



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

Angelo Vinicius França de Agostinho

Isabela Gessi Filla

Isabelli Krul Vieira

Luiz Augusto Dembicki Fernandes

Relatório Técnico Final

Curitiba

2023

ANGELO VINICIUS FRANÇA DE AGOSTINHO
ISABELA GESSI FILLA
ISABELLI KRUL VIEIRA
LUIZ AUGUSTO DEMBICKI FERNANDES

RELATÓRIO TÉCNICO FINAL

Relatório Técnico Final apresentado ao curso de Graduação em Engenharia Química, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à aprovação na disciplina Integração I..

Orientadores: Prof^a Profa. Dra. Luciana I. Mafra, Profa. Dra. Maria Lucia Masson, Prof. Dr. Marcos R. Mafra, Profa. Dra. Myriam Lorena M. N. Cerutti, Profa. Dra. Tirzhá L. P. Dantas, Prof. Dr. Vitor R. da Silva.

CURITIBA

2023

RESUMO

O metanol, também conhecido como álcool metílico ou hidrato de metila, é um gás incolor, volátil, tóxico e mistura-se completamente com água. No presente trabalho, foi realizada uma análise dos dados termodinâmicos e fórmulas. Após o estudo das rotas, realizou-se um estudo mais aprofundado da produção do metanol. Com o intuito de simular a atuação de um engenheiro químico na indústria, foram efetuados o balanço energético considerando pontos de mistura, o reator, trocadores de calor, destiladora e outros pontos da planta

Palavras-chaves: metanol, álcool metílico, hidrato de metila, balanço de massa, processo químico, produção de metanol.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIGURA 1 – FÓRMULA ESTRUTURAL DO METANOL	12
FIGURA 2 – CADEIA DO METANOL COMO PRODUTO QUÍMICO INDUSTRIAL	13
FIGURA 3 – FLUXOGRAMA DO PROCESSO DE ALIMENTAÇÃO E REATOR	14
FIGURA 4 – FLUXOGRAMA DO PROCESSO DE CONDENSAÇÃO	16
FIGURA 5 – FLUXOGRAMA DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO	18
FIGURA 6 – FLUXOGRAMA DO REATOR	20
FIGURA 7 – FLUXOGRAMA DO VASO DE SEPARAÇÃO 1	21
FIGURA 8 – FLUXOGRAMA DO VASO DE SEPARAÇÃO 2	22
FIGURA 9 – FLUXOGRAMA DA COLUNA DE DESTILAÇÃO	23
FIGURA 10 – FLUXOGRAMA DO TANQUE DE SEPARAÇÃO	24
FIGURA 11 – DIAGRAMA DA TUBULAÇÃO	49
FIGURA 12 – VÁLVULA DE BLOQUEIO DE ESFERA	50
FIGURA 13 – VÁLVULA DE RETENÇÃO DE PISTÃO	51
FIGURA 14 – TANQUE HORIZONTAL	51

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – VAZÕES E FRAÇÕES DAS CORRENTES 1 E 2	26
TABELA 2 – VAZÕES E FRAÇÕES DAS CORRENTES 3, 4 E 5	27
TABELA 3 – VAZÕES E FRAÇÕES DAS CORRENTES 6, 7 E 8	27
TABELA 4 – VAZÕES E FRAÇÕES DA CORRENTE 9	27
TABELA 5 – VAZÕES E FRAÇÕES DA CORRENTE 10	28
TABELA 6 – VAZÕES E FRAÇÕES DAS CORRENTES 11 E 12	28
TABELA 7 – VAZÕES E FRAÇÕES DAS CORRENTES 13 E 14	28
TABELA 8 – VAZÕES E FRAÇÕES DA CORRENTE 15	29
TABELA 9 – VAZÕES E FRAÇÕES DA CORRENTE 16	29
TABELA 10 – VAZÕES E FRAÇÕES DAS CORRENTES 17 E 18	29
TABELA 11 – VAZÕES E FRAÇÕES DA CORRENTE 19	29
TABELA 12 – VAZÕES E FRAÇÕES DA CORRENTE 20	30
TABELA 13 – VAZÕES E FRAÇÕES DA CORRENTE 21	30
TABELA 14 – VAZÕES E FRAÇÕES DAS CORRENTES 22 E 23	30
TABELA 15 – VAZÕES E FRAÇÕES DAS CORRENTES 24 E 25	30
TABELA 16 – TABELA DE DADOS TERMODINÂMICOS GERAIS	34
TABELA 17 – TABELA DE DADOS DE ANTOINE	34
TABELA 18 – TABELA DE DADOS DE ANTOINE CONTINUAÇÃO	34
TABELA 19 – TABELA DE DADOS TERMODINÂMICOS DA AMÔNIA	39
TABELA 20 – ENTALPIAS DA CORRENTE 2	40
TABELA 21 – ENTALPIAS DA CORRENTE 3	40
TABELA 22 – ENTALPIAS DA CORRENTE 4	40
TABELA 23 – ENTALPIAS DA CORRENTE 5	41
TABELA 24 – ENTALPIAS DO REATOR	41
TABELA 25 – ENTALPIAS DA CORRENTE 6	41
TABELA 26 – ENTALPIAS DA CORRENTE 7	41
TABELA 27 – ENTALPIAS DA CORRENTE 8	42
TABELA 28 – ENTALPIAS DA CORRENTE 12	42
TABELA 29 – ENTALPIAS DA CORRENTE 16	42
TABELA 30 – ENTALPIAS DA CORRENTE 17	43
TABELA 31 – ENTALPIAS DA CORRENTE 18	43
TABELA 32 – ENTALPIAS DA CORRENTE 21	43
TABELA 33 – ENTALPIAS DA CORRENTE 24	43
TABELA 34 – K CARACTERÍSTICO DOS ACESSÓRIOS DA SUCÇÃO	45

TABELA 35 – K CARACTERÍSTICO DOS ACESSÓRIOS DO RECALQUE . . .	45
TABELA 36 – PREÇO POR KG DE TUBULAÇÃO (\$)	47
TABELA 37 – RUGOSIDADE ABSOLUTA	48
TABELA 38 – ENTALPIAS DA CORRENTE 1	52
TABELA 39 – ENTALPIAS DA CORRENTE 2 ISENTRÓPICA	53

LISTA DE ABREVIATURAS E DE SIGLAS

B-1 Bomba 1

B-2 Bomba 2

CNTP Condições normais de temperatura e pressão(1 Bar e 25°C)

CP-1 Compressor 1

CP-2 Compressor 2

DE-1 Destiladora

F-1 Forno de Pré-Aquecimento

RE-1 Reator Catalítico

TC-1 Trocador de Calor 1

TC-2 Trocador de Calor 2

TC-3 Trocador de Calor 3

TC-4 Trocador de Calor 4

TC-5 Trocador de Calor 5

TS Tanque de Separação

UFPR Universidade Federal Do Paraná

VS-1 Sistema de Condensação Parcial 01

VS-2 Sistema de Condensação Parcial 02

LISTA DE SÍMBOLOS

H_2O	Água
H_2	Hidrogeno Molecular
CO	Monóxido de Carbono
CO_2	Dióxido de Carbono
O_2	Oxigênio Molecular
N_2	Nitrogênio Molecular
\underline{H}	Entalpia Molar
\underline{H}^{res}	Entalpia Molar Residual
\underline{H}^{Vap}	Entalpia Molar de Vaporização
R	Constante dos Gases Ideais
T_b	Temperatura de ebulição na CNTP
T_c	Temperatura Crítica
\dot{n}	Vazão Molar em kmol
\dot{X}	Fração Molar
\dot{Q}	Vazão Calorífica
\dot{W}_s	Trabalho de Eixo
$\dot{\omega}$	Fração Mássica
ω	Fator acêntrico
ΔH_f	Entalpia de formação molar
ξ	Grau de avanço
T_r	Temperatura Reduzida
T	Temperatura
T_{min}	Temperatura mínima
T_n	Temperatura CNTP de ebulição

T_{ref}	Temperatura Referência
T_{max}	Temperatura máxima
T_{min}	Temperatura mínima
P	Pressão
T_{vap}	Temperatura de Vaporização
C_P^{ig}	Capacidade Calorífica a Pressão Constante de Gás Ideal
C_P^L	Capacidade Calorífica a Pressão Constante de Líquido
\underline{C}_P^{ig}	Capacidade Calorífica a Pressão Constante de Gás Ideal Molar
$\underline{C}_P^{V,ig}$	Capacidade Calorífica a Pressão e Volume Constantes de Gás Ideal Molar
$\underline{C}_P^{V,L}$	Capacidade Calorífica a Pressão Constante de Líquido Molar
ε	Rugosidade
Re	Número de Reynolds
f	Fator de atrito
ρ	Densidade

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
1.1	REVISÃO DE LITERATURA	11
1.1.1	MERCADO DE METANOL	11
1.1.2	CARACTERÍSTICAS E APLICAÇÕES	11
1.1.3	ROTAS DE PRODUÇÃO	13
2	DESCRIÇÃO DA PLANTA	14
2.1	ALIMENTAÇÃO E REATOR	14
2.2	COMPRESSOR 1 E 2	14
2.3	TROCADOR DE CALOR E FORNO DE PRÉ-AQUECIMENTO	15
2.4	REATOR	15
2.5	SISTEMAS DE CONDENSAÇÃO	16
2.6	SISTEMA DE CONDENSAÇÃO PARCIAL – VASO 1 E 2	16
2.7	RECICLO E PURGA	17
2.8	DESTILADORA	17
3	BALANÇO DE MASSA - MEMORIAL DE CÁLCULO	19
3.1	CORRENTE DE ENTRADA	19
3.2	REATOR (RE-1)	20
3.3	VASO DE SEPARAÇÃO 1 (VS-1)	21
3.4	VASO DE SEPARAÇÃO 2 (VS-2)	22
3.5	COLUNA DE DESTILAÇÃO (DE-1)	23
3.6	TANQUE DE SEPARAÇÃO (TS)	24
4	BALANÇO DE MASSA - RESULTADOS E DISCUSSÃO	26
4.1	CÁLCULO DAS CORRENTES E RESULTADOS	26
4.2	DISCUSSÃO	31
5	CÁLCULO DE ENTALPIAS	32
5.1	TROCADOR DE CALOR 1	34
5.2	FORNO	35
5.3	REATOR	36
5.4	TROCADOR DE CALOR 2	36
5.5	DESTILADORA	36

6	BALANÇO DE ENERGIA - CÁLCULO DAS CARGAS TÉRMICAS E DAS VAZÕES DAS UTILIDADES	38
6.1	FORNO	38
6.2	REATOR	38
6.3	TROCADOR DE CALOR 2	38
6.4	TROCADOR DE CALOR 4	39
6.5	TROCADOR DE CALOR 5	39
7	RESULTADOS E DISCUSSÃO - CARGAS TÉRMICAS E VAZÕES DE UTILIDADES	40
8	DIMENSIONAMENTO DE TUBULAÇÕES E ACESSÓRIOS	44
8.1	CÁLCULOS DE DIMENSIONAMENTO DAS TUBULAÇÕES E DA BOMBA	44
8.2	MATERIAL DA TUBULAÇÃO	47
8.3	SELEÇÃO DE VÁLVULAS	48
8.4	AVALIAÇÃO DO TANQUE DE ARMAZENAMENTO DE METANOL . . .	51
9	COMPRESSOR - POTÊNCIA E EFICIÊNCIA	52
10	CONCLUSÃO	54
	REFERÊNCIAS	55
	ANEXOS	57
ANEXO A	PLANTA DE PRODUÇÃO DE METANOL	58
ANEXO B	CÓDIGO FONTE DE CÁLCULOS DE ENTALPIA	59

1 INTRODUÇÃO

O metanol, também conhecido como álcool metílico e hidratado de metila, é muito utilizado nas indústrias químicas como solvente. Ele é bastante eficiente no processo de dissolução de alguns sais e ainda pode ser usado na fabricação de plástico, preparo de vitaminas, hormônios e produção de biodiesel. Durante muitos anos, essa substância foi obtida unicamente pela destilação da madeira a seco e na ausência de ar, o que tornou o metanol conhecido como álcool de madeira. Hoje, a substância é obtida sinteticamente a partir do monóxido de carbono (processo carboquímico) ou por oxidação controlada do metano (processo petroquímico).

Dada a importância dessa substância, o presente trabalho apresentará o seu processo, demonstrado o balanço de energia, o qual analisará as entalpias do processo e os estados físicos dos componentes, incluindo ainda o refluxo de energia nos equipamentos.

1.1 REVISÃO DE LITERATURA

1.1.1 MERCADO DE METANOL

A produção mundial de metanol é de aproximadamente 80 milhões de toneladas por ano, tendo um nível de atividade produtiva total de 128 milhões de toneladas, em 2018. Os investimentos têm se concentrado no nordeste asiático, sendo a China responsável por 76% das novas adições de capacidade entre 2010 e 2018 (REFINITIV, 2019).

O crescimento da demanda por metanol nos últimos anos apresenta taxas elevadas, em torno de 4% ao ano, o que equivale à produção de até 4 milhões de toneladas de metanol. As importações partiram de 1,5 milhão de toneladas em 2005 para 7,5 milhões de toneladas em 2018 (ARGUS, 2019).

O uso do metanol tem amplitude de mercado considerando uma série de aplicações dos seus derivados, o produto pode ser usado em diversas sínteses químicas, como solvente e outros. Cerca de 60% da demanda global por metanol deriva dos produtos químicos industriais e são utilizados na fabricação de bens de consumo (METHANOL INSTITUTE, 2018).

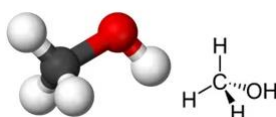
1.1.2 CARACTERÍSTICAS E APLICAÇÕES

O metanol é líquido incolor bastante volátil com um odor levemente adocicado como o do álcool etílico. Mistura-se completamente com água. Os vapores são ligeira-

mente mais pesados que o ar e podem percorrer uma certa distância até uma fonte de ignição e voltar. qualquer acúmulo de vapores em espaços confinados, como prédios ou esgotos, pode explodir se inflamado. usado para fabricar produtos químicos, para remover água de combustíveis automotivos e de aviação, como solvente para tintas e plásticos e como ingrediente em uma ampla variedade de produtos. (PUBCHEM, 2022).

Sua massa molar é de 32,04 g/mol, seu ponto de ebulição e de fusão são 65°C e -97,8°C, respectivamente, e é miscível em água a 25°C. Sua pressão de vapor, à essa mesma temperatura, é de 13,02 KPa, com densidade de 792 Kg/m³. a exposição aguda (curto prazo) ou crônica (longo prazo) de humanos ao metanol por inalação ou ingestão pode resultar em visão turva, dor de cabeça, tontura e náusea. (PUBCHEM, 2022).

FIGURA 1 – FÓRMULA ESTRUTURAL DO METANOL

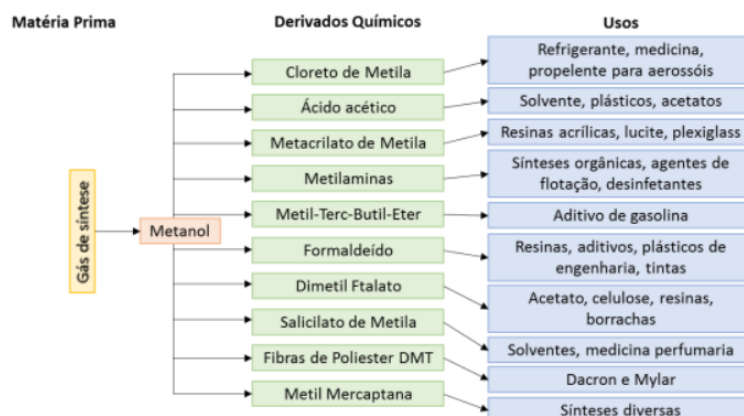


FONTE: MUNDO EDUCAÇÃO.

O metanol é largamente utilizado nas indústrias química, petroquímica, farmacêutica e de polímeros, como matéria-prima para reações de síntese, bem como solvente para outros químicos. mundialmente, um terço da demanda de metanol destina-se à produção de formaldeído. o formaldeído é usado, principalmente, na produção de resinas amínicas e resinas fenólicas. o formaldeído, pode dar também origem a produtos como colas e plásticos variados. (Projeto FEUP (FEUP-FEUP002)).

O metanol é mais comumente usado como solvente nos produtos de limpeza, vidros anticongelantes. pode também ser usado para extrair, lavar, secar e cristalizar produtos químicos farmacêuticos e produtos químicos para a agricultura. a metilamina é usada como produto intermediário numa variedade de químicos com aplicações especializadas em tratamento de águas, detergentes líquidos e rações de animais. para além disso, o metanol é um recurso único usado em turbinas de energia para produção de eletricidade, e um transportador de hidrogénio ideal para a tecnologia de células energéticas ou de combustível, incluindo energia portátil. (Projeto FEUP (FEUP-FEUP002)).

FIGURA 2 – CADEIA DO METANOL COMO PRODUTO QUÍMICO INDUSTRIAL



FONTE: GOVERNO FEDERAL.

1.1.3 ROTAS DE PRODUÇÃO

Durante muito tempo, o metanol foi obtido somente pela destilação da madeira a seco e na ausência de ar, o que tornou o metanol conhecido como álcool de madeira. o primeiro a realizar esse método foi Robert Boyle (1627-1691), em 1664. A madeira é destilada a seco ausência de ar, com temperaturas muito elevadas, 400°C. Então, obtêm-se quatro frações nos três estados de agregação. Principalmente por não ser econômico, a produção não é mais utilizada. (JOVELINO, MARQUES, COSTA, SILVA, FRANÇA).

Atualmente, em escala industrial, é produzido predominantemente a partir do gás natural pelo processo de reforma valor ou gaseificação do carvão, sendo obtido o gás de síntese, composto principalmente de CO, CO₂ e H₂, na correta proporção para a síntese do metanol. (JOVELINO, MARQUES, COSTA, SILVA, FRANÇA).

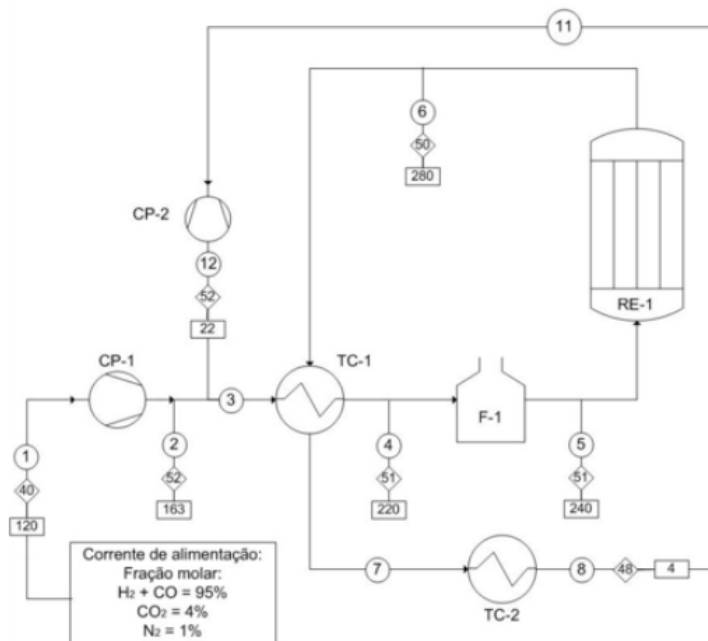
A gaseificação trata-se da conversão de combustíveis sólidos em gasosos, por meio de reações termoquímicas, envolvendo vapor quente e ar, ou oxigênio, em quantidades inferiores à estequiométrica (mínimo teórico para a combustão). Há 8 vários tipos de gaseificadores, com grandes diferenças de temperatura e/ou pressão. O gás resultante é uma mistura de monóxido de carbono, hidrogênio, metano, dióxido de carbono e nitrogênio, cujas proporções variam de acordo com as condições do processo, particularmente se é ar ou oxigênio que está sendo usado na oxidação. (JOVELINO, MARQUES, COSTA, SILVA, FRANÇA).

2 DESCRIÇÃO DA PLANTA

2.1 ALIMENTAÇÃO E REATOR

A corrente de alimentação (1) contendo nitrogênio, dióxido de carbono, óxido de carbono e hidrogênio seguem pela corrente (2), onde acontece a pressurização. na corrente (3), os reagentes não consumidos voltam para o processo (N_2 , CO , H_2), avançando para dois aquecimentos seguidos de aproveitamento energético (4), e ajuste de temperatura (5). No reator, a reação acontece, formando o metanol. Os gases seguem para a corrente (6) e (7), onde passam por outros trocadores de calor. Esse processo pode ser representado pela figura 3, retirada da planta fornecida. Cada equipamento utilizado será descrito logo abaixo.

FIGURA 3 – FLUXOGRAMA DO PROCESSO DE ALIMENTAÇÃO E REATOR



FONTE: Fluxograma fornecido em aula.

2.2 COMPRESSOR 1 E 2

A função do compressor é realizar o aumento da pressão de um fluido no estado gasoso. A corrente 1 é alimentada por gás hidrogênio (H_2), gás nitrogênio (N_2), monóxido de carbono (CO) e dióxido de carbono (CO_2), à 120°C e pressão de 40 bar. Essa corrente segue para o compressor (CP-1), para aumentar a pressão inicial, para 163°C e 52 bar.

a corrente 11 tem o objetivo de prover a economia de energia, financeiro e de matéria-prima durante o processo de produção de metanol. Então, desejando ajustar a corrente 11 ao ponto de mistura, ela é levada ao compressor 2 (CP-2).

2.3 TROCADOR DE CALOR E FORNO DE PRÉ-AQUECIMENTO

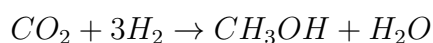
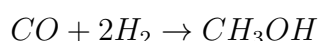
Os trocadores de calor possuem muita importância nas indústrias, no processo esses equipamentos têm a função de reaproveitar a energia.

a corrente 3 com a mistura de gases segue para o trocador de calor 1 (TC-1), elevando a temperatura para 220 °C. Criando assim, a corrente 4, que são os produtos do aquecimento da corrente 3, e os produtos da corrente 6, que saem do reator.

Em seguida, o forno de pré-aquecimento age no ajuste da temperatura, para atingir a temperatura adequada para a entrada no reator, 240 °C.

2.4 REATOR

Os reatores químicos industriais são vasos projetados para realizar diversas reações químicas, sendo que o seu principal objetivo é resultar na maximização de cada reação que é realizada. Com a temperatura adequada, a corrente 5 entra no reator, onde as reações primária e secundária ocorrem. A reação primária utiliza CO como reagente se deve ao produto indesejado da reação secundária, o H_2O . A corrente 6, resultante da reação, possui temperatura superior à temperatura da corrente de entrada, o que descreve que as reações são exotérmicas.



Assim, o metanol e água são formados. Foi considerado uma conversão de 100% do dióxido de carbono, 53,75% de monóxido de carbono e um excesso de 13 mols de hidrogênio

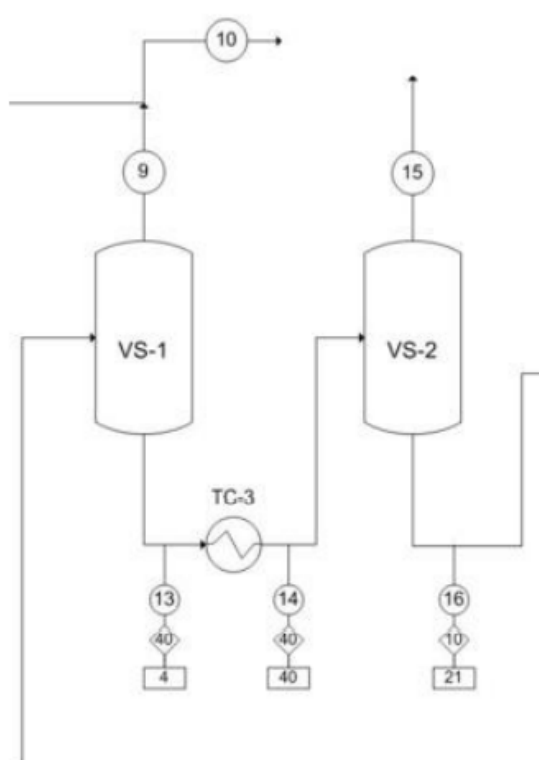
Na corrente 6, os gases não consumidos (H_2 , CO e N_2) e formados (H_2O e CH_3OH) saem do reator com temperatura de 280 °C, com pressão de 50 bar. passando pelo primeiro trocador de calor, agindo para aquecer a corrente de alimentação, e em seguida por outro, diminuindo a temperatura para 4 °C e a pressão para 48 bar.

2.5 SISTEMAS DE CONDENSAÇÃO

A corrente (8) segue para o primeiro sistema de condensação, a mistura se condensa. A parte gasosa continua para a corrente 9, que se divide (split) entre a purga (10) e reciclo (11).

A parte líquida (13) segue para um trocador de calor e em seguida parte para o segundo sistema de condensação. A corrente gasosa é retirada do processo (15) e a líquida segue para a coluna de destilação (16).

FIGURA 4 – FLUXOGRAMA DO PROCESSO DE CONDENSAÇÃO



FONTE: Fluxograma fornecido em aula.

2.6 SISTEMA DE CONDENSAÇÃO PARCIAL – VASO 1 E 2

Na primeira condensação, temperatura segue em 4°C e pressão de 40 bar, obtendo uma recuperação de 98% de CH_3OH e 96% de H_2O . Os gases que saem na saída de topo são metanol, água, monóxido de carbono, hidrogênio e nitrogênio. Todos os mesmos gases também se condensam e saem na fração líquida, passando por um trocador de calor aumentando a temperatura de 4°C para 40°C.

No vaso 1, que é alimentado pela corrente 8, ocorre a principal separação de nitrogênio da solução de metanol. Esses gases saem pela corrente de topo, corrente 9. Já o líquido composto por principalmente metanol e água sai pelo fundo,

corrente 13. Seguindo para o trocador de calor (TC-3), e assim, entrando no sistema de condensação parcial 2.

Esse condensador realiza a purificação do metanol, retirando parte dos gases restantes, que saem também pela corrente de topo, corrente 15, uma purga. A parte líquida segue pela corrente 16, que encaminha a mistura, de principalmente metanol e água, para o destilador. Os gases que saem na saída de topo e na corrente líquida são metanol, água, monóxido de carbono, hidrogênio e nitrogênio. Com uma temperatura de 21°C e pressão de 10 bar. Obtendo uma recuperação de 99,5% de CH_3OH e 98% de H_2O .

2.7 RECICLO E PURGA

A corrente 9, de topo, passa por um split, dividindo a corrente em duas, a corrente 10, a purga, e corrente 11, o reciclo. Na purga, serão eliminados metanol, água, monóxido de carbono, hidrogênio e nitrogênio, com o objetivo de eliminar as impurezas para o processo de reciclo. O restante da corrente, é encaminhada para o processo de reciclo. A corrente de reciclo, com todos os mesmos gases que foram retirados na purga, passa por um compressor mudando a pressão para 52 bar e 22 °C antes de voltar para a corrente de alimentação.

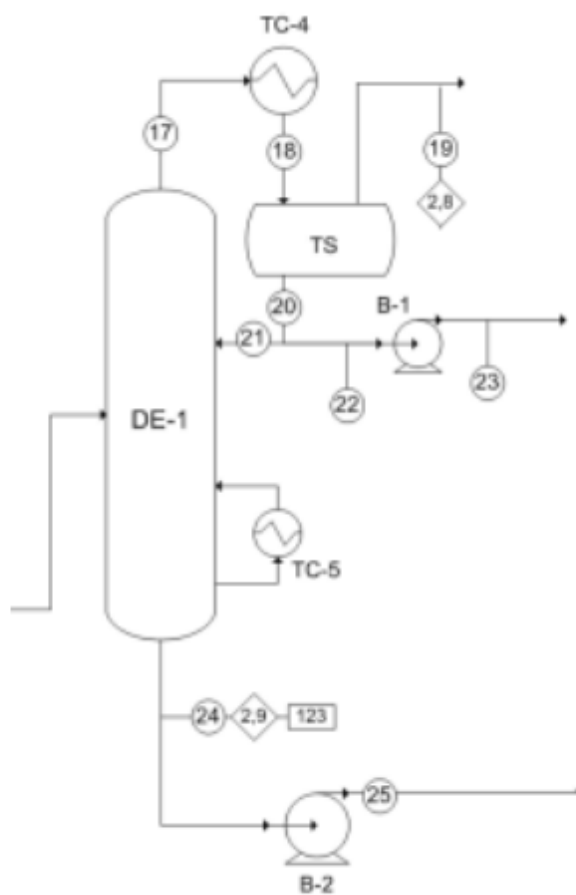
2.8 DESTILADORA

Nessa etapa do processo, a corrente 16 entra na destiladora, onde o aquecimento é promovido pelo trocador de calor (TC-3) saindo na corrente de topo, 17, junto com a corrente 21, os gases: metanol, água, monóxido de carbono, hidrogênio e nitrogênio. Seguindo para a purificação. na corrente de fundo (24), é retirado principalmente água, mas também metanol, bombeados por uma bomba (B-2).

A corrente 17 passa pelo trocador de calor 4 (TC-4), diminuindo a temperatura e tornando a corrente 18, que passa para um tanque separador para retirar os gases. Na corrente 20 ocorre uma divisão em duas correntes, 21 e 22, tendo a mesma vazão e composição molar, sendo uma delas retornando a coluna de destilação¹ e o destilado sendo bombeado.

A saída de fundo com água e metanol, sai da destiladora com temperatura de 123°C e 2.9 bar. A outra parte do tanque de separação, contendo metanol 99,9%, com o produto desejado, é bombeado pela corrente 23 para o termino do processo.

FIGURA 5 – FLUXOGRAMA DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO



FONTE: Fluxograma fornecido em aula.

3 BALANÇO DE MASSA - MEMORIAL DE CÁLCULO

O balanço de massa, também chamado de balanço material, consiste no uso de relações provenientes da lei de conservação da massa para descrever a composição e descobrir a quantidade de massa que atravessa o volume de controle no tempo delimitado (R. M. FELDER R. W. ROUSSEAU, 2016). Utilizando esses conceitos, é possível fixar determinadas condições, como a saída de um produto, e descobrir o fluxo de cada componente com base nessas relações. De forma generalizada, é possível escrever o balanço como sendo:

$$\text{entrada} - \text{saída} + \text{geração} - \text{consumo} = \text{acúmulo}$$

No processo analisado, o regime é permanente, logo o termo de acúmulo é desconsiderado. Para fins de cálculo, a planta foi dividida em volumes de controle que facilitassem a obtenção das vazões molares e das frações dos componentes.

3.1 CORRENTE DE ENTRADA

A corrente de entrada da planta possui apenas componentes gasosos, sendo eles CO_2 , CO , N_2 e H_2 . Sabe-se que as frações desses componentes se dá da seguinte maneira:

$$\dot{X}_{1,CO_2} = 0,04$$

$$\dot{X}_{1,N_2} = 0,01$$

$$\dot{X}_{1,H_2} = 1 - (\dot{X}_{1,CO} + 0,04 + 0,01)$$

Para descobrir a fração de CO , é necessário iterar com base em outras restrições, que serão definidas para as demais correntes da planta. Além disso, a vazão molar de entrada da planta é desconhecida, participando também como variável na iteração. A corrente 1 é idêntica à corrente 2 em termos de massa.

A corrente 5, que entra no reator, é igual à corrente 3 e à 4, e é dada pela junção da corrente de reciclo com a corrente de entrada da planta, ou seja:

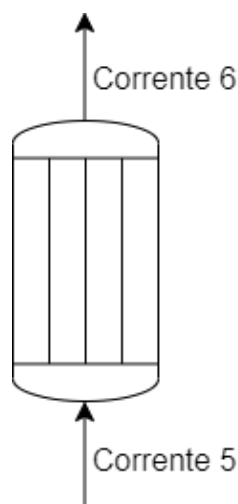
$$\dot{n}_3 = \dot{n}_2 + \dot{n}_{12}$$

A corrente 12 não possui CO_2 , pois esse será totalmente consumido na reação, como será visto a seguir, portanto não há reciclo desse componente.

3.2 REATOR (RE-1)

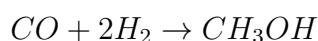
No reator, como ocorre a reação de produção de metanol, o número de mols que sai do equipamento (corrente 6) difere da quantidade de entrada (corrente 5).

FIGURA 6 – FLUXOGRAMA DO REATOR



FONTE: Os autores (2023).

As reações que ocorrem são:



Como na corrente de reciclo há metanol e água, há entrada desses componentes no reator. Também sabe-se que a conversão do CO_2 é total, enquanto a conversão do CO é de apenas 53,75%. Além disso, percebe-se que o N_2 não participa da reação, então atravessa o reator sem alterar sua vazão molar. A relação entre mols de H_2 e de CO é 2 para 1, enquanto entre o H_2 e o CO_2 é 3 para 1, como ilustrado na reação acima. Por fim, tem-se que entra no reator um excesso de H_2 igual a 13, em relação à entrada do CO . Essa relação é dada por (R. M. FELDER R. W. ROUSSEAU, 2016):

$$\frac{\dot{n}_{5,H_2} - 2 \cdot \dot{n}_{5,CO}}{2 \cdot \dot{n}_{5,CO}} = 13$$

Com essas informações, é possível calcular a vazão molar dos componentes como sendo:

$$\dot{n}_{6,CO_2} = 0$$

$$\dot{n}_{6,N_2} = \dot{n}_{5,N_2}$$

$$\dot{n}_{6,CO} = \dot{n}_{5,CO} \cdot (100 - 53,75)\%$$

$$\dot{n}_{6,H_2} = \dot{n}_{5,H_2} - (2 \cdot \dot{n}_{5,CO} \cdot 53,75\% + 3 \cdot \dot{n}_{5,CO_2})$$

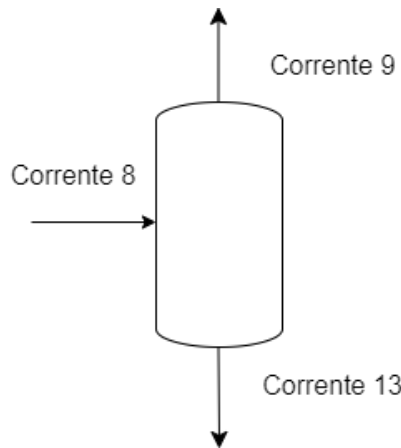
$$\dot{n}_{6,H_2O} = \dot{n}_{5,H_2O} + \dot{n}_{5,CO_2}$$

$$\dot{n}_{6,CH_3OH} = \dot{n}_{5,CH_3OH} + \dot{n}_{5,CO_2} + \dot{n}_{5,CO} \cdot 53,75\%$$

Como não há mais reatores na planta, a vazão molar da corrente 6 deve obrigatoriamente ser igual à vazão da soma das correntes 9, 15, 19, 23 e 25. Essa consideração será utilizada no final dos cálculos para verificar se o balanço está correto. Vale ressaltar que todo o CO_2 foi consumido no reator, portanto não aparecerá em nenhuma corrente posterior.

3.3 VASO DE SEPARAÇÃO 1 (VS-1)

FIGURA 7 – FLUXOGRAMA DO VASO DE SEPARAÇÃO 1



FONTE: Os autores (2023).

A corrente de entrada do vaso de separação, ou seja, a corrente 8, é idêntica à corrente 6 e, consequentemente, à corrente 7, em termos de matéria e massa. Após essa corrente passar pelo equipamento, essa se divide entre as correntes 9 e 13. Sabe-se que a recuperação do metanol é de 98% e a da água é de 96%, e sabe-se as frações de H_2 , CO e N_2 na saída do vaso de separação. Ou seja:

$$\dot{X}_{13,N_2} = 0,000058$$

$$\dot{X}_{13,CO} = 0,000044$$

$$\dot{X}_{13,H_2} = 0,001$$

$$\dot{n}_{13,H_2O} = \dot{n}_{8,H_2O} \cdot 96\%$$

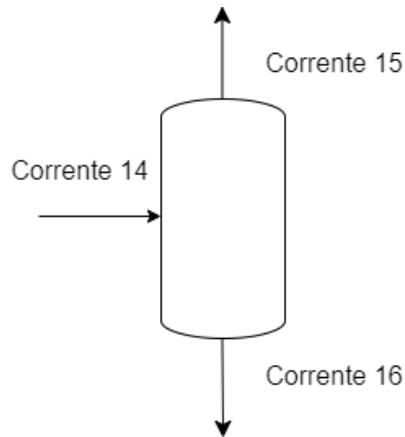
$$\dot{n}_{13,CH_3OH} = \dot{n}_{8,CH_3OH} \cdot 98\%$$

$$\dot{n}_{9,H_2O} = \dot{n}_{8,H_2O} \cdot (100 - 96)\%$$

$$\dot{n}_{9,CH_3OH} = \dot{n}_{8,CH_3OH} \cdot (100 - 98)\%$$

3.4 VASO DE SEPARAÇÃO 2 (VS-2)

FIGURA 8 – FLUXOGRAMA DO VASO DE SEPARAÇÃO 2



FONTE: Os autores (2023).

A corrente que entra no vaso de separação 2 é a corrente 14, que possui mesma composição e vazão molar que a corrente 13. As saídas do equipamento se dão pelas correntes 15, que é eliminada do processo, e 16, que segue para a coluna de destilação. No vaso de separação 2, a recuperação do metanol é de 99,5%, enquanto da água é de 98%. Também tem-se ciência das frações molares dos demais componentes. Portanto, para este equipamento, sabe-se que:

$$\dot{X}_{16,N_2} = 0,000053$$

$$\dot{X}_{16,CO} = 0,00004$$

$$\dot{X}_{16,H_2} = 0,00095$$

$$\dot{n}_{16,H_2O} = \dot{n}_{14,H_2O} \cdot 98\%$$

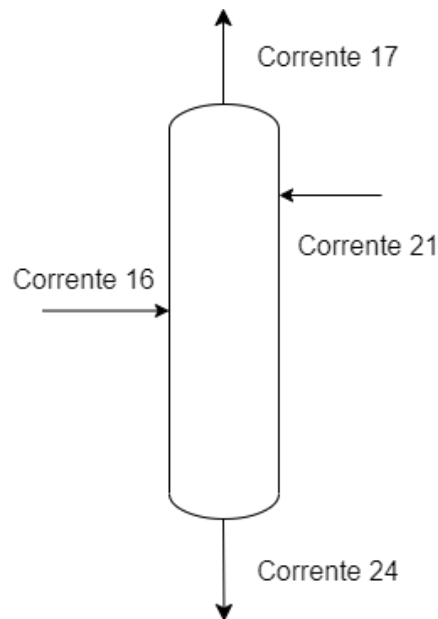
$$\dot{n}_{16,CH_3OH} = \dot{n}_{14,CH_3OH} \cdot 99,5\%$$

$$\dot{n}_{15,H_2O} = \dot{n}_{14,H_2O} \cdot (100 - 98)\%$$

$$\dot{n}_{15,CH_3OH} = \dot{n}_{14,CH_3OH} \cdot (100 - 99,5)\%$$

3.5 COLUNA DE DESTILAÇÃO (DE-1)

FIGURA 9 – FLUXOGRAMA DA COLUNA DE DESTILAÇÃO



FONTE: Os autores (2023).

Na coluna de destilação, há duas entradas e duas saídas, sendo elas as correntes 16 e 21 e 17 e 24, respectivamente, como ilustrado na figura acima. A corrente 21 é o refluxo do tanque de separação, que será visto posteriormente, e sabe-se que possui a mesma composição e vazão molar da corrente 22. Todo o H_2 , o CO e o N_2 saem pelo topo da coluna, a fração de água no fundo, ou seja, na corrente 24, é 0,94, e a pureza do metanol na corrente 22 é conhecida. Portanto, tem-se que:

$$\dot{n}_{21,CH_3OH} = \dot{n}_{22,CH_3OH} = \dot{n}_{23,CH_3OH}$$

$$\dot{X}_{21,CH_3OH} = 0,999$$

$$\dot{X}_{21,H_2O} = 0,001$$

$$\dot{X}_{24,CH_3OH} = \dot{X}_{25,CH_3OH} = 0,06$$

$$\dot{X}_{24,H_2O} = \dot{X}_{25,H_2O} = 0,94$$

$$\dot{n}_{21,H_2} = \dot{n}_{24,H_2} = 0$$

$$\dot{n}_{21,N_2} = \dot{n}_{24,N_2} = 0$$

$$\dot{n}_{21,CO} = \dot{n}_{24,CO} = 0$$

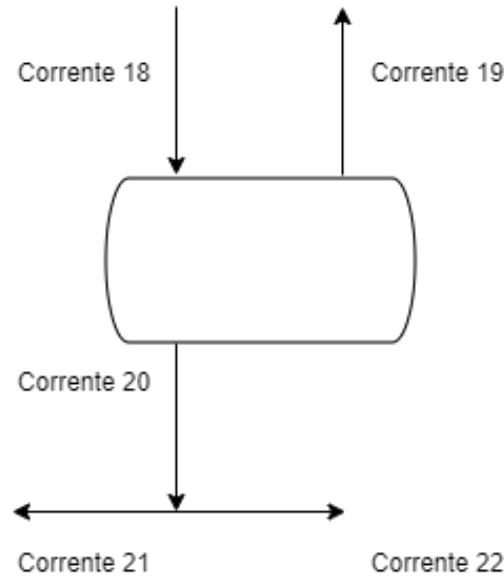
$$\dot{n}_{17,H_2} = \dot{n}_{16,H_2}$$

$$\dot{n}_{17,N_2} = \dot{n}_{16,N_2}$$

$$\dot{n}_{17,CO} = \dot{n}_{16,CO}$$

3.6 TANQUE DE SEPARAÇÃO (TS)

FIGURA 10 – FLUXOGRAMA DO TANQUE DE SEPARAÇÃO



FONTE: Os autores (2023).

No tanque de separação, há apenas uma entrada, sendo ela a corrente 18, que é igual à corrente 17, e duas saídas, que são a corrente 19 e a corrente 20. A corrente 20 se divide entre a corrente de refluxo (corrente 21) e a corrente 22. Na corrente 19 saem todos os gases do processo, enquanto na corrente 20 saem toda a água e o metanol presentes no tanque de separação. Sabe-se que a produção de metanol deve ser de 10000 kg/h, o que, convertendo para kmols utilizando a massa molar do metanol (32,04 kg/kmol), gera uma vazão de 312,1098627 kmols/h. Além disso, a vazão molar de H_2 , CO e N_2 na corrente 19 é igual à vazão dessas na corrente 18. Ou seja:

$$\begin{aligned} \dot{X}_{20,CH_3OH} &= \dot{X}_{21,CH_3OH} = \dot{X}_{22,CH_3OH} = \dot{X}_{23,CH_3OH} = 0,999 \\ \dot{X}_{20,H_2O} &= \dot{X}_{21,H_2O} = \dot{X}_{22,H_2O} = \dot{X}_{23,H_2O} = 0,001 \\ \dot{n}_{21,CH_3OH} &= \dot{n}_{22,CH_3OH} = \dot{n}_{23,CH_3OH} = \frac{10000\text{kg/h}}{32,04\text{kg/kmol}} = 312,1098627\text{kmols/h} \\ \dot{n}_{19,H_2} &= \dot{n}_{17,H_2} = \dot{n}_{18,H_2} \\ \dot{n}_{19,N_2} &= \dot{n}_{17,N_2} = \dot{n}_{18,N_2} \\ \dot{n}_{19,CO} &= \dot{n}_{17,CO} = \dot{n}_{18,CO} \end{aligned}$$

Para resolver essa parte do balanço, é necessário fazer um sistema de equações, dado da seguinte maneira:

$$\dot{X}_{22,CH_3OH} = 0,999$$

$$\dot{X}_{22,H_2O} = 0,001$$

$$\dot{X}_{24,CH_3OH} = 0,06 kmols/h$$

$$\dot{X}_{24,H_2O} = 0,94$$

$$\dot{n}_{22,CH_3OH} = 312,1098627 kmols/h$$

$$\dot{n}_{22,H_2O} + \dot{n}_{24,H_2O} = \dot{n}_{16,H_2O}$$

4 BALANÇO DE MASSA - RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 CÁLCULO DAS CORRENTES E RESULTADOS

Com todas as informações obtidas pelos equipamentos, como descrito acima, é possível calcular a vazão molar das correntes em kmols/h. Na planta há duas restrições, sendo elas:

$$\frac{\dot{n}_{5,H_2} - 2 \cdot \dot{n}_{5,CO}}{2 \cdot \dot{n}_{5,CO}} = 13$$

$$\dot{n}_{23,CH_3OH} = 312,1098627 \text{ kmols/h}$$

E há três variáveis, que são o reciclo (pode variar de até 100%, mas não pode ser zero), a vazão total de entrada na corrente 1, que preferencialmente deve ser a vazão mínima para atender as condições requeridas, e a fração de *CO* na corrente 1. Utilizando métodos iterativos, é possível chegar nos seguintes valores para as variáveis:

$$\dot{n}_{11} = \dot{n}_{12} = 0,963269035481 \cdot \dot{n}_9 \text{ kmols/h}$$

$$\dot{n}_{10} = (1 - 0,963269035481) \cdot \dot{n}_9 \text{ kmols/h}$$

$$\dot{n}_1 = 1503,9230776098 \text{ kmols/h}$$

$$\dot{X}_{1,CO} = 0,176651646416588$$

$$\dot{X}_{1,H_2} = 1 - 0,04 - 0,01 - 0,176651646416588$$

A partir desses resultados, obtém-se as seguintes tabelas:

TABELA 1 – VAZÕES E FRAÇÕES DAS CORRENTES 1 E 2

kmol/h		\dot{X}		kg/h		$\dot{\omega}$	
<i>CH₃OH</i>	0	<i>CH₃OH</i>	0	<i>CH₃OH</i>	0	<i>CH₃OH</i>	0
<i>H₂O</i>	0	<i>H₂O</i>	0	<i>H₂O</i>	0	<i>H₂O</i>	0
<i>CO</i>	265,6705	<i>CO</i>	0,176652	<i>CO</i>	7441,43	<i>CO</i>	0,578669
<i>CO₂</i>	60,15692	<i>CO₂</i>	0,04	<i>CO₂</i>	2647,506	<i>CO₂</i>	0,205878
<i>H₂</i>	1163,056	<i>H₂</i>	0,773348	<i>H₂</i>	2349,374	<i>H₂</i>	0,182695
<i>N₂</i>	15,03923	<i>N₂</i>	0,01	<i>N₂</i>	421,2489	<i>N₂</i>	0,032758
TOTAL	1503,923	TOTAL	1	TOTAL	12859,56	TOTAL	1

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 2 – VAZÕES E FRAÇÕES DAS CORRENTES 3, 4 E 5

kmol/h		\dot{X}		kg/h		$\dot{\omega}$	
CH_3OH	6,240302	CH_3OH	0,000434	CH_3OH	199,9393	CH_3OH	0,003644
H_2O	2,410781	H_2O	0,000168	H_2O	43,44228	H_2O	0,000792
CO	479,0986	CO	0,033337	CO	13419,55	CO	0,244612
CO_2	60,15692	CO_2	0,004186	CO_2	2647,506	CO_2	0,048259
H_2	13414,76	H_2	0,933426	H_2	27097,81	H_2	0,493939
N_2	408,868	N_2	0,02845	N_2	11452,39	N_2	0,208754
TOTAL	14371,53	TOTAL	1	TOTAL	54860,65	TOTAL	1

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 3 – VAZÕES E FRAÇÕES DAS CORRENTES 6, 7 E 8

kmol/h		\dot{X}	kg/h		$\dot{\omega}$		
CH_3OH	323,9127	CH_3OH	0,023581	CH_3OH	10378,16	CH_3OH	0,189184
H_2O	62,5677	H_2O	0,004555	H_2O	1127,47	H_2O	0,020553
CO	221,5831	CO	0,016131	CO	6206,543	CO	0,113139
CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0
H_2	12719,26	H_2	0,925967	H_2	25692,9	H_2	0,468357
N_2	408,868	N_2	0,029766	N_2	11452,39	N_2	0,208766
TOTAL	13736,19	TOTAL	1	TOTAL	54857,47	TOTAL	1

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 4 – VAZÕES E FRAÇÕES DA CORRENTE 9

kmol/h		\dot{X}	kg/h		$\dot{\omega}$		
CH_3OH	6,478255	CH_3OH	0,000485	CH_3OH	207,5633	CH_3OH	0,00476
H_2O	2,502708	H_2O	0,000187	H_2O	45,0988	H_2O	0,001034
CO	221,5665	CO	0,016586	CO	6206,077	CO	0,142333
CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0
H_2	12718,88	H_2	0,952135	H_2	25692,14	H_2	0,589233
N_2	408,8461	N_2	0,030606	N_2	11451,78	N_2	0,262639
TOTAL	13358,27	TOTAL	1	TOTAL	43602,66	TOTAL	1

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 5 – VAZÕES E FRAÇÕES DA CORRENTE 10

kmol/h		\dot{X}	kg/h		$\dot{\omega}$		
CH_3OH	0,237953	CH_3OH	0,000485	CH_3OH	7,623999	CH_3OH	0,00476
H_2O	0,091927	H_2O	0,000187	H_2O	1,656522	H_2O	0,001034
CO	8,138351	CO	0,016586	CO	227,9552	CO	0,142333
CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0
H_2	467,1767	H_2	0,952135	H_2	943,697	H_2	0,589233
N_2	15,01731	N_2	0,030606	N_2	420,6349	N_2	0,262639
TOTAL	490,6623	TOTAL	1	TOTAL	1601,568	TOTAL	1

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 6 – VAZÕES E FRAÇÕES DAS CORRENTES 11 E 12

kmol/h		\dot{X}	kg/h		$\dot{\omega}$		
CH_3OH	6,240302	CH_3OH	0,000485	CH_3OH	199,9393	CH_3OH	0,00476
H_2O	2,410781	H_2O	0,000187	H_2O	43,44228	H_2O	0,001034
CO	213,4281	CO	0,016586	CO	5978,122	CO	0,142333
CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0
H_2	12251,7	H_2	0,952135	H_2	24748,44	H_2	0,589233
N_2	393,8288	N_2	0,030606	N_2	11031,14	N_2	0,262639
TOTAL	12867,61	TOTAL	1	TOTAL	42001,09	TOTAL	1

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 7 – VAZÕES E FRAÇÕES DAS CORRENTES 13 E 14

kmol/h		\dot{X}	kg/h		$\dot{\omega}$		
CH_3OH	317,4345	CH_3OH	0,839961	CH_3OH	10170,6	CH_3OH	0,903667
H_2O	60,065	H_2O	0,158937	H_2O	1082,371	H_2O	0,09617
CO	0,016628	CO	0,000044	CO	0,465759	CO	4,14E-05
CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0
H_2	0,377916	H_2	0,001	H_2	0,76339	H_2	6,78E-05
N_2	0,021919	N_2	0,000058	N_2	0,613955	N_2	5,46E-05
TOTAL	377,9159	TOTAL	1	TOTAL	11254,82	TOTAL	1

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 8 – VAZÕES E FRAÇÕES DA CORRENTE 15

kmol/h		\dot{X}		kg/h		$\dot{\omega}$	
CH_3OH	1,587172	CH_3OH	0,564086	CH_3OH	50,853	CH_3OH	0,700005
H_2O	1,2013	H_2O	0,426946	H_2O	21,64742	H_2O	0,297983
CO	0,001624	CO	0,000577	CO	0,045494	CO	0,000626
CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0
H_2	0,021569	H_2	0,007666	H_2	0,043569	H_2	0,0006
N_2	0,002039	N_2	0,000725	N_2	0,057104	N_2	0,000786
TOTAL	2,813704	TOTAL	1	TOTAL	72,6466	TOTAL	1

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 9 – VAZÕES E FRAÇÕES DA CORRENTE 16

kmol/h		\dot{X}		kg/h		$\dot{\omega}$	
CH_3OH	315,8473	CH_3OH	0,84203	CH_3OH	10119,75	CH_3OH	0,90499
H_2O	58,8637	H_2O	0,156927	H_2O	1060,724	H_2O	0,094859
CO	0,015004	CO	0,00004	CO	0,420265	CO	3,76E-05
CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0
H_2	0,356347	H_2	0,00095	H_2	0,719821	H_2	6,44E-05
N_2	0,01988	N_2	0,000053	N_2	0,556851	N_2	4,98E-05
TOTAL	375,1022	TOTAL	1	TOTAL	11182,17	TOTAL	1

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 10 – VAZÕES E FRAÇÕES DAS CORRENTES 17 E 18

kmol/h		\dot{X}	kg/h		$\dot{\omega}$		
CH_3OH	624,22	CH_3OH	0,998375	CH_3OH	20000,01	CH_3OH	0,999353
H_2O	0,624845	H_2O	0,000999	H_2O	11,2597	H_2O	0,000563
CO	0,015004	CO	2,4E-05	CO	0,420265	CO	2,1E-05
CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0
H_2	0,356347	H_2	0,00057	H_2	0,719821	H_2	3,6E-05
N_2	0,01988	N_2	3,18E-05	N_2	0,556851	N_2	2,78E-05
TOTAL	625,2361	TOTAL	1	TOTAL	20012,96	TOTAL	1

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 11 – VAZÕES E FRAÇÕES DA CORRENTE 19

kmol/h		\dot{X}		kg/h		$\dot{\omega}$	
CH_3OH	0	CH_3OH	0	CH_3OH	0	CH_3OH	0
H_2O	0	H_2O	0	H_2O	0	H_2O	0
CO	0,015004	CO	0,038351	CO	0,420265	CO	0,247661
CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0
H_2	0,356347	H_2	0,910834	H_2	0,719821	H_2	0,424189
N_2	0,01988	N_2	0,050815	N_2	0,556851	N_2	0,328151
TOTAL	0,391232	TOTAL	1	TOTAL	1,696936	TOTAL	1

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 12 – VAZÕES E FRAÇÕES DA CORRENTE 20

kmol/h		\dot{X}		kg/h		$\dot{\omega}$	
CH_3OH	624,22	CH_3OH	0,999	CH_3OH	20000,01	CH_3OH	0,999437
H_2O	0,624845	H_2O	0,001	H_2O	11,2597	H_2O	0,000563
CO	0	CO	0	CO	0	CO	0
CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0
H_2	0	H_2	0	H_2	0	H_2	0
N_2	0	N_2	0	N_2	0	N_2	0
TOTAL	624,8448	TOTAL	1	TOTAL	20011,27	TOTAL	1

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 13 – VAZÕES E FRAÇÕES DA CORRENTE 21

kmol/h		\dot{X}	kg/h		$\dot{\omega}$		
CH_3OH	312,11	CH_3OH	0,999	CH_3OH	10000	CH_3OH	0,999437
H_2O	0,312422	H_2O	0,001	H_2O	5,629852	H_2O	0,000563
CO	0	CO	0	CO	0	CO	0
CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0
H_2	0	H_2	0	H_2	0	H_2	0
N_2	0	N_2	0	N_2	0	N_2	0
TOTAL	312,4224	TOTAL	1	TOTAL	10005.63	TOTAL	1

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 14 – VAZÕES E FRAÇÕES DAS CORRENTES 22 E 23

kmol/h		\dot{X}	kg/h		$\dot{\omega}$		
CH_3OH	312,11	CH_3OH	0,999	CH_3OH	10000	CH_3OH	0,999437
H_2O	0,312422	H_2O	0,001	H_2O	5,629852	H_2O	0,000563
CO	0	CO	0	CO	0	CO	0
CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0
H_2	0	H_2	0	H_2	0	H_2	0
N_2	0	N_2	0	N_2	0	N_2	0
TOTAL	312,4224	TOTAL	1	TOTAL	10005,63	TOTAL	1

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 15 – VAZÕES E FRAÇÕES DAS CORRENTES 24 E 25

kmol/h		\dot{X}		kg/h		$\dot{\omega}$	
CH_3OH	3,737315	CH_3OH	0,06	CH_3OH	119,7436	CH_3OH	0,101924
H_2O	58,55127	H_2O	0,94	H_2O	1055,094	H_2O	0,898076
CO	0	CO	0	CO	0	CO	0
CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0	CO_2	0
H_2	0	H_2	0	H_2	0	H_2	0
N_2	0	N_2	0	N_2	0	N_2	0
TOTAL	62,28859	TOTAL	1	TOTAL	1174,838	TOTAL	1

FONTE: Os autores(2023)

4.2 DISCUSSÃO

Percebe-se, pelas tabelas acima, que a vazão mássica da corrente 5 difere da vazão mássica da corrente 6, o que em teoria representaria um acúmulo. Porém, como o balanço molar está correto e não aponta algum acúmulo, isso significa que essa diferença de massa ocorreu por arredondamentos nas massas molares dos componentes. Como foi pequena a diferença, pode-se dizer que o balanço está correto, uma vez que em termos de mols está de acordo com o esperado.

Além disso, é possível perceber que entra na corrente 1 menos massa do que a que sai da planta. Isso ocorre por conta do reciclo, que por ser muito eficiente, torna a necessidade de suprir reagentes muito menor, visto que a maior parte deles volta para participar novamente da reação.

Pelos cálculos, observa-se uma grande produção de água, proveniente da reação com o CO_2 . Como a água é um subproduto da reação, pode-se evitar esse produto, pois pode causar a impureza do metanol, como visto nas correntes 22 e 23. Deve-se, portanto, encontrar meios de aumentar a seletividade da reação com o CO , diminuir a presença de CO_2 na corrente de entrada do reator ou utilizar outros métodos de separação ao final do processo para garantir a pureza do produto de interesse.

5 CÁLCULO DE ENTALPIAS

Utilizando a equação (7.4-15) de balanço de energia para regimes permanentes do Elementary Principles of Chemical Processes (R. M. FELDER R. W. ROUSSEAU, 2016) modificada removendo os termos cinéticos e potenciais (desprezíveis nos casos tratados), que será a base de cálculos do balanço de energia:

$$\Delta \dot{H} = \dot{Q} + \dot{W}_s$$

tal que:

$$\Delta \dot{H} = \sum_{out} \dot{n}_i \cdot \underline{H}_j - \sum_{in} \dot{n}_i \cdot \underline{H}_j$$

Para a entalpia de gás ideal foi utilizado a seguinte equação de capacidade calorífica a pressão constante:

$$\frac{C_P^{ig}}{R} = A + BT + CT^2 - DT^{-2}$$

Junto com os valores de A, B, C e D do Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics (J. M. SMITH, 2022). Para líquidos foi utilizado a equação de Rowlison-Bondi:

$$C_P^L = R[1,45 + \frac{0,45}{1 - T_r} + 0,25\omega(17,11 + \frac{25,2(1 + T_r)^{(\frac{1}{3})}}{T_r} + \frac{1,742}{1 - T_r})] + C_P^{ig}$$

E para correção de hipótese de gás ideal, utilizou-se a equação de residual com Peng-Robinson:

$$\frac{H^{res}}{RT} = (Z - 1) - \frac{a - T \frac{da}{dT}}{2\sqrt{2}bRT} \ln\left(\frac{1 + (1 + \sqrt{2})}{1 + (1 - \sqrt{2})}\right)$$

A entalpia molar de vaporização foi calculada com a equação de Riedel(J. M. SMITH, 2022):

$$\frac{\Delta H_n}{RT_n} = \frac{1.092(\ln P_c - 1.013)}{0.930 - T_{rn}}$$

Onde n é a temperatura de ebulição (T_b) em condições normais de temperatura e pressão. E para fins de localizar o estado da substancia foi utilizada a equação de Antoine, presente no site do NIST Chemistry WebBook (NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY, 2022):

$$P_v = 10^{(AntA - \frac{AntB}{T + AntC})}$$

Por se tratar de diversos cálculos padronizados, optou-se por criar um programa no qual um algoritmo resolvesse a entalpia molar de uma especie com base na temperatura e pressão, com os demais parâmetros inseridos anteriormente. O algoritmo funciona da seguinte forma:

1. Com base na pressão e temperatura inseridos, comparar com a pressão crítica e temperatura crítica do composto, retornando se é líquido, gás ou vapor(atua como gás para simplificação). Para simplificação também eliminou-se N_2 , H_2 , CO_2 e CO desse passo, já que nas temperaturas e pressões da planta eles se encontram como gases.
2. É feito o primeiro passo para temperatura padrão, e em seguida para temperatura final. Tem-se então o caminho que o composto pode seguir: Gás \rightarrow Gás, Gás \rightarrow Líquido, Líquido \rightarrow Líquido e Líquido \rightarrow Gás.
3. Gás \rightarrow Gás, segue o seguinte padrão.

$$\underline{H}_{Composto} = \underline{H}_{Composto}(T_{ref}) \int_{T_{ref}}^{T_{final}} \underline{Cp}^{V,ig} dT + \underline{H}_{Composto}^{res}$$

$\underline{H}_{Elemento}(T_{ref})$ É padronizado como igual a 0, assim o termo será omitido para as próximas equações. A temperatura de referência a ser utilizada é 25°C, e a pressão de 1 Bar.

4. Gás \rightarrow Líquido:

$$\underline{H}_{Composto} = \int_{T_{ref}}^{T_{Vap}} \underline{Cp}^{V,ig} dT + \underline{H}_{Composto}^{res} - \Delta \underline{H}_{Composto}^{Vap} + \int_{T_{Vap}}^{T_{final}} \underline{Cp}^{V,L} dT$$

Nota-se que a entalpia de vaporização é negativa, já que se trata do processo inverso a condensação.

5. Líquido \rightarrow Líquido:

$$\underline{H}_{Composto} = \int_{T_{ref}}^{T_{final}} \underline{Cp}^{V,L} dT$$

6. Líquido \rightarrow Gás:

$$\underline{H}_{Composto} = \int_{T_{ref}}^{T_{Vap}} \underline{Cp}^{V,L} dT + \Delta \underline{H}_{Composto}^{Vap} + \int_{T_{Vap}}^{T_{final}} \underline{Cp}^{V,ig} dT + \underline{H}_{Composto}^{res}$$

A temperatura de vaporização é estimada com a equação de Antoine, rearranjada para temperatura.

$$T_{Vap} = \frac{AntB}{(AntA - \log_{10} P)} - AntC$$

Para constante dos gases ideais foi utilizado o valor de $R = 8.314462618$ J/(K·mol)

TABELA 16 – TABELA DE DADOS TERMODINÂMICOS GERAIS

Composto	H_2	CO	CO_2	N_2	H_2O	CH_3OH
ω	-0.217	0.045	0.225	0.037	0.344	0.565
Pc (Bar)	12.93	34.94	73.74	33.98	220.64	80.97
Tb(K)	20.27	81.66	194.69	77.35	373.15	337.69
Tc(K)	32.98,	132.85	304.12	126.20	647.14	512.64
A	3.249	3.376	5.457	3.280	3.470	2.211,
B	0.422e-3	0.557e-3	1.045e-3	0.593e-3	1.450e-3	12.216e-3
C	0	0	0	0,	0,	-3.450e-6
D	0.083e5	-0.031e5	-1.157e5	0.040e5	0.121e5	0
ΔH_f (J/mol)	0	-110.525	-393.509	0	-285.830	-200.600

FONTE: Os autores(2023)

NOTA: Pc, Tb, Tc retirados do B. E. Poling, J. M. Prausnitz, J. P. O'Connell (2000) e constantes A, B, C e D do J. M. Smith (2022)

LEGENDA: Dados termodinâmicos gerais

TABELA 17 – TABELA DE DADOS DE ANTOINE

Composto	H_2O
Antoine A, B, C. Tmin e Tmax	3.55959, 643.748, -198.043, 373, 573
Antoine A, B, C. Tmin e Tmax	4.6543, 1435.264, -64.848, 255.9, 373
Antoine A, B, C. Tmin e Tmax	-

FONTE: Os autores(2023)

NOTA: Dados retirados do National Institute of Standards and Technology (2022), Tmin e Tmax indicam a temperatura de operação

LEGENDA: Antoine

TABELA 18 – TABELA DE DADOS DE ANTOINE CONTINUAÇÃO

Composto	CH_3OH
Antoine A, B, C. Tmin e Tmax	5.15853, 1569.613, -34.846, 353.5, 512.63
Antoine A, B, C. Tmin e Tmax	5.20409, 1581.341, -33.50, 288.1, 356.83
Antoine A, B, C. Tmin e Tmax	5.31301, 1676.569, -21.728, 353, 483

FONTE: Os autores(2023)

NOTA: As faixas de temperatura foram esticadas para preencher lacunas eventuais, caso uma corrente não estiver na faixa é utilizado a mais próxima possível

LEGENDA: Antoine

5.1 TROCADOR DE CALOR 1

Os cálculos foram iniciados no trocador de calor 1, para tanto necessita-se a temperatura da corrente 3, realizando o balanço de energia:

$$\sum_{out} \dot{n}_i \cdot \underline{H}_j - \sum_{in} \dot{n}_i \cdot \underline{H}_j = \dot{Q} + \dot{W}_s$$

Não há trabalho de eixo e nem troca de calor no sistema englobando a junção, assim:

$$\sum_{out} \dot{n}_i \cdot \underline{H}_j = \sum_{in} \dot{n}_i \cdot \underline{H}_j$$

São duas correntes de entrada, uma de saída, na corrente 12 e 3 existem 6 elementos com as entalpias a serem analisadas, e 4 na corrente 2. Soma-se a entalpia da corrente 12 e 3 e então para corrente 3 são feitas passadas variando a temperatura entre a corrente 2 e 12, a temperatura que gera a entalpia mais próxima, é a desejada.

$$H_2 + H_{12} = H_3$$

Obeve-se 37 °C para uma faixa de aproximação de 10^4 kJ.

Com a temperatura 3, separou-se em dois sistemas para facilitar a análise do TC-1. Analisando a parte interna do trocador tem-se que nos tubos:

$$\dot{n}_4(\underline{H}_4 - \underline{H}_3) = \dot{Q}_{tubos}$$

Já que não há trabalho de eixo e não há diferença na vazão ($\dot{n}_4 = \dot{n}_3$), \dot{Q} corresponde ao calor que corrente externa cede, supondo um sistema sem perdas. E na parte externa, o casco:

$$\dot{n}_7(\underline{H}_7 - \underline{H}_6) = \dot{Q}_{casco}$$

Demais condições do sistema:

$$\dot{Q}_{tubos} = -\dot{Q}_{casco}$$

$$T_7 < T_4$$

A resolução é similar ao problema da temperatura 3, porém há um elemento peculiar, foi necessário iterar da temperatura da corrente 3 até a temperatura da corrente 6, para então encontrar uma resposta inadequada termodinamicamente, a temperatura fica abaixo da temperatura da corrente 4. É necessário reduzir a temperatura da corrente 4, portanto se iniciou um processo iterativo alterando a temperatura da corrente 4 com base no estimado da corrente 7.

$$T_4 = T_7 - 20^\circ\text{C}$$

A razão do valor decrescido é a natureza de um trocador de calor. Ao fim da iteração foi encontrado uma convergência para 135,58 °C, a troca de calor é de $|Q_{TC-1}| = 32932638.92$ kJ/h.

5.2 FORNO

Modelou-se o forno como uma simples troca de calor com o meio, as condições iniciais e finais são conhecidas para a corrente, restando apenas \dot{Q}_{F-1} desconhecido:

$$\dot{n}_5(\underline{H}_5 - \underline{H}_4) = \dot{Q}_{F-1}$$

A temperatura da corrente 4 foi alterada com a iteração, assim a temperatura utilizada no cálculo de entalpia foi de 115,57 °C, no restante da planta utilizou-se os valores fornecidos, como na corrente 5.

Assim calcula-se a entalpia molar de cada composto nas condições de suas respectivas correntes via 1 somasse, obtendo \underline{H}_4 e \underline{H}_5 , subtraíssem as duas e multiplica-se pela vazão molar total da corrente 4 ou 5:

$$\dot{Q}_{F-1} = 52495948,9 \frac{kJ}{h}$$

5.3 REATOR

O sistema que foi analisado compreende o reator e as correntes 5 e 6, o balanço de energia é o seguinte:

$$\Delta \dot{H} = \dot{Q}_{R-1}$$

Onde \dot{Q}_{R-1} representa o calor liberado pela reação que deverá ser resfriado. Não há trabalho de eixo e o $\Delta \dot{H}$ se expande em:

$$\Delta \dot{H} = \xi_1 \sum \Delta H_{R1,298K}^o + \xi_2 \sum \Delta H_{R2,298K}^o + \sum_6 \dot{n}_i \cdot \underline{H}_j - \sum_5 \dot{n}_i \cdot \underline{H}_j$$

Utiliza-se a variação em modulo de CO como grau de avanço da reação 1 e variação de CO_2 para reação 2. Não é necessário incluir o aquecimento envolvido exclusivamente na reação, como é indicado no J. M. Smith (2022), já que as entalpias das correntes incluem este fenômeno. Calcula-se as entalpias molares de cada componente, via 1, e multiplica-se por suas respectivas vazões molares, obtendo as entalpias de formação via lei de Hess (R. M. FELDER R. W. ROUSSEAU, 2016).

$$\Delta H_r^o = \sum \nu_i \Delta H_{f,i}^o$$

Onde ν_i é o coeficiente estequiométrico de um reagente (utiliza-se sinal negativo) ou produto (sinal positivo). Com isso é possível encontrar o \dot{Q}_{R-1} .

5.4 TROCADOR DE CALOR 2

Tem o mesmo formato da equação para o F-1, com a diferença que se trata de um resfriamento:

$$\begin{aligned} \dot{n}_5(\underline{H}_8 - \underline{H}_7) &= \dot{Q}_{TC-2} \\ \dot{Q}_{TC-2} &= -57481236.41 \frac{kJ}{h} \end{aligned}$$

Também tem o mesmo procedimento de 5.2, calculasse as entalpias molares via 1, multiplicasse pela vazão molar da corrente relativo a cada composto e subtraísse a corrente *upstream* da *downstream*.

5.5 DESTILADORA

O balanço geral de energia da destiladora é:

$$\sum_{17} n_i \underline{H}_i + \sum_{24} n_i \underline{H}_i - \sum_{16} n_i \underline{H}_i - \sum_{21} n_i \underline{H}_i = \dot{Q}_{TC-5} + \dot{Q}_{TC-4}$$

E separou-se também o trocador de calor 4:

$$\sum_{18} n_i \underline{H}_i - \sum_{17} n_i \underline{H}_i = \dot{Q}_{TC-4}$$

Como não foram fornecidas as temperaturas e pressões das correntes 17, 21 e 18, logo foi utilizada a aproximação que a pressão nas correntes de topo 17, 18, 20 e 21 seguem a pressão da corrente 19, de 2,8 Bar, para temperatura aproxima-se a temperatura da corrente 17 como sendo a mesma da corrente de fundo 24, e que a corrente 18, 20 e 21 tem a temperatura de condensação do metanol na pressão que se encontram. Com isso é possível calcular a carga térmica total no sistema e, assim, se obtém $\dot{Q}_{TC-5} + \dot{Q}_{TC-4}$, com o balanço no TC-4 descobre-se por fim o valor de \dot{Q}_{TC-4} e, por consequência, o de \dot{Q}_{TC-5} .

6 BALANÇO DE ENERGIA - CÁLCULO DAS CARGAS TÉRMICAS E DAS VAZÕES DAS UTILIDADES

6.1 FORNO

Utilizou-se vapor para o aquecimento, para tanto seguiu-se o guia da Swagelok Energy Advisors, Inc. (2009) e as tabelas de vapor do J. M. Smith (2022). O procedimento para seleção de pressão aconselhado, para equipamento de altas temperaturas como F-1, é achar a pressão correspondente a temperatura da corrente e acrescentar $45psi$.

$$T_{C5} = 240^{\circ}C \rightarrow P_{steam} = 3347.8kPa \rightarrow P_{steam} = 3347.8kPa + 45psi = 3658kPa$$

As pressões mais próximas são $3589.8kPa$ e $3715.7kPa$, e interpolando linearmente para descobrir a entalpia de vaporização(responsável pela troca de calor), o resultado foi $1739.58kJ/kg$. Então com o valor de Q_{F-1} :

$$\dot{M}_{steam} = \frac{\dot{Q}_{F-1}}{H_{vap}^{steam}} = \frac{52495948.86kJ/h}{1739.58kJ/kg} = 30177.32kg/h$$

6.2 REATOR

Do balanço de energia do capítulo anterior, se obtém:

$$\dot{Q}_{R-1} = 34800128.985 \frac{kJ}{h}$$

Com água de resfriamento na faixa designada, entrando a $25^{\circ}C$ saindo a $40^{\circ}C$, calcula-se a entalpia molar da água na pressão de 1 bar (não houve mudanças significativas que justificassem aumento) e $40^{\circ}C$ (usando o método de calculo a entalpia de $25^{\circ}C$ é 0, portanto equivalendo a entalpia de um processo de absorção de calor a pressão constante, de $25^{\circ}C$ até $40^{\circ}C$). A entalpia molar da corrente de água de resfriamento foi de $1472.9J/mol$, o calor no reator é de $\dot{Q}_{RE-1} = 34800129J/h$, portanto dividindo a vazão de resfriamento terá que ser: $23626.94kmol/h$, ou $425284.9kg/h$, que para água com densidade média de $1000kg/m^3$ é equivalente a $0,118m^3/s$

6.3 TROCADOR DE CALOR 2

Para este trocador decidiu-se utilizar amônia(dados na 19), dado que a água de resfriamento se encontra muito próxima da temperatura de solidificação para a pressão da corrente de água de resfriamento e temperatura desejada na corrente do trocador. A amônia é um refrigerante muito utilizado industrialmente, e com uma boa capacidade de absorção de calor por

TABELA 19 – TABELA DE DADOS TERMODINÂMICOS DA AMÔNIA

	NH_4
Pc (Bar)	113.53
Tb (K)	239.82
Tc (K)	405.40
Ant A,B , C, Tmin, Tmax	4.86886, 1113.928, -10.409, 239.6, 371.5

FONTE: Os autores(2023)

NOTA: Pc, Tb, Tc retirados do B. E. Poling, J. M. Prausnitz, J. P. O'Connell (2000) e constantes de Antoine A, B, C e temperaturas limite National Institute of Standards and Technology (2022)

LEGENDA: Dados termodinâmicos NH_4

volume(ARANER, 2023), sendo atrativa para utilização com uma pequena seção de refrigeração, e possui ponto de ebulição próximo da temperatura da corrente. Com Antoine calcula-se a pressão de vaporização da amônia para utilização na corrente, $4,9Bar$, ou aproximando $5Bar$ e utilizando a entalpia de vaporização, $23927.62J/mol$, para o $\dot{Q}_{TC-2} = -57481236.4kJ/h$, resulta em $2402.3kmol/h$ ou $40839kg/h$ (com a massa molar de $17g/mol$) de vazão de refrigerante a pressão de $5Bar$ e temperatura de $4^{\circ}C$.

6.4 TROCADOR DE CALOR 4

Do balanço do capítulo anterior obteve-se $Q_{TC-4} = -940066.55kJ/h$, sendo que o valor negativo implica que ele remove calor do sistema, assim utiliza-se a água de resfriamento tal qual no reator, resultando em uma vazão de água de $638.24kmol/h$ ou $11488.35kg/h$.

6.5 TROCADOR DE CALOR 5

E no TC-5 o valor encontrado foi de $Q_{TC-5} = 197612548.5kJ/h$, foi utilizado vapor saturado na mesma pressão e condição do forno, como forma de aproveitamento, e a entalpia do vapor é a mesma, então a vazão requerida será $113597.65kg/h$ de vapor.

7 RESULTADOS E DISCUSSÃO - CARGAS TÉRMICAS E VAZÕES DE UTILIDADES

Para resolução dos problemas propostos foi utilizado a linguagem de programação Python por meio de Jupyter notebook, facilitando processos repetitivos, tais quais cálculos de entalpia molar. Foram feitas concessões na faixa de Antoine, na utilização de processos com aproximação para descobertas de temperatura, e na simplificação dos processos das vazões de utilidades, porém se encontram dentro da faixa de erro usual termodinâmico.

TABELA 20 – ENTALPIAS DA CORRENTE 2

Composto	H (J/mol)	H (kJ/h)
H_2	4061.17	4723371.95
CO	3974.16	1055817.86
CO_2	5091.63	306297.178
N_2	3960.47	59562.55

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 21 – ENTALPIAS DA CORRENTE 3

Composto	H (J/mol)	H (kJ/h)
CH_3OH	1564.83	9765.01
H_2O	1183.97	2854.30
CO	114.89	55045.11
CO_2	-465.72	-28016.47
H_2	411.39	5518631.59
N_2	141.57	57883.29

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 22 – ENTALPIAS DA CORRENTE 4

Composto	H (J/mol)	H (kJ/h)
CH_3OH	11841.74	73896.05
H_2O	8644.32	20839.56
CO	2522.40	1208480.73
CO_2	2952.14	177591.57
H_2	2686.22	36034976.96
N_2	2526.53	1033016.87

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 23 – ENTALPIAS DA CORRENTE 5

Composto	H (J/mol)	H (kJ/h)
CH_3OH	65981.79	411746.28
H_2O	20292.72	48921.32
CO	6346.81	3040747.94
CO_2	8702.79	523533.31
H_2	6294.88	84444238.14
N_2	6299.25	2575563.63

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 24 – ENTALPIAS DO REATOR

	Reação 1	Reação 2
$H_{298K}^o (J/mol)$	-90.075	-92.921
H (kJ / h)	-23195.71	-5589.84

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 25 – ENTALPIAS DA CORRENTE 6

Composto	H (J/mol)	H (kJ/h)
CH_3OH	68510.76	22191508.88
H_2O	64899.26	4060597.78
CO	7585.74	1680872.21
CO_2	10624.52	0.00
H_2	7458.48	94866280.10
N_2	7519.31	3074406.18

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 26 – ENTALPIAS DA CORRENTE 7

Composto	H (J/mol)	H (kJ/h)
CH_3OH	14554.42	4714362.30
H_2O	10501.13	657031.71
CO	3137.15	695138.74
CO_2	3862.98	0.00
H_2	3263.76	41512638.61
N_2	3133.58	1281222.53

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 27 – ENTALPIAS DA CORRENTE 8

Composto	H (J/mol)	H (kJ/h)
CH_3OH	-2744.20	-888881.52
H_2O	-2103.14	-131588.35
CO	-880.14	-195024.80
CO_2	-1742.62	-0.00
H_2	-554.85	-7057318.59
N_2	-851.20	-348029.26

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 28 – ENTALPIAS DA CORRENTE 12

Composto	H (J/mol)	H (kJ/h)
CH_3OH	-390.65	-2437.79
H_2O	-297.33	-716.81
CO	-346.41	-73934.17
CO_2	-1087.81	0
H_2	-25.90	-317307.30
N_2	-317.25	-124943.46

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 29 – ENTALPIAS DA CORRENTE 16

Composto	H (J/mol)	H (kJ/h)
CH_3OH	-520.95	-164541.68
H_2O	-396.66	-23349.02
CO	-230.89	-3.46
CO_2	-569.88	-0.00
H_2	-91.40	-32.57
N_2	-218.06	-4.34

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 30 – ENTALPIAS DA CORRENTE 17

Composto	H (J/mol)	H (kJ/h)
CH_3OH	48682.32	30388479.24
H_2O	9334.19	5832.42
CO	2878.43	43.19
CO_2	3904.51	0.00
H_2	2828.18	1007.81
N_2	2860.61	56.87

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 31 – ENTALPIAS DA CORRENTE 18

Composto	H (J/mol)	H (kJ/h)
CH_3OH	47179.48	29450372.11
H_2O	6707.71	4191.28
CO	2041.79	30.64
CO_2	2715.43	0.00
H_2	2016.48	718.57
N_2	2031.94	40.40

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 32 – ENTALPIAS DA CORRENTE 21

Composto	H (J/mol)	H (kJ/h)
CH_3OH	47179.48	14725186.05
H_2O	6707.71	2095.64
CO	2041.79	0.00
CO_2	2715.43	0.00
H_2	2016.48	0.00
N_2	2031.94	0.00

FONTE: Os autores(2023)

TABELA 33 – ENTALPIAS DA CORRENTE 24

Composto	H (J/mol)	H (kJ/h)
CH_3OH	-25516.91	-95364.75
H_2O	42335.66	2478806.80
CO	-5023.48	0
CO_2	-3848.46	0
H_2	-5194.00	0
N_2	-5171.61	0

FONTE: Os autores(2023)

Como os valores de entalpia se encontram numa faixa esperada de valor, e como os demais cálculos estão dentro do comportamento do fluido nas dadas condições, então conclui-se que o balanço de energia na planta está correto.

8 DIMENSIONAMENTO DE TUBULAÇÕES E ACESSÓRIOS

8.1 CÁLCULOS DE DIMENSIONAMENTO DAS TUBULAÇÕES E DA BOMBA

A temperatura máxima do tanque de separação possível para que não ocorra a cavitação é calculada através da equação de Antoine, onde a pressão é de 2,8 bar (METHYL ALCOHOL... , 2023):

$$\text{Log}(P^{sat}) = A - \frac{B}{T(K) + C}$$

$$\text{Log}(2,88\text{bar}) = 5,31301 - \frac{1676,569}{T(K) - 21,728}$$

Então temos a temperatura de 378K, que é a máxima possível para que não ocorra a cavitação, para ter uma margem de segurança, a operação ocorrerá à 373K(METHANOL COMPOUND... , 2023).

Para dimensionar a tubulação precisamos primeiramente da vazão. Assumindo uma corrente composta 100% pelo metanol a densidade é de 791 kg/m³ assim a vazão é calculada por:

$$Q = 0,003511729\text{m}^3/\text{s}$$

$$Q = 12,64\text{m}^3/\text{h}$$

Em sequência são identificados os acessórios da tubulação. Para a sucção:

- (a) 4 cotovelos compondo a harpa de dilatação, utilizada para evitar ruptura da tubulação devida à expansão térmica
- (b) 1 válvula tipo gaveta anterior à bomba, utilizada para manutenção e reparos na bomba
- (c) 1 redução na entrada da bomba, para se adequar às características
- (d) 1 curva de 90°
- (e) 1 saída de equipamento

TABELA 34 – K CARACTERÍSTICO DOS ACESSÓRIOS DA SUCÇÃO

ACESSÓRIOS	K
4 cotovelos	0,9
1 válvula	0,8
1 redução	2,49
1 curva	0,4
1 saída de equipamento	1

FONTE: (ASME B16. . . , 2023) e
(J. M. A. NETTO, 2023)

Para o recalque, há:

- (a) 8 cotovelos compondo duas harpas de dilatação, devido à longa extensão da tubulação
- (b) 1 entrada de equipamento, no final da tubulação para o tanque de armazenamento
- (c) 2 válvulas tipo gaveta, uma na saída da bomba para eventuais reparos e outra na saída para o tanque para o fluido não voltar para a tubulação em caso de parada
- (d) 3 curvas de 90°

TABELA 35 – K CARACTERÍSTICO DOS ACESSÓRIOS DO RECALQUE

ACESSÓRIOS	K
8 cotovelos	0,9
1 entrada de equipamento	0,5
2 válvulas	0,8
3 curvas	0,4

FONTE: (ASME B16. . . , 2023) e
(J. M. A. NETTO, 2023)

Para iniciar os cálculos, é necessário escolher uma bomba, a que melhor se encaixa nos termos de vazão é a HCO 110 PP-PVDF, da GemmeCotti (TECHNICAL DATA HCO SEAL MECHANICAL PUMPS . . . , 2023), com potência de 1,1 kW, devido ao seu head de 8 m e NPSHr de 3m. É necessário estipular um diâmetro inicial para os cálculos da velocidade, no caso, foi escolhido 20mm. Para o cálculo do fator de atrito, foi utilizada a equação de Colebrook:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2 \log \left(\frac{\varepsilon/D}{3,7} + \frac{2,51}{Re\sqrt{f}} \right)$$

Utilizando métodos iterativos para a determinação do termo, pode-se calcular a perda de carga em cada parte da tubulação e dos acessórios pela seguinte equação:

$$h_{L,total} = \sum K_{acessorios} \cdot \frac{v^2}{2 \cdot g} + \frac{L_{tubo}}{D} \cdot \frac{v^2}{2 \cdot g} \cdot f_D$$

Calcula-se também a energia da tubulação desde a entrada até a sucção da bomba, através das equações de NPSHr e Bernoulli:

$$\frac{P_s - P_a}{\rho g} + \frac{v_s^2 - v_a^2}{2g} + (y_s - y_a) + h_b + h_l = 0$$

$$h_{las} = \frac{P_s - P_a}{\rho g} + \frac{v_s^2}{2g} - (y_s - y_a)$$

$$NPSH_a = \frac{P_s - P^{sat}}{\rho g} + \frac{v^2}{2g}$$

$$h_{las} = NPSH_a + \frac{P_s - P_a}{\rho g} + (y_a - y_s)$$

$$h_{las} = NPSH_r + 1 + \frac{P_s - P_a}{\rho g} + (y_a - y_s)$$

$$E_s = \frac{P^{sat} - P_a}{\rho g} + NPSH_r + 1 + y_a - y_s$$

$$\frac{P_s}{\rho g} = NPSH_a + \frac{P^{sat}}{\rho g} - \frac{v^2}{2g}$$

Dessa forma, substituindo e usando um fator de segurança de 1m, temos que a perda de carga total da sucção deve ser menor que a Energia disponível na sucção, ou seja:

$$h_{ts} = h_{ls} + h_{AC_s} < E_s$$

Caso a perda de carga total seja menor que a energia da tubulação, precisamos aumentar a perda de carga, aumentando a velocidade da corrente, ou seja, diminuindo uma bitola no diâmetro nominal. Caso seja maior, precisamos diminuir a perda de carga, diminuindo a velocidade, ou seja, aumentando o diâmetro.

O diâmetro deve ser variado até a perda de carga seja ligeiramente menor que a energia total, que, no caso, é de 34,1mm.

Para o recalque o diâmetro inicial é menor que o de sucção, fazendo um balanço de energia entre os pontos de saídas da bomba e o tanque de armazenamento para assim obter a pressão na saída da bomba:

$$\frac{P_r - P_s}{\rho g} + \frac{v_r^2 - v_s^2}{2g} + (y_r - y_s) + h_b + h_{lt} = 0$$

Com os dados obtidos, é possível realizar um balanço de energia entre os pontos de saída da bomba até o tanque de armazenamento, para calcular a energia disponível no recalque:

$$E_r = \frac{P_r - P_b}{\rho g} + y_r - y_b$$

Assim, é calculado novamente o diâmetro através de uma função objetiva entre a perda de carga e a energia disponível utilizando o solver:

$$F_{obj} = (h_l - E_t)^2$$

Chegando no resultado de um diâmetro de 29,1mm.

Utilizando o solver mais uma vez, é calculado o fator de atrito até convergir e estabilizar os dois valores, definindo enfim o diâmetro pelo valor comercial mais próximo, de 38,10 mm para a sucção e 30 mm para o recalque (CATÁLOGO... , 2023).

Para saber se a bomba foi adequada, calculamos o H_b teórico, que não deve ter variação de mais de 5m com a bomba escolhida utilizando a equação:

$$H_{b_{bomba}} - H_{b_{calculado}} \leq 5m$$

Com o head calculado foi de 3m e o head da bomba de 8m, a escolha da bomba está adequada. Para o cálculo da potência total da bomba, utilizamos a seguinte equação:

$$P = \frac{\rho g Q H_t}{\eta_b}$$

A carta da bomba nos mostra que a bomba escolhida tem potência total de 1,1 kW e na vazão do sistema uma potência de 0,81 kW, o que nos dá um $\eta_b = 0,736$. Colocando na equação de volta, a potência encontrada é de 1,163 kW, o que condiz com as características da bomba.

8.2 MATERIAL DA TUBULAÇÃO

As tubulações são muito importantes em um projeto industrial, o sistema de tubos que é responsável pelo transporte de fluidos entre equipamentos, os quais devem funcionar de forma coletiva e integrada. O errado desenvolvimento de um projeto de tubulação pode causar mau funcionamento do processo. Esses problemas podem ser ocasionados por erros na escolha do material do tubo, dimensionamento do diâmetro nominal, cálculo de perdas de carga, fator de simultaneidade, entre outros.

Os materiais de tubulação para a destiladora foram escolhidos por serem muito usados na indústria. A escolha para a planta de metanol se baseou no custo, na resistência à temperatura e na rugosidade absoluta.

TABELA 36 – PREÇO POR KG DE TUBULAÇÃO (\$)

MATERIAL (kg)	CUSTO (\$)
Aço Inox- 316	1-2,5
Metal	9-12
Teflon	10-15

FONTE: Adaptado de Made-in-China Connecting Buyers with Chinese Suppliers

Os preços obtidos foram retirados da revendedora Made-in-China Connecting Buyers with Chinese Suppliers, e variam de acordo com o diâmetro da tubulação.

Além do alto custo da tubulação de Teflon, outro problema é sua resistência a temperatura que varia de -80 °C até 260 °C, sendo que na entrada e saída da destiladora temos uma

temperatura muito alta, o que poderia causar algum inconveniente. Conforme aumenta-se a temperatura o material as propriedades mecânicas do material tendem a diminuir.

Como não será usado o Teflon, iremos comparar então o Aço Inox-316 e o Metal, os quais possuem menor custo e suportam temperaturas muito elevadas, pelo rendimento de cada material através da característica explicitada na tabela.

TABELA 37 – RUGOSIDADE ABSOLUTA

MATERIAL	RUGOSIDADE ABSOLUTA (mm)
Aço Inox- 316	0,0015
Metal	0,001-0,002
Teflon	10-15

FONTE: Connor(2019)

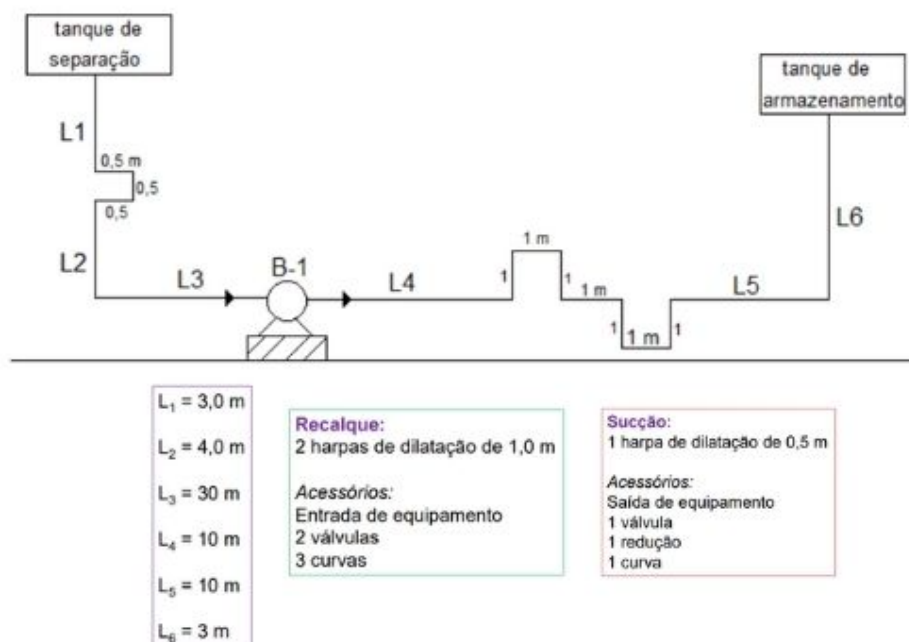
Ambas rugosidades apresentadas são muito próximas, logo a perda de carga também será. Portanto, os dois materiais são excelentes para o projeto, ambos possuem também alta resistência à corrosão que acarreta em menores custos com manutenção e substituição de tubos, além disso devido à baixa rugosidade é facilitado a limpeza do material.

Portanto, concluímos que a melhor opção de tubulação para as destiladoras do processo de produção de metanol é o Aço inox 316, pois é o melhor em todos os aspectos analisados.

8.3 SELEÇÃO DE VÁLVULAS

A Figura abaixo ilustra o cenário pré-estabelecido para a planta e informa a quantidade de acessórios utilizados na tubulação de sucção e de recalque. Será discutido a escolha de cada uma das válvulas e suas respectivas posições, considerando as correntes entre a Destiladora e o Tanque de Armazenamento.

FIGURA 11 – DIAGRAMA DA TUBULAÇÃO



FONTE: Os autores (2023).

O metanol é um líquido inflamável, os acessórios instalados devem ser certificados para baixa emissão fugitiva e devem respeitar as recomendações da Norma Regulamentadora 20 (Segurança de Saúde no Trabalho com Inflamáveis e Combustíveis).

Sabendo que haverá uma diferença de altura entre o vaso de separação e a bomba, podemos dizer que um bom posicionamento para a válvula seria logo após o nivelamento da corrente com o motor. Isso porque deixar a válvula em um ponto baixo da tubulação facilita o acesso e essa posição permite que processos de manutenção sejam feitos na bomba e na parte posterior da tubulação sem a necessidade do esvaziamento dos tubos L1 e L2.

A válvula esfera usa um elemento esférico para interromper o escoamento. É um tipo de válvula de bloqueio, portanto funciona completamente fechada ou completamente aberta. Como o elemento de selagem é uma esfera, o seu alinhamento com o eixo da haste não é necessário para um fechamento absoluto, permitindo que um giro de 90° seja suficiente para estancar ou liberar o fluxo.

Possui vantagem sobre outras válvulas pois sua perda de carga é excepcionalmente pequena. A válvula esfera não é particularmente recomendada em dois casos: para fluidos com partículas sólidas em suspensão; ou para controle de vazões parciais, então esse modelo de válvula é o ideal.

FIGURA 12 – VÁLVULA DE BLOQUEIO DE ESFERA



FONTE: VAPORTEC (2022).

No caso da tubulação de recalque, a primeira válvula será posicionada na entrada do tanque de armazenamento, com o intuito de possibilitar o bloqueio de abastecimento de maneira rápida e eficiente. Como a situação envolve o abastecimento em um tanque de armazenamento de produto, é interessante que o acessório escolhido seja de fácil manuseio, permitindo reações rápidas a situações de emergência.

Sabendo que não há necessidade na variação da vazão de operação do sistema em condições normais, não existe motivo para optar por uma válvula analógica, sendo a válvula de esfera, novamente, uma ótima opção. Por fim, a última válvula na tubulação de recalque será colocada logo após a bomba. O intuito desse equipamento é garantir que não haja contrafluxo de produto, principalmente considerando que parte da linha de recalque é ascendente.

Os melhores tipos de válvula são as válvulas de retenção que funcionam por um mecanismo de diferença de pressão que é ativado quando o fluido transportado tende a inverter de sentido. Apesar de essa utilização implicar um aumento na perda de carga, também permite uma melhora na qualidade do processo, pois ajuda a evitar que o fluido retorne para a bomba nos momentos em que a produção está parada.

Visando atingir a eficiência necessária sem excessos de perda de carga, a válvula escolhida será a de pistão. O funcionamento desse equipamento envolve um tampão que, por ação do fluxo convencional do sistema, é mantido longe da base. Qualquer intenção de fluxo no sentido contrário é responsável por gerar uma pressão sob o pistão, consequentemente pressionando-o contra a sede da válvula e bloqueando o fluxo.

FIGURA 13 – VÁLVULA DE RETENÇÃO DE PISTÃO



FONTE: ISOVAL (2022).

8.4 AVALIAÇÃO DO TANQUE DE ARMAZENAMENTO DE METANOL

O tanque deve ter a máxima qualidade, visto que ele será utilizado para armazenar líquidos por muito tempo, tendo um uso quase que permanente. Dentre as qualidades de um tanque é preciso levar em conta seu material, pressão do líquido, estrutura física.

Como já citado, o material mais recomendado para a tubulação é o aço inox- 316. Portanto, como na tubulação foi considerado somente a passagem de metanol, para o tanque de armazenamento também será utilizado com este material. O formato do tanque escolhido foi o cilíndrico, já que este geralmente é usado para armazenamento de líquidos. É um tanque seguro para armazenamento, possui boa capacidade, ocupa menos espaço e apresenta maior facilidade no momento de retirada do produto armazenado.

O tanque cilíndrico é um reservatório fácil de limpar, pois não possui emendas ou soldas e é um dos mais em conta no mercado. Dentro do tanque cilíndrico, será escolhido um tanque horizontal que possui como vantagem suportar pressões maiores.

Para garantir que essa pressão se mantenha é preciso um sistema de pressurização, para que, quando haja manutenção possamos despressurizar e após terminar aumentar a pressão novamente. Caso isso não aconteça pode ocorrer problemas nas tubulações e na bomba que estão pressurizadas.

FIGURA 14 – TANQUE HORIZONTAL



FONTE: H2O RESERVATÓRIOS (2023).

9 COMPRESSOR - POTÊNCIA E EFICIÊNCIA

Utilizamos balanço de energia e entropia. Balanço de energia para compressor e correntes adjacentes:

$$\Delta \dot{H} = \dot{Q} + \dot{W}_s$$

Consideramos a troca de calor como negligível, e a diferença de entalpia corresponde a corrente 1 e 2:

$$\sum_2 \dot{n}_2 \underline{H}_n - \sum_1 \dot{n}_1 \underline{H}_n = \dot{W}_s$$

A entalpia da corrente 2 já se encontra presente em 20

TABELA 38 – ENTALPIAS DA CORRENTE 1

Composto	\underline{H} (J/mol)	\underline{H} (kJ/h)
CH_3OH	12435.21	0.00
H_2O	9055.44	0.00
CO	2684.76	713260.56
CO_2	3283.69	197536.84
H_2	2797.57	3253736.07
N_2	2683.18	40353.00

FONTE: Os autores(2023)

O trabalho de eixo real é portanto $\dot{W}_{s,R} = 1940163.08 \frac{kJ}{h}$. Para o trabalho de eixo isentrópico, utilizamos a equação (J. M. SMITH, 2022):

$$\frac{\Delta S^{ig}}{R} = \int_{T_0}^T \frac{C_p^{ig}}{R} \frac{dT}{T} - \ln\left(\frac{P}{P_0}\right)$$

A entropia desejada é nula, então:

$$\ln\left(\frac{P}{P_0}\right) = \int_{T_0}^T \frac{C_p^{ig}}{R} \frac{dT}{T}$$

Utilizamos o H_2 , por se tratar do composto em maior quantidade molar na corrente, para o cálculo de C_p^{ig} , não corrigimos a hipótese de gás ideal. O T_0 é a temperatura da corrente 1, P_0 a pressão na corrente 1 e P a pressão na corrente 2, T será modificado variando dentre a temperatura da corrente 1 e temperatura da corrente 2, ou seja o lado $\ln(\frac{P}{P_0})$ é fixo e portanto variamos $\int_{T_0}^T \frac{C_p^{ig}}{R} \frac{dT}{T}$, o que mais se aproximou variando a temperatura com passo de 0.01 °C, e aproximação do logaritmo das pressões de 0.001, foi a temperatura de 150.75 °C, fazemos então a entalpia da corrente 2 para tal temperatura isentrópica:

Com isso podemos fazer a variação:

TABELA 39 – ENTALPIAS DA CORRENTE 2 ISENTRÓPICA

Composto	\underline{H} (J/mol)	\underline{H} (kJ/h)
CH_3OH	16671.92	0.00
H_2O	11905.80	0.00
CO	3598.13	955917.71
CO_2	4530.28	272527.41
H_2	3706.23	4310559.38
N_2	3589.38	53981.52

FONTE: Os autores(2023)

$$\sum_2 \dot{n}_2 \underline{H}_{isen_n} - \sum_1 \dot{n}_1 \underline{H}_n = \dot{W}_s^{isen}$$

$$\dot{W}_s^{isen} = 1388099.55 \frac{kJ}{h}$$

A eficiência será então:

$$n = \frac{\dot{W}_s^{isen}}{\dot{W}_{s,R}} = 0.715$$

ou 71,5 %

10 CONCLUSÃO

Pelos cálculos realizados para a dada planta, foi possível compreender de maneira mais coesa como os balanços nos equipamentos influenciam os cálculos da planta inteira, e como é possível realizar os métodos iterativos para se obter os resultados quando por métodos comuns de resolução não seria viável descobrir. Além de boas praticas como a separação de cálculos, fazendo com que um erro em uma parte seja facilmente corrigível. A utilização de meios computacionais foi também de suma importância, já que sem o auxílio destes o tempo, precisão e acesso a informação seriam afetados negativamente.

Para a parte do balanço de massa, concluiu-se que para obter maior eficiência, é necessário haver um grande reciclo de reagentes, porém mantendo uma corrente purga para não ocorrer acúmulo no reator, o que prejudicaria a qualidade do equipamento. Além disso, foi possível observar que a entrada da planta pode ser otimizada para gerar menos gastos na produção, e que uma reação secundária pode gerar produtos indesejados que causem impureza na matéria de interesse da indústria. No caso da planta de metanol estudada, a reação com o CO_2 gera como subproduto a água, que, por se encontrar no mesmo estado físico do metanol em boa parte da planta, torna a separação desses produtos menos eficiente. Concluiu-se a necessidade de aprimoramento da planta apresentada para atender melhor a pureza do metanol, pensando sempre na viabilidade e no custo de produção.

No balanço de energia foi importante a consideração de uma temperatura e pressão padrão onde a entalpia era nula, já que limitou a ordens de grandeza menores, facilitando até mesmo a visualização de dados, a organização de dados e a utilização correta das equações foi muito importante, pois um erro em uma equação ou dado gera grandes diferenças finais. As vazões de utilidades deram uma boa introdução de como são escolhidos e como funcionam as operações de resfriamento e aquecimento industrial, principalmente do vapor saturado devido a sua importância.

No dimensionamento, foi possível compreender melhor sobre a escolha de tubulações e acessórios, além de equipamentos como o tanque de separação, baseando-se no custo, na natureza do fluido, na necessidade em cada trecho da planta, e na perda de carga e eficiência da bomba. Com os conhecimentos adquiridos na disciplina de Fenômenos de Transferência de Momento, foi possível compreender o processo de escolha de uma bomba, tomando como referência a perda de carga, o tipo de fluido e a altura dos tanques, como foi discutido anteriormente no relatório. Em relação ao compressor, esse ofereceu uma oportunidade de exercitar um problema de balanço de entropia.

Por fim, a aplicação de conteúdos já vistos no curso de engenharia química da Universidade Federal do Paraná, atrai noções essenciais de engenharia para o futuro do curso.

REFERÊNCIAS

ARANER. **Industrial refrigerant used in chillers and refrigeration plants**. 2023.

Disponível em: <<https://www.araner.com/blog/refrigerants-used-in-industrial-refrigeration-plants>>. Citado 1 vez na página 39.

ASME B16.9 PIPE FITTINGS MANUFACTURERS IN INDIA, STANDARD SPECIFICATION OF ANSI B16.9 BUTTWELD MATERIAL. [S.l.: s.n.], 2023. Disponível em: <<https://www.highpressurepipefittings.com/asme-b16-9-fittings.html>>. Citado 0 vez na página 45.

B. E. POLING, J. M. PRAUSNITZ, J. P. O'CONNELL. **THE PROPERTIES OF GASES AND LIQUIDS**. [S.l.: s.n.], 2000. Citado 0 vezes nas páginas 34, 39.

CATÁLOGO Aço Inox. 2023. Disponível em: <https://acotubo.com.br/wp-content/uploads/2020/06/ACO_005_CatalogoAcotubo_Mini_Inox.pdf>. Citado 1 vez na página 47.

J. M. A. NETTO. **Perdas de Carga Localizadas, em Canalizações**. 2023. Disponível em: <http://revistadae.com.br/artigos/artigo_edicao_25_n_1000.pdf>. Citado 0 vez na página 45.

J. M. SMITH, H. C. VAN NESS. **Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics**. [S.l.: s.n.], 2022. Citado 5 vezes nas páginas 32, 34, 36, 38, 52.

METHANOL COMPOUND. 2023. Disponível em: <<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Methanol#section=Density>>. Citado 1 vez na página 44.

METHYL ALCOHOL. 2023. Disponível em: <<https://webbook.nist.gov/cgi/inchi?ID=C67561&Mask=4&Type=ANTOINE&Plot=on>>. Citado 1 vez na página 44.

NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY. **NIST Chemistry WebBook**. [S.l.: s.n.], 2022. <https://webbook.nist.gov/chemistry/>. Acessado: 2023-02-12. Citado 1 vezes nas páginas 32, 34, 39.

R. M. FELDER R. W. ROUSSEAU, L. G. Bullard. **Elementary Principles of Chemical Processes**. [S.l.: s.n.], 2016. Citado 4 vezes nas páginas 19, 20, 32, 36.

SWAGELOK ENERGY ADVISORS, INC. **STEAM SYSTEMS BEST PRACTICES**. [S.l.: s.n.], 2009. Disponível em: <https://www.swagelok.com/~media/Distributor%5C%20Media/C-G/Chicago/Services/ES%5C%20-%5C%20Steam%5C%20Pressure%5C%20for%5C%20Process%5C%20Applications_BP_15.ashx>. Acesso em: 12 fev. 2023. Citado 1 vez na página 38.

TECHNICAL DATA HCO SEAL MECHANICAL PUMPS. 2023. Disponível em:
<<https://www.gemmecotti.com/wp-content/uploads/2022/03/technical-data-hco-mechanical-seal-pumps-complete-rev-3-1.pdf?x16141>>. Citado 1 vez na
página 45.

ANEXOS

LEGENDA

○	Corrente de processo	RE-1: Reator catalítico	DE-1: Coluna de destilação	TC: Trocador de calor
◇	Pressão (bar – absoluta)	VS-1: Sistema de condensação parcial 01	TS: Tanque de separação	CP: Compressor
T	Temperatura (°C)	VS-2: Sistema de condensação parcial 02	F-1: Forno de pré-aquecimento	B: Bombas centrífugas

ANEXO B – CÓDIGO FONTE DE CÁLCULOS DE ENTALPIA

<https://github.com/luizdembicki/2-3-semester-2022/blob/main/Integr/BE.ipynb>