



1

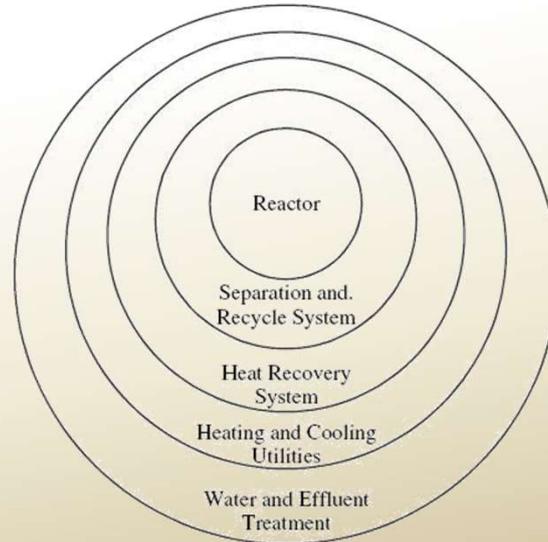
Projeto conceitual

- Inicia-se pela **síntese do** processo, isto é, pela definição de uma sequência de operações que permitam transformar as matérias-primas em produtos.
 - Deseja-se selecionar uma opção entre milhares de rotas possíveis, considerando desempenho econômico e ambiental.
 - A síntese é realizada com informações incompletas, cálculos aproximados, uso de heurística (regras práticas)
 - Método de engenharia (Thatcher): inicialmente apenas aspectos essenciais, refinamentos sucessivos.
 - Análise econômica com precisão de ~30 – 50 %
 - Tal estimativa serve para orientar a seleção de alternativas de processo mais promissoras num estágio inicial do projeto (rapidamente e com baixo custo de desenvolvimento)

Fonte: Douglas, Conceptual Process Design, 1988

2

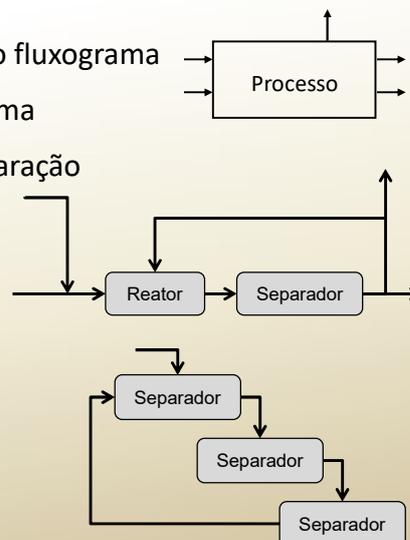
Abordagem Hierárquica



3

Etapas do processo conceitual

- Dados iniciais
- Estrutura das entradas e saídas do fluxograma
- Estrutura dos reciclos do fluxograma
- Estrutura geral do sistema de separação
- Rede de trocadores de calor e integração energética
- Utilidades



4

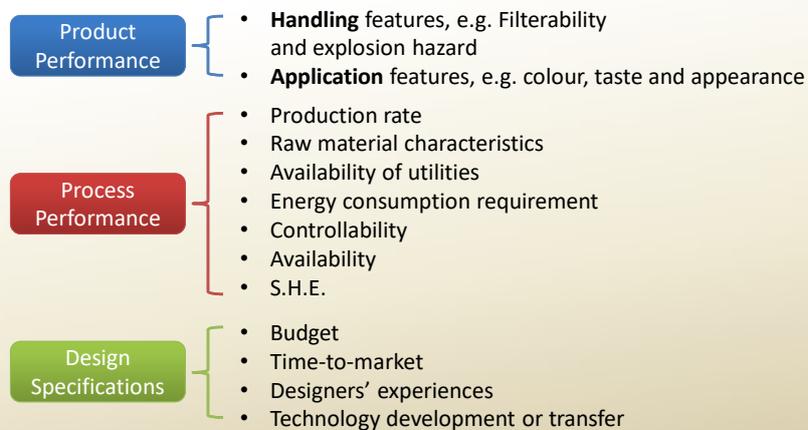
Abordagem hierárquica: procedimento

- Em cada nível de projeto:
 - Identificar as variáveis de projeto relevantes
 - Coletar informações sobre o processo
 - Sintetizar o processo
 - As variáveis de projeto obtidas são especificações no estágio seguinte
- Fontes de informações sobre os processos:
 - Heurísticas
 - Teóricas
 - Modelos fenomenológicos
 - Dados experimentais



5

Especificações iniciais



Lewis, Seckler et al. , 2015

6

Especificações finais do projeto conceitual

O projetista deve especificar o seguinte:

- Sequencia de operações e ciclos
 - Fluxograma de processo
 - Balanços de massa e de energia
- **Função** de cada operação:
 - Reatores: seletividade e conversão
 - Separadores: qual a recuperação e pureza (saída do separador frequentemente são misturas que alimentam outro separador)
- Dimensões dos equipamentos principais
- Consumo de reagentes e energia
- Analise econômica ~30% precisão

7

Resumo

- | | |
|--|---|
| <ul style="list-style-type: none"> • Abordagem hierárquica <ul style="list-style-type: none"> • Estrutura das entradas e saídas do fluxograma • Estrutura dos ciclos do fluxograma • Estrutura geral do sistema de separação • Rede de trocadores de calor e integração energética • Utilidades | <ul style="list-style-type: none"> • No projeto conceitual o projetista especifica: <ul style="list-style-type: none"> • Sequencia de operações e ciclos • Função de cada operação • Dimensões dos equipamentos principais • Consumo de reagentes e energia • Analise econômica com ~30% precisão |
|--|---|

8

Etapas do processo conceitual

• Dados iniciais

- Estrutura das entradas e saídas do fluxograma
- Estrutura dos ciclos do fluxograma
- Estrutura geral do sistema de separação
 - Sistema de recuperação de vapor
 - Sistema de separação de líquidos
- Rede de trocadores de calor

9

Dados iniciais: informações sobre as reações químicas

- | | |
|--|---|
| <ul style="list-style-type: none"> • Quais as reações e quais as condições de reação? <ul style="list-style-type: none"> • matérias primas e produtos <ul style="list-style-type: none"> ◦ Subprodutos são importantes mesmo em traços, pois podem se acumular no processo • estequiometria e excesso de reagentes • Catalisador • T, P, tempo de residência • Fontes: enciclopédias, livros, literatura científica, patentes | <ul style="list-style-type: none"> • Indicadores de desempenho: <ul style="list-style-type: none"> • Rendimento: kg prod./kg reagente • Seletividade: kg subprod/kg reag. • Tempo de residência • Usar numero mínimo de indicadores • Evitar variáveis extensivas • Negligenciar seletividade ou conversão? <ul style="list-style-type: none"> ◦ Rendimento → reagente pode ser recirculado, mas investimento aumenta. ◦ Seletividade → matéria prima é perdida. |
|--|---|

10

Dados iniciais: propriedades físicas

- Substancias puras
- Misturas
- Quando o produto ou a matéria-prima é não-convencional, podem faltar dados:
 - usar métodos para estimativa de propriedades físicas
 - Analisar sensibilidade do custo a estes fatores → decidir o que levantar experimentalmente
- Modelos termodinâmicos
 - Checar estimativas com sistemas binários conhecidos (Dechema)

11

Etapas do processo conceitual

- Dados iniciais
- Estrutura das entradas e saídas do fluxograma
- Estrutura dos reciclos do fluxograma
- Estrutura geral do sistema de separação
 - Sistema de recuperação de vapor
 - Sistema de separação de líquidos
- Rede de trocadores de calor

12

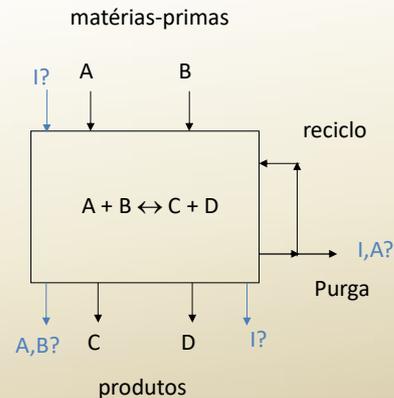
Diagrama de entradas e saídas

- Em geral desejamos recuperar 99% das matérias primas → 100%.
- Exemplo

- Exceções:

- ar, água (ai!)
- Purga

- Operações unitárias podem ter rendimento limitado, mas o processo como um todo não → reciclou ou purga



13

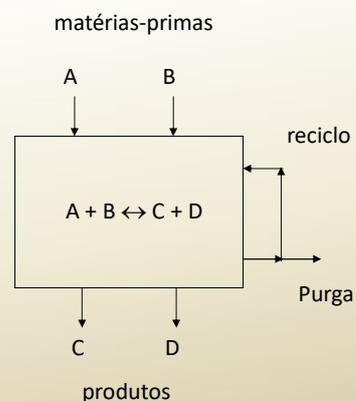
Diagrama de entradas e saídas

- Em geral desejamos recuperar 99% das matérias primas → 100%.
- Exemplo

- Exceções:

- ar, água (ai!)
- Purga

- Operações unitárias podem ter rendimento limitado, mas o processo como um todo não → reciclou ou purga



14

Exemplo

- Especificações iniciais
 - Produzir benzeno
 - Usar tolueno e H_2 como matéria prima
 - reações de hidroalquilação de tolueno, processo HDA
 - O hidrogênio contém 5% de metano como impureza
 - Difenil, H_2 e CH_4 podem ser aproveitados como combustíveis

- Pede-se:

Propor um fluxograma de entradas e saídas para este processo

- Dados iniciais:
- Estequiometria da reação
 - Tolueno + $H_2 \rightarrow$ Benzeno + CH_4
 - $2 \text{ Benzeno} \rightleftharpoons \text{Difenil} + H_2$
 - CH_4 e H_2 são de difícil separação
 - Benzeno tolueno e difenil separáveis por destilação

Componente	Ponto de ebulição
H_2	-253 °C
CH_4	-161 °C
Benzeno	80 °C
Tolueno	111 °C
Difenil	253 °C

15

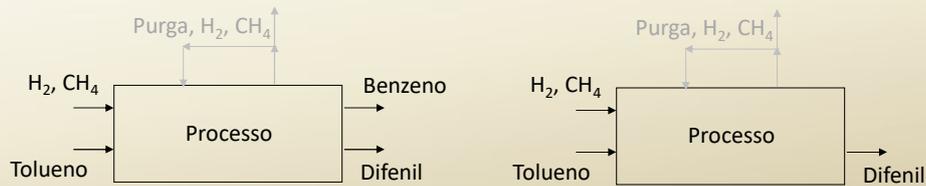
Subprodutos reversíveis: recuperar ou reciclar?

- Recuperar
 - O subproduto é separado e vendido como subproduto
 - \rightarrow penalidade econômica de gastar parte do reagente nobre para produzir algo de menor valor. Há ainda o custo de separação do difenil
- Reciclar
 - Se a reação é reversível, é possível reciclar o subproduto para o reator
 - \rightarrow penalidade econômica de separar o subproduto e de conduzir a reação principal sob menor concentração

16

O que fazer com o difenil?

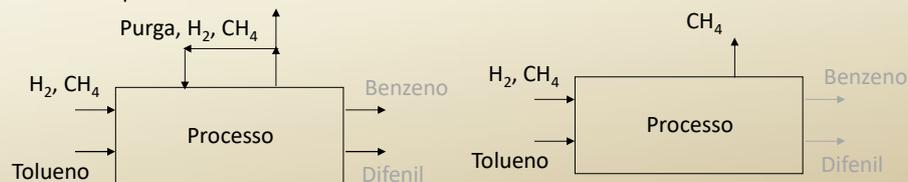
- Opção 1: recuperar
 - Difenil é separado e vendido como subproduto
 - → penalidade econômica de gastar parte do reagente nobre Tolueno para produzir algo de menor valor . Há ainda o custo de separação do difenil
- Opção 2: reciclar
 - Difenil é reciclado para o reator. Ele se acumula no loop de reciclo
 - → penalidade econômica de reprocessar difenil e conduzir a reação sob menor concentração



17

O que fazer com o CH₄ e H₂?

- Opção 1: reciclo e purga
 - Temperaturas de ebulição de CH₄ e H₂ são baixas → separar é caro
 - Ajustar processo para obter uma corrente de purga pequena e rica em CH₄.
 - desvantagens:
 - CH₄ e recirculado no processo
 - H₂ é perdido
- Opção 2: separar e reciclar
 - → penalidade econômica de separar reprocessar difenil e conduzir a reação sob menor concentração



18

Produtos de reação: reciclar e purgar, separar ou descartar?

- Reciclo e purga
 - Reagente leve e impureza leve na alimentação, ou
 - Reagente leve e subproduto leve
 - Leve = ponto de ebulição < -48 °C
 - Usar reagente em excesso para promover conversão completa do reagente que vai ser removido com a purga
 - Desvantagem:
 - Perda do reagente
 - Perda da impureza
 - Acumulo da impureza na corrente de circulação
- Separação e reciclo
 - Desvantagem:
 - → custo para separar
- Descarte
 - Ar usado em excesso é simplesmente descartado
 - → se o excesso de ar é grande, o volume a processar é grande

19

Impurezas na alimentação: purificar ou processar?

- Purificação é recomendada se
 - A impureza está em quantidade significativa
 - Se ela não for removida ela vai se incorporar a perdas da matéria prima
 - A impureza não é inerte (p.ex. envenena o catalisador)
 - → custo da purificação
- Processamento da impureza é recomendado se
 - A impureza é difícil de separar (p.ex. se a alimentação for um gás ou se a impureza formar um azeótropo com um reagente)
 - A impureza for também um produto de reação ou um subproduto do processo
 - A impureza é inerte e mais facilmente separável do produto do que da alimentação.
 - → custo de processar a impureza (aumenta vazões)

Como não estamos certos de nossa decisão, registramos a decisão oposta. Esta é uma forma sistemática de gerarmos uma lista de processos alternativos

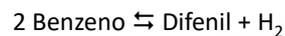
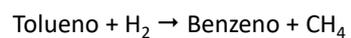
20

O que fazer com a impureza CH₄ na alimentação?

- Vamos processar o CH₄, pois:
 - A quantidade de CH₄ na corrente é pequena.
 - O CH₄ interfere pouco na reação em baixa concentração (a checar)
 - A separação H₂-CH₄ é cara

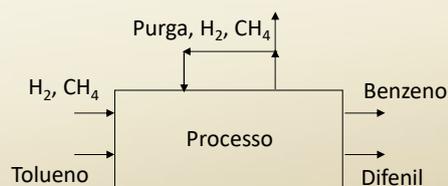
21

Diagrama de entradas e saídas para o processo HDA



CH₄ = impureza na alimentação e subproduto

Componente	Ponto de ebulição	Código de destinação
H ₂	-253 °C	Reciclo e purga
CH ₄	-161 °C	Reciclo e purga
Benzeno	80 °C	Produto principal
Tolueno	111 °C	Reciclo
Difenil	253 °C	Combustível



22

Avaliação do fluxograma

- **Certifique-se que todos os produtos, subprodutos e impurezas deixem o processo**
 - Mesmo em traços, uma impureza pode tornar o processo inoperável
 - Interfere em reações ou separações
 - Acumula-se em corrente de reciclo
 - Contamina produto
- Exemplo HDA
 - Na corrente de alimentação de tolueno é possível que haja outras impurezas, conforme sua fonte
 - Outras reações, p.ex. formação de terfenil

23

Variáveis de projeto e balanços globais

- Selecionamos as variáveis que completam a definição do problema de projeto
 - Número de variáveis = graus de liberdade
- **Balanços globais**
 - Começamos com balanços para o processo todo, sem considerar quaisquer reciclos.
 - Ao longo do processo, identificamos novas variáveis de projeto necessárias para completar a definição do problema.

Variáveis de projeto	
Reações complexas	Conversão
	Relação molar de reagentes
	Temperatura
	Pressão
Reagentes em excesso	Reagentes não recuperados
	Reciclo de gás e purga

Assumimos 100% de conversão e recuperação de correntes

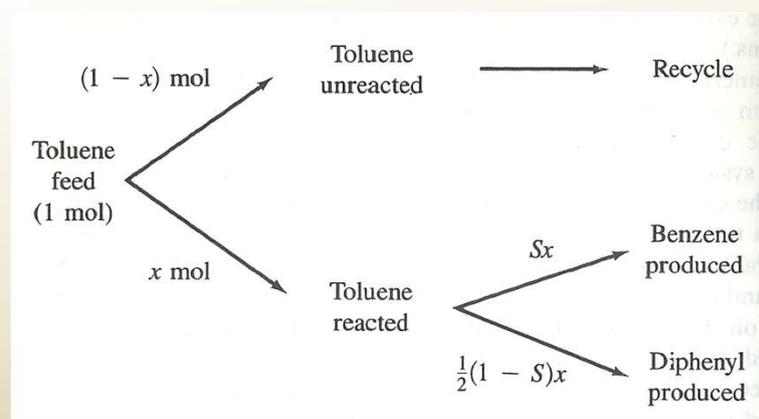
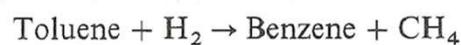
24

Variáveis de projeto e balanços globais

- Etapas
 - Iniciamos com a **produção especificada**
 - Com a **estequiometria e correlação para distribuição de produtos**, encontramos as vazões de subprodutos e de reagentes
 - **este balanços dependem das variáveis de projeto T, P, excesso reagentes**
 - Com as **impurezas da alimentação**, calculamos as vazões de impurezas na entrada e saída, para as correntes nas quais os reagentes são completamente recuperados e reciclados
 - Com o **excesso de reagentes especificado**, calculamos vazões de saída de reagentes, para correntes que envolvem purga (ou ar)
 - Calculamos as vazões de entrada e saída para impurezas que entram nas correntes com purga.

25

Processo HDA



26

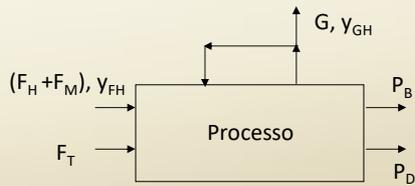
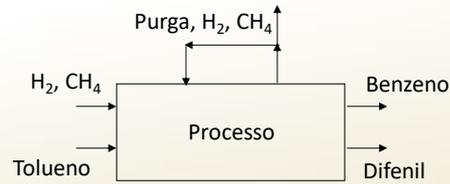
Exemplo HDA

- Tolueno + H₂ → Benzeno + CH₄
- 2 Benzeno ⇌ Difenil + H₂
- Especificações
 - Produção: P_B = 265 mol/h
 - Pureza da matéria prima: y_{FH}
 - Seletividade: S = mol B/mol T

$$S = 1 - \frac{0,0036}{(1-x)^{0,544}}, \quad x < 0,97$$
 - Excesso de hidrogênio: F_E mol/h
 - Ou teor de hidrogênio na purga: y_{PH}

$$y_{PH} = F_E / P_G$$

Para sistemas mais complexos prefira numerar correntes e usar "tabelas de correntes", incluindo T,P



T	B	mol/h
H ₂	D	
	CH ₄	

27

Exemplo HDA

- Balanços de massa fornecem

$$F_T = P_B / S$$

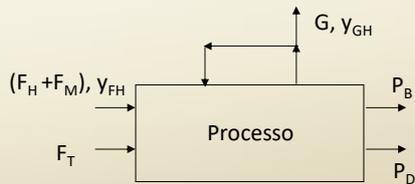
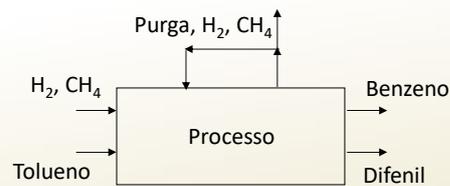
$$P_D = F_T \frac{1-S}{2}$$

$$F_H + F_M = \frac{P_B \left[1 - (1 - y_{GH}) \frac{1-S}{2} \right]}{S(y_{GH} - y_{GH})}$$

$$G = F_H + F_M + \frac{1-S}{2S} P_B$$

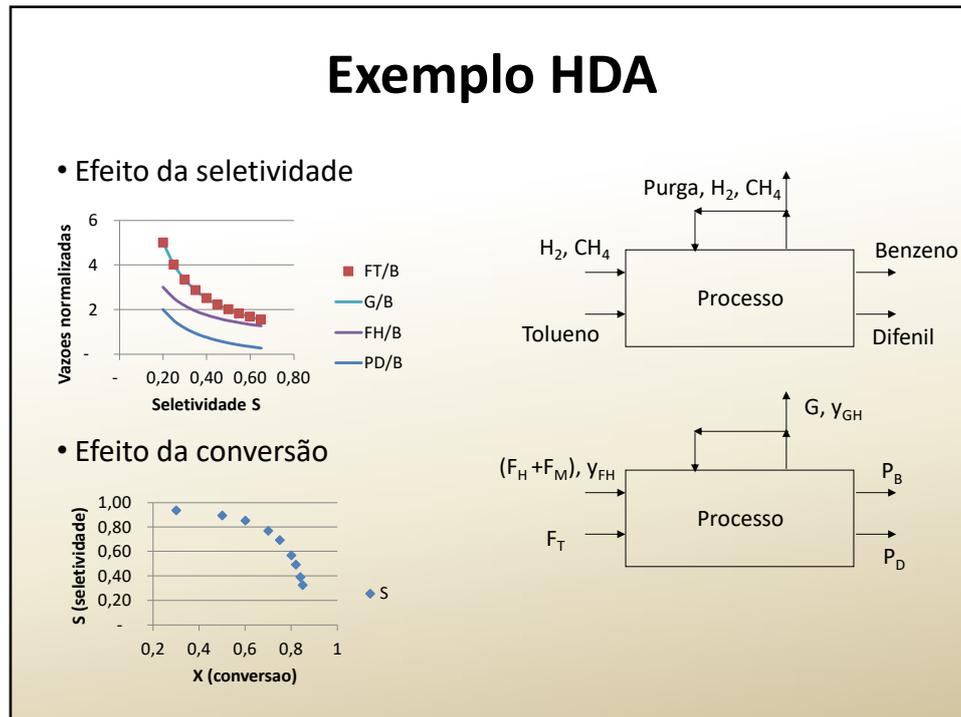
- Especificados P_B, S, y_{GH} ou $F_H + F_M$

Ao variar condições de reação e excesso de hidrogênio, varia S e consequentemente o desempenho do processo



T	B	mol/h
H ₂	D	
	CH ₄	

28



29

Potencial econômico

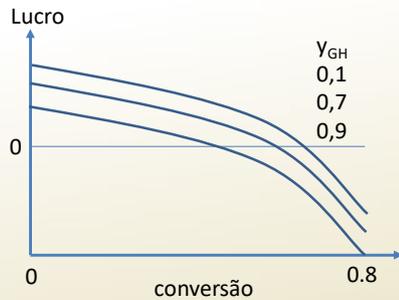
- O potencial econômico (PE) é o lucro anual no caso de custos nulos de capital e utilidades.
- Se o potencial econômico for negativo, buscamos:
 - Outras matérias primas
 - Outras rotas
- PE = valor do produto + valor dos subprodutos - custos das matérias-primas
- PE em \$/ano
- \$/ano = \$/kg * kg/ano

- Exemplo HDA
 - EP =
 - + benzeno
 - + difenil como combustível
 - + purga como combustível
 - tolueno
 - corrente de H₂

30

Potencial econômico

- Potencial econômico para processo HDA



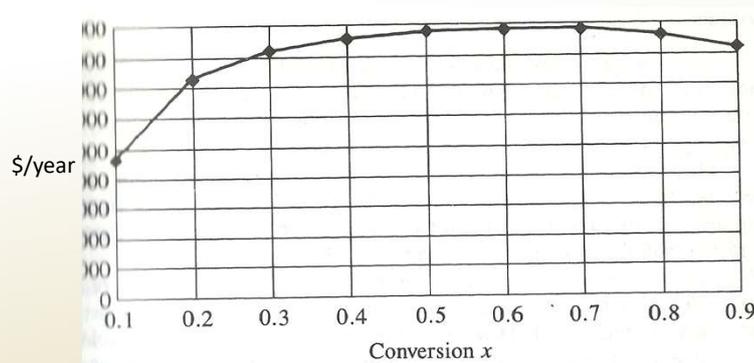
Completar a análise de uma alternativa, só depois considerar outras, pois o conhecimento adquirido permite rejeitar previamente alternativas não-lucrativas

- PE é máximo para
 - Conversão nula (pois a seletividade é máxima)
 - Perda de hidrogênio na purga é nula (purga de metano puro)
- Consequências:
 - Conversão nula → reciclo de tolueno ao reator é infinito
 - Perda nula de H₂ → reciclo de gás infinito

→ nas etapas seguintes do projeto, procurar ótimos valores para estes reciclos

31

Processo HDA



32

Resumo

- Dados iniciais
 - Informações sobre reações
 - Propriedades físicas
 - Modelos termodinamicos
- Questões a serem respondidas com o diagrama de entradas e saídas
 - Removemos ou reciclamos um subproduto reversível?
 - Purificamos ou aplicamos reciclo e purga de gás?
 - Purificamos a alimentação ou processamos as impurezas?
- Quais as variáveis de projeto e os compromissos econômicos?
- Critérios para decisões:
 - Dados iniciais
 - Heurísticas
 - Na sua ausência, escolher arbitrariamente e listar um processo alternativo com a decisão oposta
- Completar o projeto conceitual com a alternativa escolhida