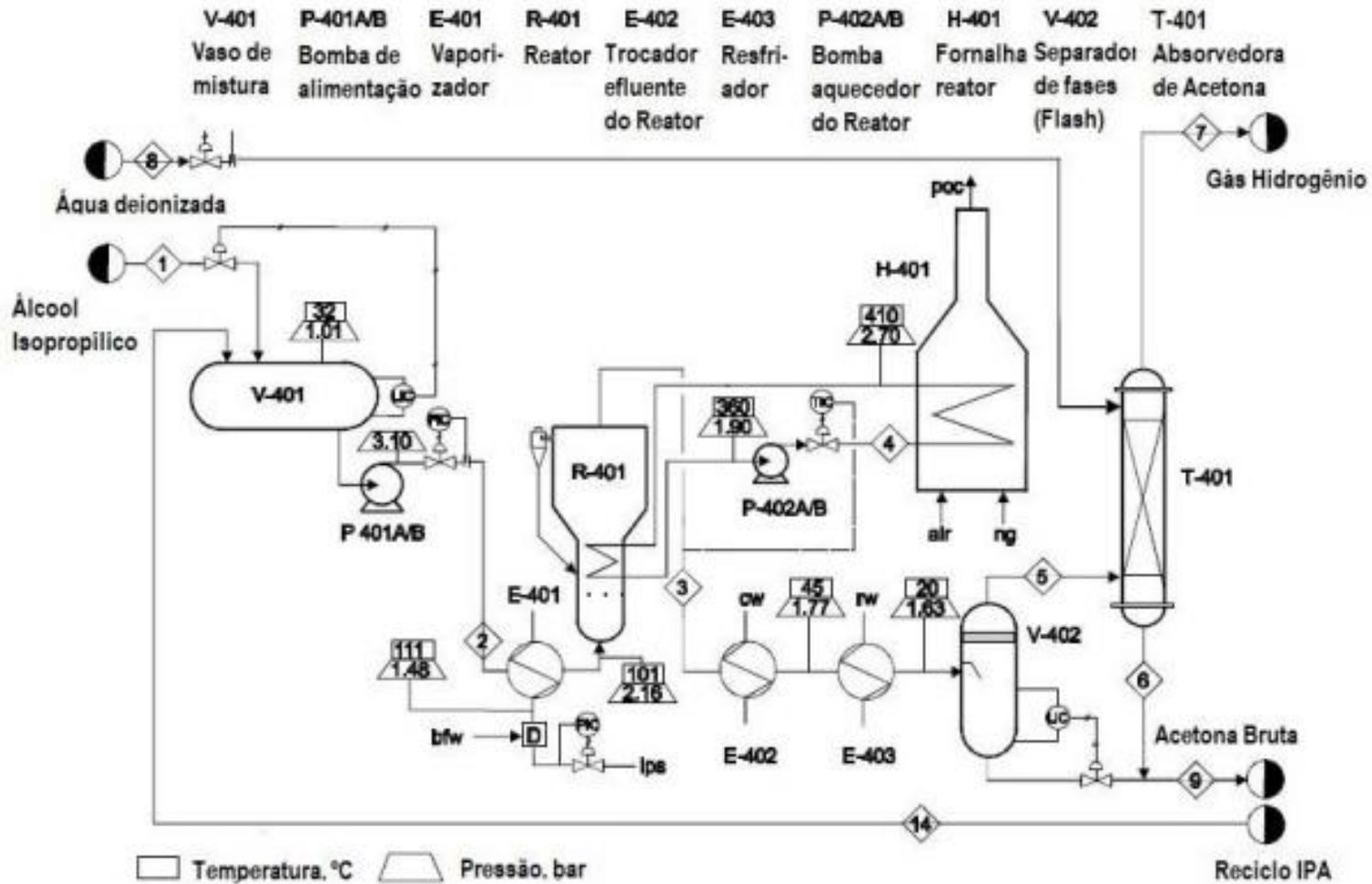
4 MATERIAL E MÉTODOS

A proposta deste trabalho foi simular uma planta de produção de acetona através do processo de desidrogenação do álcool isopropílico, realizar a integração energética e calcular indicadores ambientais para o processo antes e após a integração, com o objetivo de comparar o efeito da melhoria proposta. Para isso, empregou-se a simulação da planta de síntese de acetona através do *software* COCO Simulator®, a redução do consumo energético através da metodologia *Pinch*, utilizando o *software* HINT, e o cálculo de indicadores ambientais.

4.1 Apresentação do estudo de caso

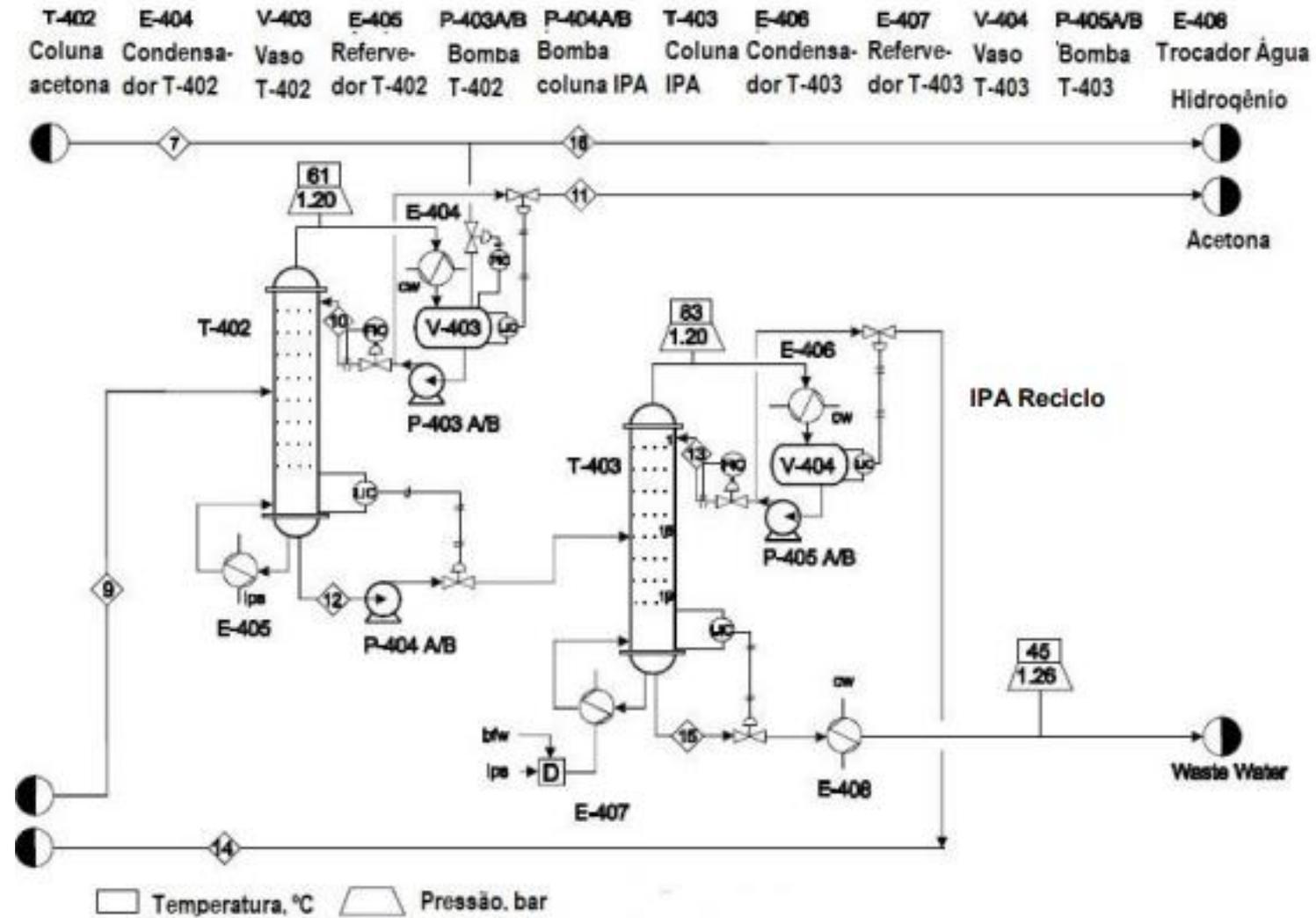
O objeto de estudo deste trabalho foi a planta de produção de acetona via desidrogenação do álcool isopropílico proposta por Turton *et al.*, 2009, simulada pelos autores utilizando o *software* CHEMCAD, utilizando o modelo termodinâmico UNIQUAC. O fluxograma da planta está separado por seções 1 e 2, para facilitar a visualização do processo, apresentadas nas Figura 4 e 5, respectivamente.

Figura 4 - Seção 1 da planta de acetona via desidrogenação do 2-propanol



Fonte: Gonçalves e Minguita (2018).

Figura 5 - Seção 2 da planta de acetona via desidrogenação do 2-propanol



Fonte: Gonçalves e Minguita (2018).

Neste processo é alimentada a corrente 1, com vazão de 51,96 kmol/h, contendo álcool isopropílico puro a 278,15 K e 1,01 bar. A corrente 1 é misturada com uma corrente de reciclo (14), que é o destilado da segunda torre de destilação, apresentando 65% em mol de IPA. A recirculação da corrente 14 é feita com o intuito de reaproveitar a matéria-prima não reagida, aumentando, dessa forma, a conversão global do processo e tornando o processo mais rentável. A corrente 2 de saída do tanque é pressurizada até 2,30 bar e aquecida até 507,15 K, para entrar no reator em uma temperatura adequada para a reação ocorrer.

O reator R-401 é mantido a 623 K por uma corrente de sal fundido, proveniente de um forno. A corrente 3, produto do reator, é obtida a 1,91 bar, 623 K e apresenta vazão de 91,21 kmol/h. Essa corrente é resfriada para facilitar a separação dos produtos e reagentes remanescentes, de acordo com o equilíbrio termodinâmico estipulado. A corrente entra em um vaso *flash* V-402 onde ocorre a separação dos componentes IPA, acetona e gás hidrogênio.

O produto de topo do vaso, corrente 8, é encaminhado para uma coluna de absorção T-401, onde é borbulhado em contracorrente com água. Hidrogênio é retirado no topo, enquanto a água é retirada pelo fundo da coluna e é misturada com o produto de fundo do vaso de *flash* V-1102. Essa corrente segue para primeira coluna de destilação, T-402, que possui 66 pratos, um refeedor parcial e um condensador parcial, os quais operam a 1,4 bar. A acetona é retirada como destilado, enquanto os componentes remanescentes são retirados como produto de fundo, seguindo para a próxima coluna de destilação T-403.

A segunda torre de destilação T-403, apresenta 19 pratos, um refeedor parcial e condensador total, os quais também operam a 1,4 bar. A corrente de fundo dessa torre, contendo majoritariamente água, é resfriada para 318,15 K, antes de ser destinada a um setor de descarte. O destilado, que contém majoritariamente álcool isopropílico, é reciclado ao início do processo, como mencionado anteriormente.

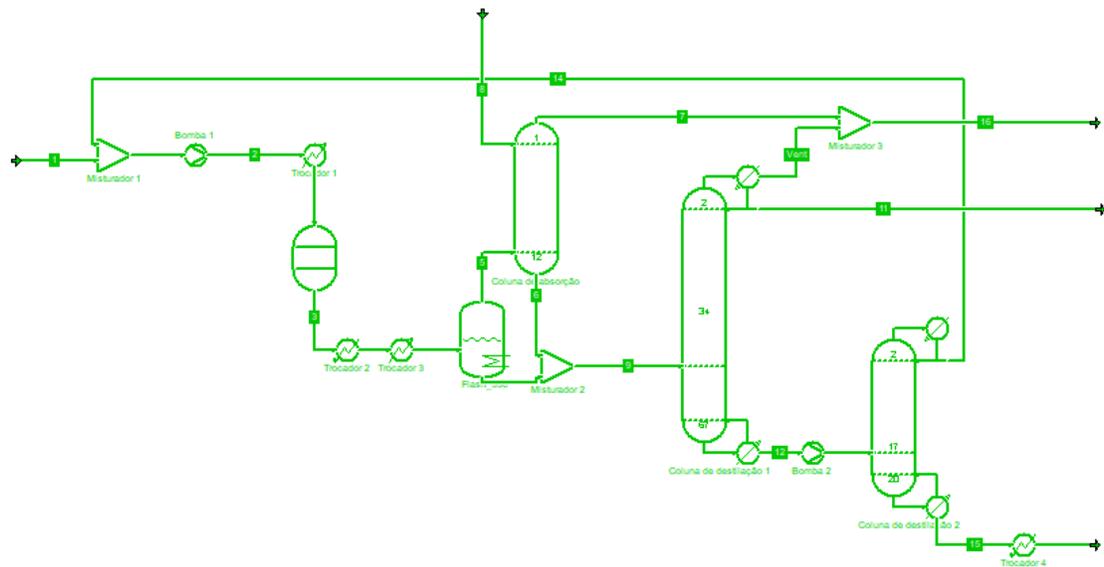
4.2 Simulação planta no simulador COCO

Neste trabalho optou-se por utilizar o simulador COCO, por ser um ambiente de simulação de modelagem gratuito, de fácil manipulação e que disponibiliza ferramentas necessárias para simulação de processos químicos, além de operações unitárias variadas, como separadores, bombas, reatores, trocadores de calor, colunas de destilação, entre outros (ALENCAR, 2014).

Segundo McCabe *et al.* (2005), entre as suas várias ferramentas, destacam-se os pacotes termodinâmicos, a possibilidade de análise de correntes e componentes de processos químicos.

O programa utilizado na simulação do processo de síntese de acetona, que pode ser observado na Figura 6, foi o CAPE-OPEN *Flowsheet Environment* (COFE), presente no *software* COCO Simulator® v.3.4.

Figura 6 - Fluxograma do processo de síntese de acetona proposto por Turton *et al.* (2009), criado no simulador COCO.



Fonte: Do autor (2021).

Os equipamentos foram selecionados e especificados de acordo com o processo produção de acetona a partir da desidrogenação do álcool isopropílico, proposto por Turton *et al.* (2009), sendo um reator de conversão fixa, adotando uma conversão de 90% de IPA a acetona, um vaso *flash*, com pressão de operação de 1,63 bar, duas colunas de destilação, com 66 e 19 pratos e razões de refluxo iguais a 6,5 e 0,85, respectivamente; ressalta-se que o COCO considera o condensador e o refeedor como pratos, por isso o número de pratos nas colunas apresentadas na Figura 5 é maior. A coluna de absorção foi configurada como uma coluna de absorção simples, apresentando 12 pratos e pressões de fundo e topo iguais a 1,63 e 1,5 bar, respectivamente. A metodologia utilizada para a simulação encontra-se na Tabela 1, abaixo.

Tabela 1 - Descrição da metodologia da simulação.

Metodologia da Simulação
Referência base: Turton <i>et al.</i> (2009)
Modelagem: Equações de balanço de massa e balanço de energia intrínsecas aos módulos do <i>Software COCO Simulator</i> ®
Pacote termodinâmico: UNIQUAC
Alterações na planta: Na planta de referência há a presença de uma fornalha que transmite calor ao reator, através de uma corrente salina. Porém, o simulador não permite a simulação desse equipamento no estado estacionário, portanto foi selecionado um reator isotérmico que simula o mesmo efeito, para fins de comparação, com resultado satisfatório. Além disso, as torres de destilação contêm condensadores em seu topo e refeedores no fundo integrados que representam os trocadores de calor e os vasos de refluxo, presentes na planta original.
Estado estacionário: Sim.
Objetivo: Validar a utilização do <i>Software COCO Simulator</i> ®, a partir da comparação dos resultados da simulação com os dados apresentados por Turton <i>et al.</i> (2009), obter os dados de composição das correntes e propriedades necessários para a integração, como por exemplo a capacidade calorífica e obter dados para o cálculo dos indicadores ambientais.
Simulação: CAPE-OPEN <i>Flowsheet Environment</i> (COFE).

Fonte: Do autor (2021).

4.3 Melhorias na Planta

Para reduzir o consumo de água de processo, corrente 8 na Figura 6, e reduzir a geração de efluentes da planta, corrente 15, foi proposto um reciclo da corrente de fundo da torre de recuperação de isopropanol, para reaproveitá-la na coluna de absorção.

O COCO não permite a simulação dos refeedores e condensadores das torres de destilação, o que inviabiliza o estudo para integração desses trocadores, porém o *software* fornece a energia de requerida nesses equipamentos. Foram então observadas duas possibilidades de aproveitamento de energia na planta, pois as correntes de alimentação das torres (correntes 9 e 12) de destilação se apresentam como líquido sub-resfriado, o que aumenta a necessidade de fornecimento de energia para os refeedores dessas torres. Sabendo disso, foi proposto um pré-

aquecimento dessas correntes até as suas temperaturas de bolha, visto que há a possibilidade de aproveitar o calor das correntes de processo.

Para determinar o ponto de bolha e as propriedades das correntes foram utilizados dois trocadores de calor hipotéticos.

Após aplicar o método de integração energética, a planta com as intervenções propostas foi simulada utilizando a mesma metodologia descrita no item 4.2 para a planta convencional, com o objetivo de comparar os resultados alcançados na simulação com o processo proposto originalmente por Turton *et al.* (2009).

4.3.1 Integração energética

A integração energética abordada no presente trabalho fez uso da metodologia *Pinch* para o seu desenvolvimento, assim, utilizaram-se apenas as correntes dos trocadores de calor presentes na simulação.

Para aplicação do Método *Pinch* deve-se ter conhecimento das capacidades caloríficas (C_p), das vazões mássicas das correntes (\dot{m}) e das temperaturas de entrada (T_{entrada}) e saída de cada trocador de calor ($T_{\text{saída}}$). Esses dados foram obtidos a partir da simulação da planta, como descrito anteriormente.

Neste trabalho utilizou-se o HINT (*Heat Integration*), um *software* livre criado por Martin e Mato (2008), para a criação da rede de trocadores de calor que utiliza o método *Pinch*. Ele é distribuído sem custos na internet e pode ser instalado nos computadores pessoais em todo o mundo, possui uma interface amigável, desenvolvida para permitir que os usuários concentrem seus esforços na aprendizagem dos conceitos do método *Pinch* (BENITES *et al.*, 2016).

Para realizar a integração, adicionou-se as correntes de interesse, informando os valores de temperaturas de entrada e saída e o produto entre a vazão mássica e a capacidade calorífica para cada corrente. O *software* possibilita gerar o diagrama de intervalo de composição, o diagrama cascata, além de outras funcionalidades, e já foi utilizado por outros autores da literatura, como OLIVEIRA (2021) que comparou os resultados do *software* e desenvolvimento manual e concluiu que os resultados são satisfatórios.

As capacidades caloríficas das correntes foram determinadas por meio da média das capacidades caloríficas das correntes de entrada e saída de cada trocador, conforme a Equação 4:

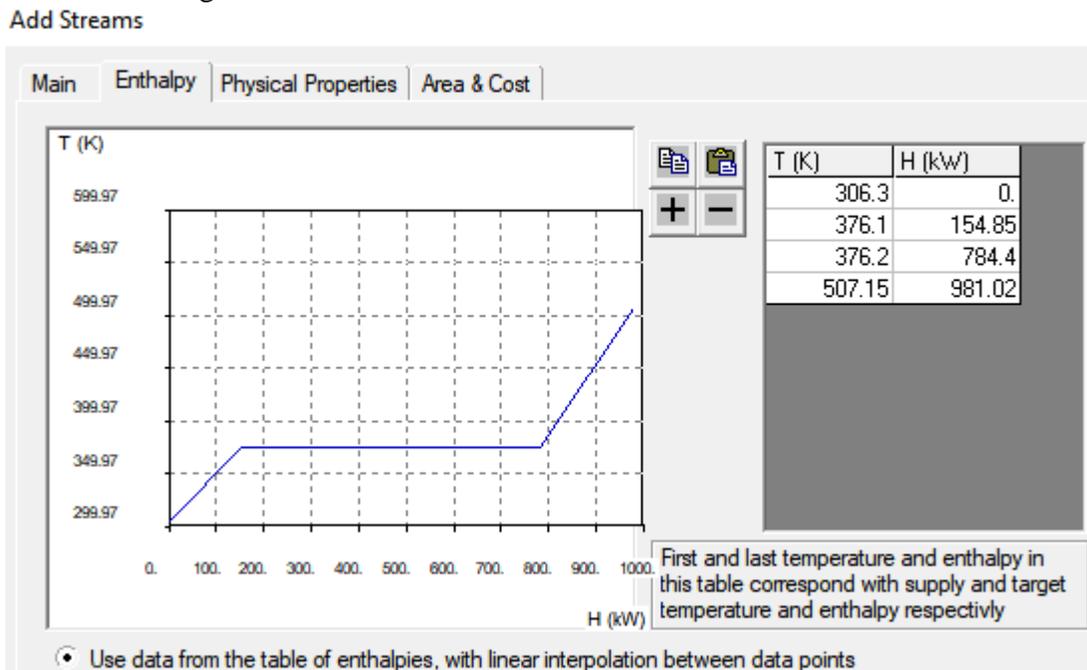
$$C_p = \frac{C_{p\text{ entrada}} + C_{p\text{ saída}}}{2} \quad (4)$$

Para as correntes 2 e 3 não se pôde utilizar a Equação 4, uma vez que essas correntes apresentam mudança de fase durante a troca térmica; quando isso ocorre, a C_p não mantém um comportamento linear com a temperatura, devido ao calor latente envolvido no processo.

Assim, para obter o valor de C_p , fez-se a segmentação da corrente em intervalos de temperatura conforme o procedimento utilizado por Navarini (2019). Dividiu-se a troca térmica da corrente 2 em três partes, relacionando-as com o ponto de bolha e o ponto de orvalho.

A primeira etapa da corrente, a qual se encontra no estado de líquido sub-resfriado, recebe calor sensível e tem sua temperatura elevada até o valor do ponto de bolha da mistura. Então, em uma segunda etapa, a corrente segue para o vaporizador para realizar a mudança de fase, convertendo-se de líquido saturado para vapor saturado por meio da adição de uma quantidade de calor latente. Por fim, a mistura é aquecida novamente passando de vapor saturado para vapor superaquecido, chegando à temperatura final. Adicionou-se, então, as temperaturas e variação de entalpia referentes a esta corrente no *software* Hint como apresentado na Figura 7.

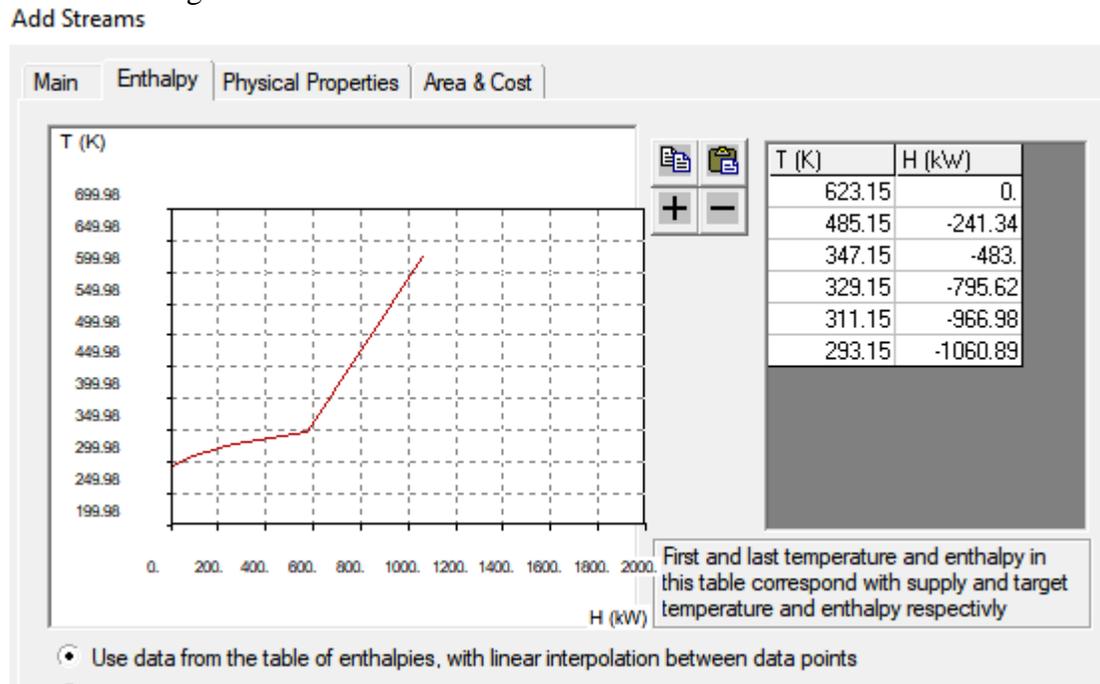
Figura 7 - Entrada de dados da corrente 2 no software Hint.



Fonte: Do autor (2021).

Procedimento semelhante foi adotado para a corrente 3, porém essa corrente começou a troca térmica como vapor superaquecido e terminou como uma mistura de fases, tornando o procedimento um pouco mais complexo. Para minimizar o erro foram estabelecidos mais pontos para entrada no *software* Hint, como apresentado na Figura 8.

Figura 8 - Entrada de dados da corrente 3 no software Hint.



Fonte: Do autor (2021).

Assim, calculou-se um valor de C_p efetiva para cada intervalo, conforme a Equação 5, considerando a carga térmica necessária para a mudança de fase.

$$C_p = \frac{\Delta H}{\dot{m} \cdot \Delta T} \quad (5)$$

Após a obtenção dos dados fez-se necessária a criação da Tabela de Oportunidades, na qual se deve identificar cada corrente, indicando seu número, a sua classificação quanto à disponibilidade de energia (quente ou fria), o produto entre a vazão mássica e a capacidade calorífica ($\dot{m}C_p$) e as suas temperaturas de entrada e saída.

Em seguida, realizou-se a construção do Diagrama cascata e da cascata acumulada, sendo que a última fornece o ponto do *Pinch* e a quantidade de utilidades quente e fria utilizadas na

integração. Além disso, possibilita a delimitar as áreas de integração acima e abaixo do *Pinch* para partir, então, para o projeto da rede de trocadores de calor.

O projeto da rede de trocadores de calor se iniciou com a determinação do ΔT_{\min} , que neste trabalho teve arbitrado o valor de 10 K. Fernandes Junior (2003) e Navarini (2009) também utilizaram esse valor como referência para construção das redes de troca térmica propostas em seus estudos.

Sabe-se que quanto maior o ΔT_{\min} , maior será o consumo de utilidades do processo, porém ΔT_{\min} muito pequenos necessitam de trocadores de calor com área de troca térmica muito elevada, resultando em maior custo. Esses passos tornaram o projeto mais simples e capaz de satisfazer os requisitos do problema.

4.4 Indicadores ambientais

A metodologia utilizada neste trabalho para comparar quantitativamente os desempenhos econômico e ambiental dos processos convencional e o proposto após integração energética foi adaptada da metodologia do Índice Comparativo de Ecoeficiência ou ICE, proposta por Pereira *et al.* (2018).

A metodologia consiste inicialmente na avaliação simultânea de um conjunto de ecoindicadores para os processos em estudo, cujos valores são normalizados por divisão pelo maior valor de sua respectiva categoria.

Neste trabalho foram calculados os ecoindicadores de consumo de energia (GJ/ton Acetona), consumo de água de processo (Kg/ton Acetona) e geração de efluentes (Kg/ton Acetona), de acordo com as Equações 6, 7 e 8, respectivamente.

$$EI_{\text{Energia}} = \frac{\text{Consumo de energia}}{\text{Taxa de recuperação de Acetona}} \quad (6)$$

$$EI_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{\text{Consumo de água de processo}}{\text{Taxa de recuperação de Acetona}} \quad (7)$$

$$EI_{\text{ef}} = \frac{\text{Efluentes}}{\text{Taxa de recuperação de Acetona}} \quad (8)$$

O indicador de consumo de água leva em consideração apenas o consumo de água de processo, correspondendo a água que entra na planta através da corrente 1 (matéria prima diluída) e corrente 8 (água para lavagem dos gases).

Os indicadores foram calculados para a planta de referência e para planta proposta neste trabalho.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A partir da simulação computacional executada com o auxílio do *software* COCO Simulator® para as plantas de produção de acetona proposta por Turton *et al.* (2009), e incluindo as modificações propostas neste trabalho, foram obtidos os resultados que são apresentados nesta seção em conjunto com as comparações técnicas realizadas entre elas.

5.1 Simulação do processo convencional

As comparações entre as propriedades das correntes obtidas por Turton *et al.* (2009) e as obtidas utilizando o *software* COCO Simulator® estão apresentadas na Tabela 2, onde estão ordenados os valores obtidos pelos autores de referência, os valores obtidos por este trabalho e o erro relativo percentual entre os dois resultados.

Os desvios abaixo de 5% apresentados na Tabela 2 apontam que os resultados obtidos para as temperaturas, pressões, vazões e vazões por componente das correntes do processo convencional simulado mostram-se coerentes com os resultados fornecidos por Turton *et al.* (2009).

Porém, percebe-se que existem valores de desvios elevados, como por exemplo, para as vazões de acetona nas correntes 2 e 7, que apresentam um desvio relativo de 75% e 100%, respectivamente, o que pode estar relacionado a divergência entre os *softwares* utilizados para as simulações, sendo que na planta de referência os autores realizaram a simulação no CHEMCAD®, que apresenta métodos de cálculo, pacotes termodinâmicos e modelos de convergência diferentes do COCO Simulator®. Além disso, observa-se que os maiores erros estão atrelados aos resultados das vazões molares por componente para os menores valores, o que faz com que as variações relativas sejam mais perceptíveis, mesmo a variação absoluta sendo pequena, como é o caso.

Tendo a primeira simulação apresentado resultados satisfatórios, pôde-se então utilizar o *software* COCO Simulator® para avaliar as modificações propostas para a planta em estudo.

Tabela 2 - Comparação dos resultados encontrados na simulação e por Turton *et al.* (2009).

Referência	Corrente	T (K)	P (bar)	Vazão molar (kmol/h)	Vazão molar por componente (kmol/h)			
					Acetona	IPA	H ₂ O	H ₂
Turton <i>et al.</i>	1	298,15	1,01	51,96	0,00	34,82	17,14	0,00
Simulação	1	298,15	1,01	51,96	0,00	34,82	17,14	0,00
Desvio (%)		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Turton <i>et al.</i>	2	305,15	2,30	57,84	0,16	38,64	19,04	0,00
Simulação	2	306,32	2,30	57,89	0,04	38,64	19,21	0,00
Desvio (%)		3,66	0,00	0,09	75,00	0,00	0,89	0,00
Turton <i>et al.</i>	3	623,15	1,91	92,62	34,94	3,86	19,04	34,78
Simulação	3	623,15	1,91	92,68	34,82	3,86	19,21	34,78
Desvio (%)		0,00	0,00	0,06	0,34	0,00	0,89	0,00
Turton <i>et al.</i>	5	293,15	1,63	39,74	4,44	0,12	0,40	34,78
Simulação	5	293,14	1,63	39,73	4,44	0,11	0,41	34,77
Desvio (%)		0,05	0,00	0,03	0,00	8,33	2,50	0,03
Turton <i>et al.</i>	6	300,15	1,63	21,14	1,93	0,10	19,11	0,00
Simulação	6	299,88	1,63	21,11	2,01	0,11	18,99	0,00
Desvio (%)		1,00	0,00	0,14	4,15	10,00	0,63	0,00
Turton <i>et al.</i>	7	306,15	1,50	38,60	2,51	0,02	1,29	34,78
Simulação	7	307,62	1,50	38,63	2,44	0,00	1,42	34,77
Desvio (%)		4,45	0,00	0,08	2,79	100,00	10,08	0,03
Turton <i>et al.</i>	8	298,15	2,00	20,00	0,00	0,00	20,00	0,00
Simulação	8	298,15	2,00	20,00	0,00	0,00	20,00	0,00
Desvio (%)		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Turton <i>et al.</i>	9	295,15	1,63	74,02	32,43	3,84	37,75	0,00
Simulação	9	294,99	1,63	74,05	32,38	3,86	37,79	0,02
Desvio (%)		0,73	0,00	0,04	0,15	0,52	0,11	0,00
Turton <i>et al.</i>	11	334,15	1,40	32,29	32,27	0,02	0,00	0,00
Simulação	11	338,09	1,40	32,25	31,70	0,00	0,55	0,00
Desvio (%)		6,46	0,00	0,12	1,77	100,00	0,00	0,00
Turton <i>et al.</i>	12	363,15	1,40	41,73	0,16	3,82	37,75	0,00
Simulação	12	365,88	1,40	41,14	0,04	3,86	37,24	0,00
Desvio (%)		3,03	0,00	1,41	75,00	1,05	1,35	0,00
Turton <i>et al.</i>	14	356,15	1,20	5,88	0,16	3,82	1,90	0,00
Simulação	14	358,17	1,20	5,93	0,04	3,82	2,07	0,00
Desvio (%)		2,43	0,00	0,85	75,00	0,00	8,95	0,00
Turton <i>et al.</i>	15	382,15	1,40	35,85	0,00	0,00	35,85	0,00
Simulação	15	381,60	1,40	35,19	0,00	0,03	35,16	0,00
Desvio (%)		0,50	0,00	1,84	0,00	0,00	1,92	0,00
Turton <i>et al.</i>	16	306,15	1,20	36,60	2,51	0,02	1,29	34,78
Simulação	16	308,72	1,40	39,29	3,08	0,00	1,43	34,78
Desvio (%)		7,79	16,67	7,35	22,71	100,00	10,85	0,00

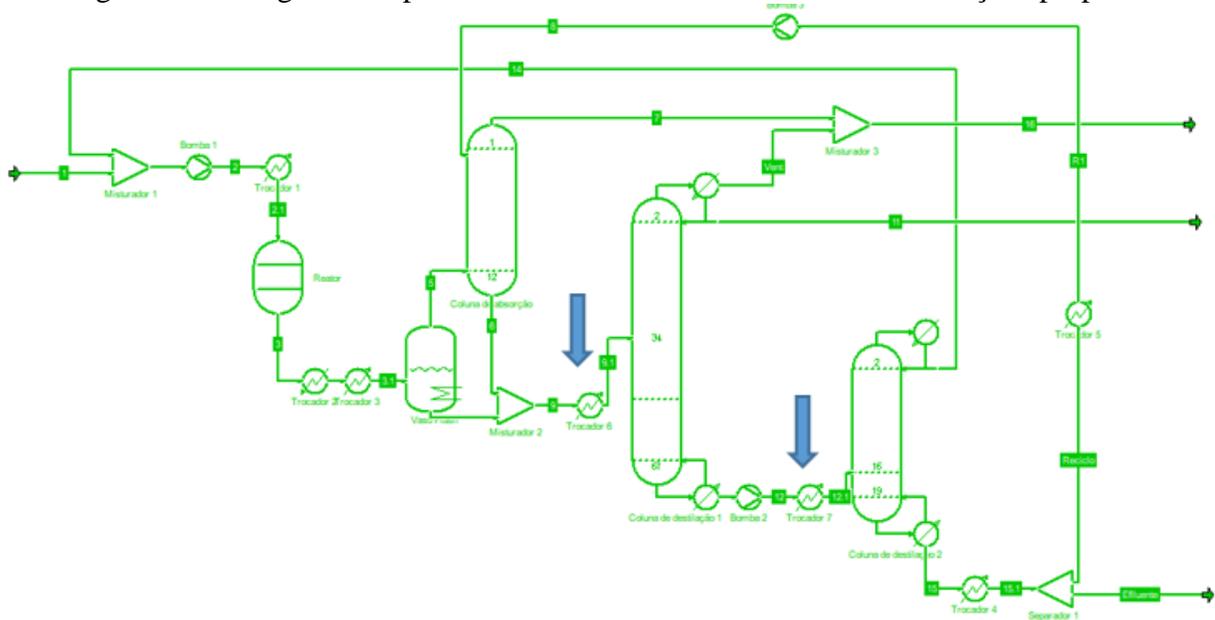
Fonte: Do autor (2021).

5.2 Simulação do processo com as modificações propostas

Após realizar as mudanças descritas na metodologia, ou seja, o reciclo da corrente de fundo da segunda torre de destilação e o pré-aquecimento das correntes de alimentação das duas colunas de destilação, foi executada uma nova simulação para avaliar os impactos dessas alterações nas propriedades das correntes.

Para realizar as modificações foi necessário acrescentar novos equipamentos ao processo, como mostrado na Figura 9, sendo eles uma bomba para elevar a pressão da corrente a ser reaproveitada na coluna de absorção, a Bomba 3, e dois trocadores de calor, os Trocadores 6 e 7, para elevar as temperaturas das correntes 9 e 12 às temperaturas de bolha, 330K e 380K, respectivamente.

Figura 9 - Fluxograma da planta de síntese de acetona com as modificações propostas.



Fonte: Do autor (2021).

A comparação das propriedades das principais correntes que poderiam ter sofrido alguma alteração devido às modificações realizadas no processo está apresentada na Tabela 3.

Pode-se observar que as modificações realizadas não tiveram impacto relevante para as composições das correntes que estão ligadas às colunas de destilação, sendo que o maior desvio

relativo apresentado é da corrente 6, sendo de 0,33%, demonstrando que foi possível seguir com as análises para essa planta.

Tabela 3 - Comparação dos resultados encontrados na simulação da planta modificada e convencional.

Referência	Corrente	T (K)	P (bar)	Vazão molar (kmol/h)	Vazão molar por componente (kmol/h)			
					Acetona	IPA	H ₂ O	H ₂
Simulação	2	306,32	2,30	57,89	0,04	38,64	19,21	0,00
S2	2	306,33	2,3	57,89	0,04	38,64	19,21	0,00
Desvio (%)		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Simulação	6	299,88	1,63	21,11	2,01	0,11	18,99	0,00
S2	6	300,87	1,63	21,08	2,00	0,11	18,97	0,00
Desvio (%)		0,33	0,00	0,00	0,50	0,00	0,11	0,00
Simulação	7	307,62	1,50	38,63	2,44	0,00	1,42	34,77
S2	7	307,49	1,50	38,64	2,44	0,02	1,41	34,77
Desvio (%)		0,04	0,00	0,00	0,00	0,00	0,70	0,00
Simulação	8	298,15	2,00	20,00	0,00	0,00	20,00	0,00
S2	8	298,17	2,00	19,98	0,00	0,02	19,96	0,00
Desvio (%)		0,01	0,00	0,00	0,00	0,00	0,20	0,00
Simulação	9	294,99	1,63	74,05	32,38	3,86	37,79	0,02
S2	9	294,99	1,63	74,03	32,38	3,86	37,77	0,02
Desvio (%)		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,05	0,00
Simulação	11	338,09	1,40	32,25	31,70	0,00	0,55	0,00
S2	11	338,09	1,40	32,26	31,71	0,00	0,55	0,00
Desvio (%)		0,00	0,00	0,00	0,03	0,00	0,00	0,00
Simulação	14	358,17	1,20	5,93	0,04	3,83	2,07	0,00
S2	14	358,17	1,20	5,94	0,04	3,83	2,07	0,00
Desvio (%)		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Simulação	15	381,60	1,40	35,19	0,00	0,03	35,16	0,00
S2	15	381,60	1,40	35,18	0,00	0,04	35,14	0,00
Desvio (%)		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,00

*S2 = Simulação com modificações propostas.

Fonte: Do Autor (2021).

5.3 Integração energética

Através da simulação obtiveram-se as informações do balanço de massa e energia, os valores das capacidades caloríficas das correntes, o ponto de bolha e de orvalho e a quantidade de energia usada em cada trocador de calor (ΔH).

Com os dados obtidos através da simulação e das capacidades caloríficas dados pelo Hint, construiu-se a Tabela 4, denominada de Tabela de oportunidades.

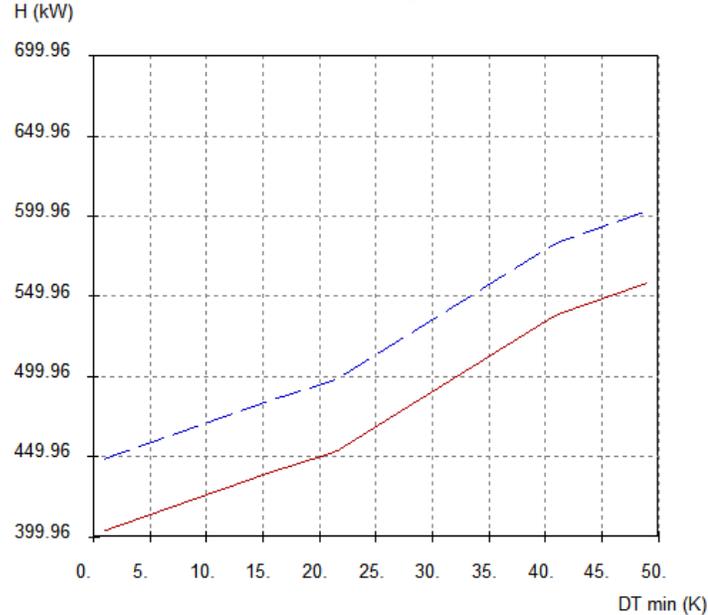
Tabela 4 - Tabela de oportunidades.

Corrente	Tipo	C_p	$T_{entrada}$ (K)	$T_{saída}$ (K)	H(KW)	$\dot{m}C_p$ (KW/K)
2	Fria	Não Linear	306,33	507,15	981,02	4,88
3	Quente	Não Linear	623,15	293,15	-1060,89	3,21
15	Quente	Linear	381,60	318,15	-46,52	0,73
Reciclo	Quente	Linear	318,15	298,15	-8,36	0,42
9	Fria	Linear	295,00	330,00	75,65	1,51
12	Fria	Linear	366,00	380,00	14,2	0,98

Fonte: Do autor (2021).

Após entrada de todos os dados das propriedades das correntes no Hint, plotou-se o gráfico da necessidade de utilidades em função do ΔT_{min} , apresentado na Figura 10, em que a linha vermelha representa utilidade quente e a linha azul utilidade fria. Como pode-se notar, para o intervalo de ΔT_{min} de 0 a 50K, existe uma tendência de aumento da necessidade de utilidades com o aumento do ΔT_{min} , o que aumenta o custo operacional da planta, além de reduzir as possibilidades de reaproveitamento de energia.

Figura 10 - Necessidade de energia em função do ΔT_{\min} .



Fonte: Do autor (2021).

Percebe-se que a inclinação das linhas fica maior para ΔT_{\min} acima de 20K, sugerindo que as melhores opções para esse parâmetro estão na faixa de 0K a 20K, por isso optou-se por um valor intermediário de 10 K, levando-se em consideração que quanto menor o ΔT_{\min} maior o reaproveitamento de energia do processo. Valores abaixo de 10 K não são normalmente adotados na prática, pois sistemas reais sofrem variações que nem sempre podem ser controladas, acarretando em problemas no processo.

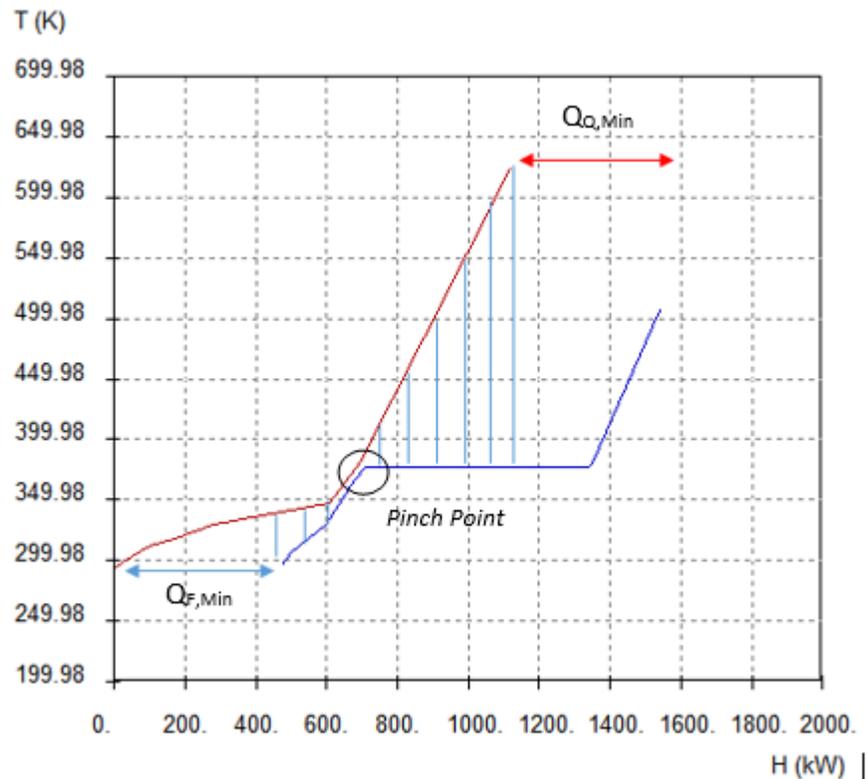
Segundo Navarini (2019), quanto menor o ΔT_{\min} mais caros serão os trocadores de calor, porém considerou-se que o custo de equipamento é um valor fixo, que quando analisado a longo prazo tem um peso menor no custo total, ou seja, para tempos mais longos, a influência do custo dos trocadores é menor comparado ao custo das utilidades, reforçando a escolha do ΔT_{\min} igual a 10 K.

Definido o ΔT_{\min} , partiu-se então para a análise das curvas compostas quente e fria, indicadas respectivamente pelas linhas vermelha e azul na Figura 11. As curvas compostas representam o perfil de temperatura *versus* entalpia e foram obtidas a partir da soma das energias das correntes envolvidas em cada intervalo de temperatura.

A partir desse gráfico, é possível identificar a possibilidade de reaproveitamento de energia, área hachurada em que as duas curvas se sobrepõem, ter uma estimativa da energia requerida pelas

utilidades, que pode ser observada nas extremidades das curvas, representadas pelas setas vermelha e azul, em que não há sobreposição vertical das mesmas. Também é possível obter a temperatura de *Pinch*, através do *Pinch Point*, localizado no local em que ocorre a menor diferença de temperatura, sendo este o ponto que divide as regiões abaixo e acima do Pinch.

Figura 11 - Curvas compostas construídas para ΔT_{min} igual a 10 K.



Fonte: Do autor (2021).

Porém, por ser um método visual, as curvas compostas são menos precisas e podem levar a aproximações, como mencionado na seção de revisão bibliográfica. Para contornar esse problema, foi construída a cascata de energia, apresentada na Figura 12. Nela identifica-se o *Pinch Point* em 371K, a quantidade mínima de calor que precisa ser fornecida por utilidade quente ao sistema, $Q_{Qmin} = 426,19$ KW e a quantidade mínima de energia que precisa ser retirada por utilidade fria, $Q_{Fmin} = 471,09$ KW.

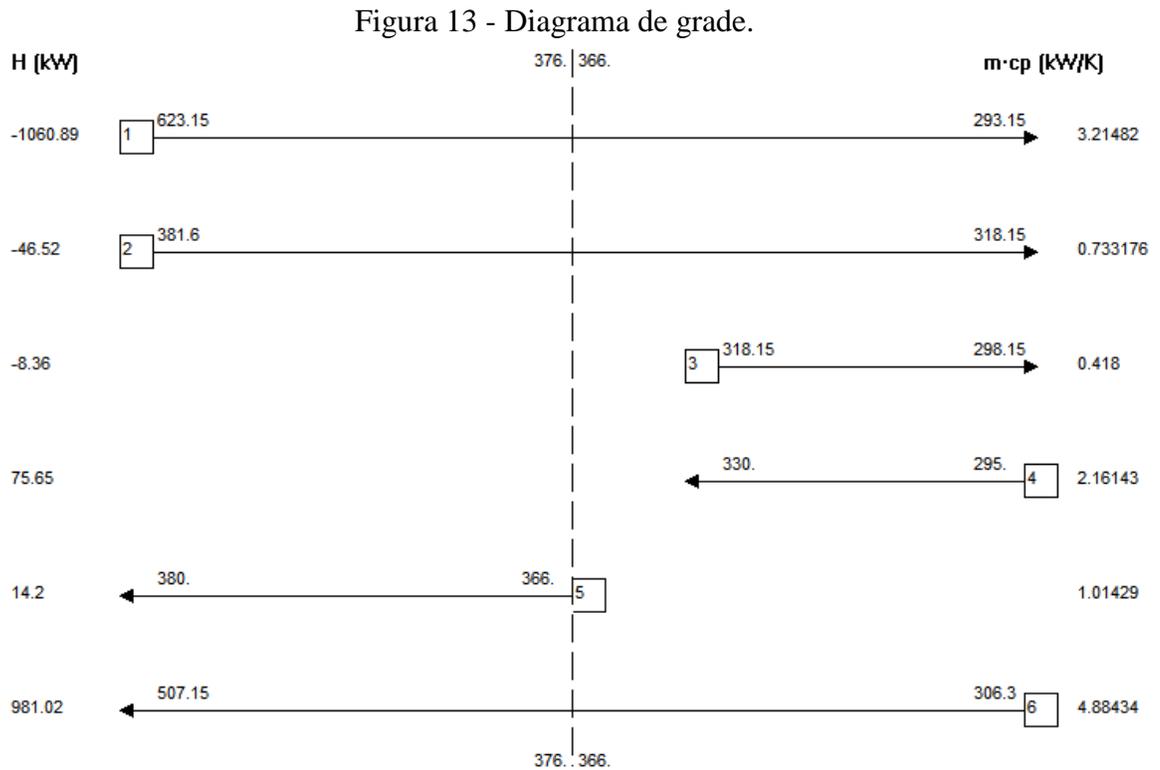
Figura 12 - Cascata de energia.

Temp	Correntes	DT	H int.	H prop.
618,15 K	1			426,19 kW
512,15 K		106,00 K	-185,38 kW	611,57 kW
385,00 K		127,15 K	-7,92 kW	643,24 kW
376,60 K	2	8,40 K	2,91 kW	4,19 kW
371,00 K		5,60 K	4,19 kW	0,00 kW
335,00 K		36,00 K	-7,67 kW	121,23 kW
313,15 K	3	21,85 K	-148,87 kW	334,71 kW
311,30 K		1,85 K	-10,28 kW	344,99 kW
300,00 K		11,30 K	-40,05 kW	406,40 kW
293,15 K	4	6,85 K	-38,60 kW	445,01 kW
288,15 K		5,00 K	-26,09 kW	471,09 kW

Fonte: Do autor (2021).

Na Figura 12, é possível identificar quais correntes podem ser ligadas na rede de troca térmica, sendo que para que uma corrente possa fornecer calor à outra, ela precisa estar em um intervalo de temperatura maior para a corrente no intervalo de temperatura menor, por exemplo, a corrente de índice 1 pode fornecer calor para a corrente de índice 5, mas a corrente de índice 3 não.

Em posse dos dados da cascata de calor, construiu-se o diagrama de grade para realizar o pareamento das correntes, apresentado na Figura 13.



Fonte: Do autor (2021).

Para aproveitar a maior quantidade de calor possível, respeitando a regra heurística de que na zona abaixo do *Pinch* a capacidade calorífica da corrente quente (C_{pQ}) deve ser maior ou igual à capacidade calorífica da corrente fria (C_{pF}), foi necessário dividir a corrente 2 (índice 6, na Figura 10), partindo-a em duas correntes que representam 30% e 70% da sua vazão total, resultando nas correntes de índice 7 e 8, respectivamente.

Com isso uma nova cascata de calor foi construída, apresentada na Figura 14.

Figura 14 - Cascata de energia após divisão de corrente.

Temp	Correntes	DT	H int.	H prop.
618,15 K	1			-426,19 kW
512,15 K		106,00 K	-185,38 kW	611,57 kW
385,00 K		127,15 K	-7,92 kW	643,24 kW
376,60 K	2	8,40 K	2,91 kW	-4,19 kW
371,00 K		5,60 K	4,19 kW	0,00 kW
335,00 K		36,00 K	-7,67 kW	-121,23 kW
313,15 K	3	21,85 K	-148,87 kW	-334,71 kW
311,30 K		1,85 K	-10,28 kW	-344,99 kW
300,00 K		11,30 K	-40,05 kW	-406,40 kW
293,15 K	4	6,85 K	-38,60 kW	-445,01 kW
288,15 K		5,00 K	-26,09 kW	-471,09 kW

Fonte: Do autor (2021).

Nota-se que a corrente de índice 6 continua sendo representada na Figura 13, porém não apresenta variação de temperatura ou entalpia, uma vez que, como dito anteriormente, após a divisão essa corrente deu origem às correntes de índice 7 e 8.

Com essa alteração, foi necessária a revisão da tabela de oportunidades, que está apresentada na Tabela 5. É importante ressaltar que, com a divisão, as correntes 2.1 e 2.2 (índices 7 e 8, respectivamente) não apresentam mudança de fase durante a troca térmica, porque estão em temperatura inferior ao ponto de bolha, o que caracteriza as capacidades caloríficas dessas correntes como lineares.

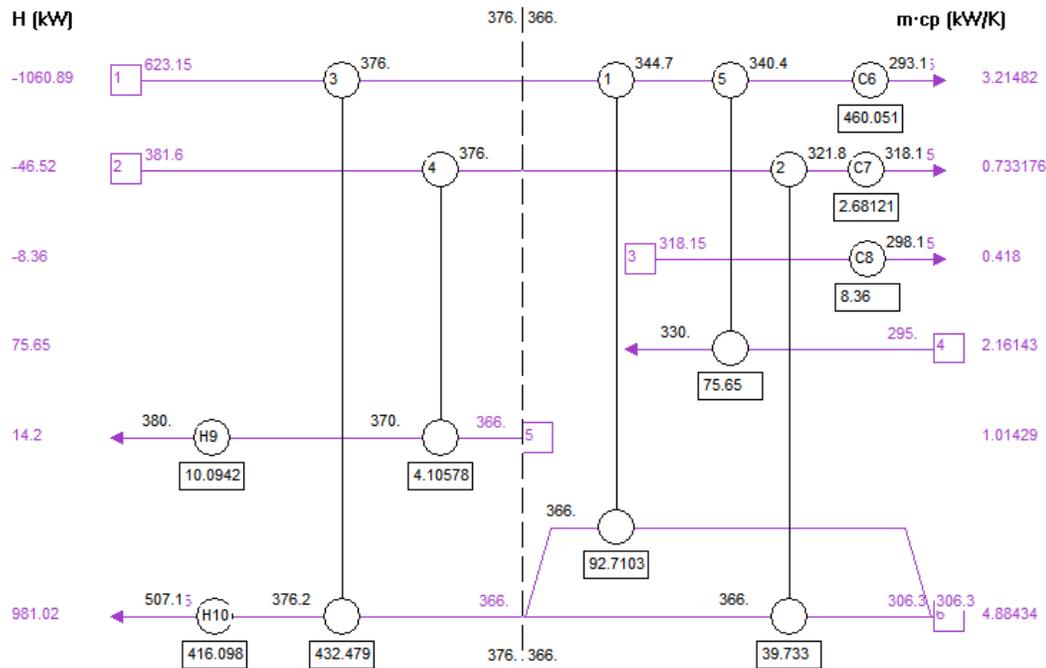
Tabela 5 - Tabela de oportunidades após a divisão da corrente 2.

Corrente	Índice	Tipo	Cp	T _{entrada} (K)	T _{saída} (K)	H (kW)	mC _p (kW/K)
3	1	Quente	Não Linear	623,15	293,15	-1060,89	3,21
15	2	Quente	Linear	381,60	318,15	-46,52	0,73
Reciclo	3	Quente	Linear	318,15	298,15	-8,36	0,42
9	4	Fria	Linear	295,00	330,00	75,65	2,16
12	5	Fria	Linear	366,00	380,00	14,20	1,01
2.1	7	Fria	Linear	306,30	366,00	39,73	0,67
2.2	8	Fria	Linear	306,30	366,00	92,71	1,55
2.3	9	Fria	Não Linear	366,00	507,15	848,58	6,01

Fonte: Do autor (2021).

Por fim, elaborou-se a rede de trocadores de calor para um ΔT_{\min} de 10 K, seguindo as heurísticas da metodologia *Pinch*, descritas neste trabalho. Nas regiões abaixo e acima do Pinch, a regra do número de correntes foi obedecida, seguindo-se assim para análise dos valores das capacidades caloríficas e também para as alocações das utilidades - utilidade quente só acima do Pinch e utilidade fria somente abaixo do Pinch. A Figura 15 apresenta a rede trocadores de calor proposta.

Figura 15 - Diagrama de grade após divisão de corrente.



Fonte: Do autor (2021).

Na região acima do *Pinch*, as trocas térmicas foram estabelecidas entre as correntes de índice 1 e 9 e as correntes de índice 2 e 5. A demanda energética não foi totalmente atendida, como observado na Cascata térmica, por isso ainda foram necessários dois trocadores de calor com utilidade quente para especificar o problema.

Na região abaixo do *Pinch*, as trocas térmicas foram estabelecidas entre as correntes de índice 1 e 8, correntes 1 e 4 e as correntes 2 e 7. Assim como na região acima do *Pinch*, a demanda energética não foi totalmente atendida e foram necessários três trocadores de calor com utilidade fria para especificar o problema.

A Tabela 6 apresenta uma comparação entre a quantidade, em KW, de utilidades quente e fria necessária para a operação da planta proposta por Turton *et al.* (2009) e após as alterações e realização da integração energética.

Tabela 6 - Comparação das necessidades de energia a serem fornecidas ou retiradas por utilidades da planta proposta por Turton *et al.* (2009) e a proposta neste trabalho.

Referência	Utilidade	ΔH (KW)
Turton <i>et al.</i> (2009)	Quente	3198,48
Integrada	Quente	2553,89
Redução (%)		20,15
Turton <i>et al.</i> (2009)	Fria	-1231,77
Integrada	Fria	-595,50
Redução (%)		51,66

Fonte: Do autor (2021).

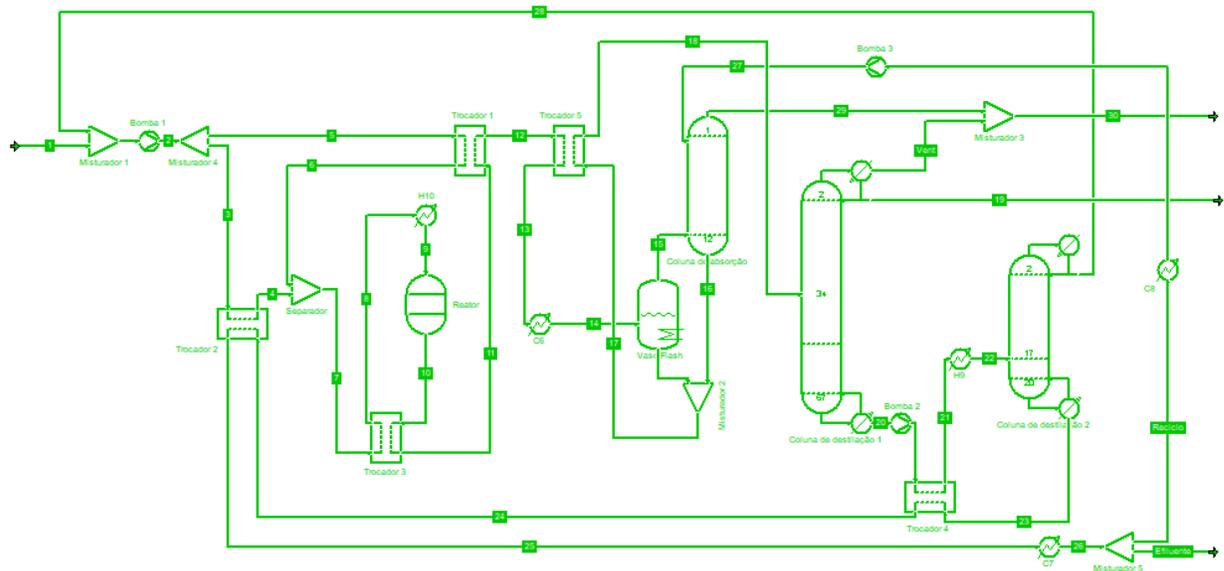
A planta proposta neste trabalho apresentou uma redução de 20,15% no consumo de utilidade quente quando comparada a planta convencional. Quando se avalia a demanda de utilidades frias, a redução apresentada é ainda mais expressiva, equivalente a 51,66%. Esses resultados mostram que as alterações propostas foram efetivas para aumentar a eficiência energética da planta, conseqüentemente diminuindo o seu custo de operação.

Ressalta-se que as demandas de utilidades apresentadas na Tabela 6 foram determinadas para todos os trocadores de calor, inclusive os condensadores e refeedores das colunas de destilação, porque apesar de o COCO Simulator® não possibilitar a simulação desses equipamentos de forma separada, é possível obter no software a demanda energética dos mesmos.

5.4 Simulação da planta integrada energeticamente

Com a realização da integração energética e a construção da rede de trocadores de calor, foi possível elaborar um fluxograma da planta de produção de acetona via desidrogenação do IPA, apresentado na Figura 16.

Figura 16 - Planta de produção de acetona integrada após mudanças propostas.



Fonte: Do autor (2021).

Em comparação com o processo convencional, apresentado na Figura 6, observa-se um fluxograma mais complexo para as correntes do processo, além da necessidade de se inserir equipamentos, sendo eles 6 trocadores de calor, dois separadores, um misturador e uma bomba.

A simulação da planta proposta foi realizada com o intuito de validar a possibilidade das trocas térmicas propostas, visto que foram necessárias aproximações das capacidades caloríficas não lineares.

Na Tabela 7 apresenta-se a energia trocada nos trocadores de calor, bem como as temperaturas de entrada e saída de cada equipamento, obtidas pelo Hint e através da simulação no COCO Simulator®. Os dados dos dois *softwares* apresentam valores bem próximos, com desvios menores que 2%. Isso valida as aproximações feitas para a C_p , e demonstra que estas foram bem precisas.

Além disso, a simulação comprova a possibilidade de realizar as trocas entre as correntes conforme proposto pela metodologia *Pinch*, sem afetar as condições de processo.

Tabela 7 - Dados dos trocadores de calor da rede projetada.

Trocador	Software	Troca térmica (kW)	Correntes frias		Correntes quentes	
			T _{entrada} (K)	T _{saída} (K)	T _{entrada} (K)	T _{saída} (K)
1	Hint	92,71	376,00	344,72	306,30	366,00
	COCO	92,71	368,72	345,23	306,30	367,86
	Desvio (%)	0,00	1,94	0,15	0,00	0,51
2	Hint	39,73	376,00	321,81	306,30	366,00
	COCO	39,74	376,00	321,77	306,33	367,86
	Desvio (%)	0,03	0,00	0,01	0,01	0,51
3	Hint	432,48	623,15	376,00	366,00	376,17
	COCO	420,00	623,15	368,72	367,86	376,17
	Desvio (%)	2,89	0,00	1,94	0,51	0,00
4	Hint	4,11	381,60	376,00	366,00	370,05
	COCO	4,11	381,60	376,00	365,95	370,02
	Desvio (%)	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01
5	Hint	75,65	344,72	340,37	295,00	330,00
	COCO	75,65	345,23	340,91	295,00	330,01
	Desvio (%)	0,00	0,15	0,16	0,00	0,00
C6	Hint	-460,05	340,36	293,15	AR	AR
	COCO	-472,57	340,91	293,15	AR	AR
	Desvio (%)	-2,72	0,16	0,00	-	-
C7	Hint	-2,68	321,81	318,15	AR	AR
	COCO	-2,66	321,77	318,15	AR	AR
	Desvio (%)	-0,75	0,01	0,00	-	-
C8	Hint	-8,36	318,15	298,15	AR	AR
	COCO	-8,42	318,15	298,15	AR	AR
	Desvio (%)	-0,72	0,00	0,00	-	-
H9	Hint	10,09	VMP	VMP	370,05	380,00
	COCO	10,18	VMP	VMP	370,02	380,00
	Desvio (%)	0,89	-	-	0,01	0,00
H10	Hint	416,10	VAP	VAP	376,17	507,15
	COCO	428,60	VAP	VAP	376,17	507,15
	Desvio (%)	3,00	-	-	0,00	0,00

Fonte: Do autor (2021).

Na Tabela 7 as abreviações AR, VMP e VAP, significam respectivamente água de resfriamento, vapor de média pressão e vapor de alta pressão.

As utilidades quentes foram determinadas de forma que suprissem as necessidades de temperatura de saída das correntes de processo, de acordo com os valores fornecidos para as temperaturas de vapor fornecidas por Turton *et. al* (2018).

5.5 Ecoindicadores

Como o objetivo deste trabalho foi propor modificações para a planta de produção de acetona a fim de diminuir seu impacto ambiental, foram então calculados os ecoindicadores de consumo de energia, água e geração de efluentes, como descrito na metodologia. Os resultados estão apresentados na Tabela 8.

Tabela 8 - Comparação dos consumos de utilidades da planta proposta por Turton *et al.* (2009) e a proposta neste trabalho.

Referência	Indicador	Resultado
Turton	Consumo de energia (GJ/ton Acetona)	6,22
Integrada	Consumo de energia (GJ/ton Acetona)	4,97
Redução (%)		20,13
Turton	Consumo de água (Kg/ton Acetona)	361,26
Integrada	Consumo de água (Kg/ton Acetona)	166,81
Redução (%)		46,17
Turton	Geração de efluentes (Kg/ton Acetona)	343,29
Integrada	Geração de efluentes (Kg/ton Acetona)	148,14
Redução (%)		56,8

Fonte: Do autor (2021).

Os resultados dos cálculos dos ecoindicadores das plantas estudadas neste trabalho mostram que as alterações propostas foram de grande impacto, apresentando uma redução de 20,13% no indicador de consumo de energia, o consumo de água de processo da planta foi reduzido em 46,17% e a geração de efluentes foi reduzida em mais da metade, mais precisamente em 56,8%.

6 CONCLUSÕES

Nesta seção são apresentadas as conclusões do trabalho e sugestões para projetos futuros abrangendo processos de produção de acetona.

No decorrer deste trabalho, foi estudado o processo de produção de acetona via reação de desidrogenação do álcool isopropílico, proposto por Turton *et al.* (2009), com o objetivo de realizar melhorias no processo a fim de diminuir seu impacto ambiental. Foram realizadas simulações para validar as alterações propostas, utilizando um software livre, o COCO Simulator, que se mostrou bastante confiável, apresentando desvios pequenos em relação aos resultados de Turton *et al.* (2009).

A metodologia Pinch se mostrou uma ferramenta eficaz para construção de rede de troca térmica e conseqüente redução de utilidades, visto que a recuperação energética das correntes do processo é capaz de proporcionar uma grande economia de energia, representando nesse estudo uma redução de 20,15% no consumo de utilidades quentes e de 51,66% no consumo de utilidades frias.

Os resultados das simulações mostraram que as modificações propostas na planta são interessantes. Quando comparada a planta proposta por Turton *et al.* (2009), simulada neste trabalho, a planta modificada apresentou uma redução 20,13% no indicador de energia, devido a integração energética, 46,17% no indicador de consumo de água de processo e 56,8% no indicador de geração de efluentes, devido ao reciclo da corrente de fundo da segunda torre de destilação, sem modificar a composição da corrente de acetona.

Para trabalhos futuros, sugere-se o estudo da variação do ΔT_{\min} , para determinar diferença mínima de temperatura ótima para a obtenção da análise de menor custo para a produção, e também a realização da avaliação de viabilidade econômica das alterações propostas, contabilizando os custos de implementação dos novos trocadores de calor e mudanças nas correntes do processo.

REFERÊNCIAS

- ALENCAR, L. P. *et al.* Aplicação do software de simulação COCO para avaliação do processo de produção de amônia através do processo haber-bosch. In: **Anais do XIII Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica**. São Paulo: Blucher, 2019.
- BENITES, G. D. E. *et al.* Optimización de redes de intercambiadores de calor en endulzamiento de gas natural vía tecnología Pinch. **Ciencia y Tecnología**, v. 3, n. 12, p. 167-184, 2016. Disponível em: < <https://revistas.unitru.edu.pe/index.php/PGM/article/view/1488> >. Acesso em: 10 de outubro de 2021.
- BIEGLER, L. T.; GROSSMANN, I. E.; WESTERBERG, A.W. **Systematic Methods of Chemical Process Design**. Upper Saddle River: Prentice Hall, 1997.
- CERATO, A. C. **Integração energética da rede de trocadores de calor em extração por solvente para a produção de farelo branco de soja**. Tese (Mestre em Engenharia Química) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2004.
- CINTRA, T. R. **Modelagem e simulação de coluna de destilação reativa**. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharel em Engenharia Química) - Centro de Tecnologia, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2020.
- DIAS, R. F. **Avaliação de ecoeficiência de processos de produção de Dimetil Éter via simulação computacional**. 193 f. Dissertação (Mestre em Engenharia Química) – Universidade Federal Fluminense, Niterói, 2017.
- ENSINAS, A. V. **Integração térmica e otimização termo econômica aplicadas ao processo industrial de produção de açúcar e etanol a partir da cana-de-açúcar**. 207p. Tese (Doutor em Engenharia Mecânica) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica, Campinas, SP, 2008.
- FALEIROS, R. R.; LUIZ, L. S. **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, Poços de Caldas, 2014.
- FERNANDES JUNIOR, C. C. **Energetic integration of extraction step of soybean oil, using Pinch analysis**. 2009. 94 f. Dissertação (Mestre em Desenvolvimento de Processos) - Universidade Estadual do Oeste do Paraná, Toledo, 2009.
- FERNANDEZ, LUCIA. Market volume of acetone worldwide from 2015 to 2020, with a forecast for 2021 to 2026. **Statista**, 2021. Disponível em: < <https://www.statista.com/statistics/1245205/acetone-market-volume-worldwide/> >. Acesso: 25 de outubro de 2021.
- FURMAN, K. C.; SAHINIDIS, N. V. A critical review and annotated bibliography for heat exchanger network synthesis in the 20th century. **Industrial & Engineering Chemistry**

Research, v. 41, n. 10, p. 2335-2370, 2002. Disponível em: < <https://doi.org/10.1021/ie010389e> >. Acesso em: 15 de outubro de 2021.

GONÇALVES, R. V. **Projeto auxiliado por computador de processos industriais sustentáveis usando os softwares COCO e Scilab**. 126 f. Dissertação (Mestre em Engenharias) - Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2011.

GUNDERSEN, T. A. **Process Integration Prime: Implementing agreement on process integration**. International Energy Agency, 2000.

IHS MARKIT (Org.). **Chemical Economics Handbook: Isopropyl Alcohol (IPA)**. Londres, 2015.

KARUPPIAH, R.; GROSSMANN, I. E. Global optimization for the synthesis of integrated water systems in chemical processes. **Computers and Chemical Engineering**, v. 30. n. 4, p. 650-673, 2006. Disponível em: < <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2005.11.005> >. Acesso: 20 de outubro de 2021.

KU-PINEDA, V.; TAN, R. R. Environmental performance optimization using process water integration and Sustainable Process Index. **Journal of Cleaner Production**, v. 14, p. 1586-1592, 2006. Disponível em: < <http://dx.doi.org/10.1016%2Fj.jclepro.2005.04.018> >. Acesso em: 15 de outubro de 2021.

LEEWONGTANAWIT, B.; KIM, J. K. Synthesis and optimization of heat-integrated multiple-contaminant water systems. **Chemical Engineering and Processing**, v. 47, p. 670-694, 2008. Disponível em: < <https://www.cheric.org/research/tech/periodicals/view.php?seq=736703> >. Acesso em: 05 de outubro de 2021.

MARTIN, A.; MATO, F. A. Hint: An educational software for heat exchanger network design with the pinch method. **Education for Chemical Engineers**, v. 3, n. 1, p. 6-14, 2008. Disponível em: < <http://dx.doi.org/10.1016/j.ece.2007.08.001> >. Acesso em: 04 de novembro de 2021.

MCCABE, W.L.; SMITH, J.C.; HARRIOTT, P. **Unit Operations of Chemical Engineering**. 7th Edition, McGraw-Hill Book Co, 2005.

MONTEIRO, L.D.; FERREIRA, M. **Integração e avaliação técnico-econômica do processo produtivo de acetona com o auxílio de simulação computacional**. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Química) - Escola de Engenharia, Universidade Federal Fluminense, Niterói, 2019.

NAVARINI, C. **Integração energética e análise de viabilidade econômica em uma planta de dimetil éter**. 2019. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) – Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Francisco Beltrão, 2019.

OLIVEIRA, C. M. **Integração energética da biorrefinaria de cana-de-açúcar para produção de etanol de primeira e segunda geração e energia elétrica**. Dissertação (Mestre em Engenharia Química) - Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2014.

OLIVEIRA, F. M. M. **Estudo de caso da integração energética em uma planta industrial dehidrodealquilação (HDA) do tolueno.** 56p. 2021. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Química) – Universidade Federal do Pampa, Bagé, 2021.

O'NEIL, M. J. **The Merck Index: An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals.** 14. ed. New Jersey: Merck, 2006.

PEREIRA, C.P.; PRATA, D.M.; SANTOS, L.S.; MONTEIRO, L.C.P. Development of Eco-efficiency Comparison Index Through Eco-Indicators for Industrial Applications. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 35, p. 63-84, 2018.

RIBEIRO, F. M. G. **Usos da água na indústria sucroalcooleira: estudo de caso.** 2011. 183 p. Dissertação (Mestre em Engenharia Civil) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Civil, Arquitetura e Urbanismo, Campinas, 2011.

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.

SILVA, V. P. R. *et al.* Uma medida de sustentabilidade ambiental: pegada hídrica. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v.17, n.1, p. 100-105, 2013. Disponível em: < <https://doi.org/10.1590/S1415-43662013000100014> >. Acesso: 14 de outubro de 2021.

SOARES, R. P. **Desenvolvimento de um simulador genérico de processos dinâmicos.** Dissertação (Mestre em Engenharia Química) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Escola de Engenharia, Porto Alegre, 2003.

TELES, J.; CASTRO, P. M.; NOVAIS, A. Q. LP-based solution strategies for the optimal design of industrial water networks with multiple contaminants. **Chemical Engineering Science**, v.63, p. 376- 394, 2008. Disponível em: < <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2007.09.033> >. Acesso: 05 de novembro de 2021.

TURTON, R. *et al.* **Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Process.** 3. ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2009.

TURTON, R.; SHAEIWITZ, J. A.; BHATTACHARYYA, D.; WHITING, W. B. **Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes.** United States: Pearson Education, Inc., 2018. 1549p.

VELLASCO JÚNIOR, W. T. Acetona. **Revista Virtual de Química**, Rio de Janeiro, v. 4, n. 3, p. 339-343, 2011. Disponível em: < <https://rvq-sub.s bq.org.br/index.php/rvq/article/view/196> >. Acesso em: 17 de outubro de 2021.

XAVIER, M. F. **Reuso e minimização do consumo de água em indústrias químicas utilizando a regeneração diferenciada de contaminantes.** Tese (Doutor em Engenharia Química) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Florianópolis, 2009.

YEE, T. F.; GROSSMANN, I. E. Simultaneous optimization models for heat integration – II: heat exchanger network synthesis. **Computers & Chemical Engineering**, v. 14, n. 10, p. 1165 – 1184, 1990. Disponível em: < [https://doi.org/10.1016/0098-1354\(90\)85010-8](https://doi.org/10.1016/0098-1354(90)85010-8) >. Acesso em: 05 de outubro de 2021.