



TRABALHO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**SIMULAÇÃO E MELHORIAS DE UMA UNIDADE DE
EXTRAÇÃO DE AROMÁTICOS**

Thomas Eduardo Corrêa

136198

Orientador: Profº Dr. Marcelo Farenzena

Dezembro 2010

SUMÁRIO

1. Introdução.....	5
2. Fundamentos Teóricos e Revisão Bibliográfica	7
2.1 Destilação.....	7
2.1.1 Conceitos de Eficiências.....	7
2.2 Extração Líquido-Líquido.....	10
2.2.1 Escolha do Solvente.....	11
2.3 Sulfolano.....	13
3. Unidade de Extração de Aromáticos (Processo Sulfolano)	15
3.1 Extratora - T01.....	16
3.2 Lavadora de Refinado – T02.....	17
3.3 Coluna Retificadora (ou stripper) - T03	18
3.4 Recuperadora de Solvente – T04.....	18
3.5 Retificadora (ou stripper) de Água – T05	19
3.6 Regeneradora de Solvente – T06	20
4. Simulação e Validação	21
4.1 Modelo Utilizado na Simulação	21
4.2 Construção da Simulação.....	22
4.3 Validação da Simulação	26
5. Melhorias.....	29
5.1 Temperatura do Solvente	29
5.2 Taxa Mássica de Solvente Primário.....	33
6. Conclusão	36
7. Referências Bibliográficas.....	37

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Contato líquido-vapor. Fonte: FOUST (1982)	9
Figura 2.2: Extração líquido-líquido	10
Figura 3.1: Processo de Extração com Sulfonal. Fonte: Shell Global Solutions Handbook...15	
Figura 3.2: Esquema da coluna de extração T01	16
Figura 3.3: Esquema da coluna de extração T02	17
Figura 3.4: Esquema da coluna retificadora T03	18
Figura 3.5: Esquema da recuperadora de solvente T04	19
Figura 4.1: Componentes presentes na simulação.....	23
Figura 4.2: Perfil de temperatura da recuperadora de solvente	27
Figura 5.1 : Diagrama trifásico dos componentes da extratora. Fonte: UOP	30
Figura 5.2: Taxa mássica de não-aromáticos no BTX produto versus temperatura	31
Figura 5.3: Taxa mássica de aromáticos no Refinado produto	32
Figura 5.4: Taxa mássica de aromáticos no Refinado produto	33

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1: Componentes presentes na unidade e na simulação.....	22
Tabela 4.2: Carga da unidade de BTX simulada	24
Tabela 4.3: Condições de operação das colunas de extração.....	25
Tabela 4.4: Condições de operação das colunas de destilação	25
Tabela 4.5: Validação da corrente de BTX	26
Tabela 4.6: Comparação dados de planta com dados de simulação.....	27
Tabela 4.7: Validação da corrente de Refinado	28
Tabela 5.1: Variação dos componentes na corrente BTX (Kg/h) com a redução da temperatura.....	30
Tabela 5.2: Variação dos componentes na corrente Refinado (Kg/h) com a redução da temperatura.....	31
Tabela 5.3: Comparação entre composição da simulação inicial e após melhorias na corrente BTX.....	34
Tabela 5.4: Comparação entre composição da simulação inicial e após melhorias na corrente Refinado.....	35

1. Introdução

As indústrias petroquímicas utilizam um grande número de operações unitárias, bem como diversos fenômenos físico-químicos. Entre as operações unitárias que são mais largamente utilizadas estão escoamento de fluidos, transferência de calor, destilação, absorção e filtração, já entre as operações físico-químicas mais utilizadas temos craqueamento térmico, hidrogenações, tratamento com produtos químicos, etc.

São muitos os desafios enfrentados no dia-a-dia pelos engenheiros e operadores de uma petroquímica. Além de uma contínua preocupação com a segurança e o meio-ambiente, existe o dever de garantir a continuidade, confiabilidade operacional e otimização da planta eliminando pontos de engargalamento dos processos, maximizando a produção e minimizando os custos.

As indústrias buscam cada vez mais uma redução nos gastos energéticos, otimizando sistemas e processos de modo a produzir sempre o máximo possível gastando o mínimo de energia (eletricidade, vapor, etc). Essas reduções, além de ecológicamente corretas, trazem consigo ganhos financeiros e até mesmo melhorias na especificação dos produtos e nos índices de performance da empresa. Por essa razão estudos nessa área são constantemente efetuados nas grandes indústrias.

Dentro da cadeia petroquímica, os aromáticos leves BTX (benzeno, tolueno e xileno) são fundamentais para a síntese de inúmeros produtos e são provenientes de uma mistura de hidrocarbonetos definida pelas temperaturas inicial e final de destilação, denominada Nafta (composta basicamente por hidrocarbonetos com cadeias de carbono C5 a C10, predominantemente alifáticos). A Nafta é então submetida a uma operação de conversão de hidrocarbonetos alifáticos em aromáticos, que em seguida são separados em seus componentes aromáticos finais com alta pureza (benzeno, tolueno e xileno).

O foco deste trabalho é a construção da simulação de uma Unidade de Extração de BTX e posterior validação utilizando dados operacionais. A partir do modelo desenvolvido, objetiva-se a redução da temperatura do solvente, a qual facilitará a extração de aromáticos e possibilitará uma maior flexibilidade operacional da unidade. Além disso, a simulação de uma unidade petroquímica bem validada, possibilita futuros ajustes operacionais da unidade, de forma mais efetiva, mais rápida e com confiança, permitindo otimizar e obter

SIMULAÇÃO E MELHORIAS DE UMA UNIDADE DE EXTRAÇÃO DE AROMÁTICOS

resultados práticos de continuidade operacional, especificação dos produtos e ganhos de produção.

Outro objetivo do presente trabalho é a utilização de conhecimentos específicos adquiridos ao longo do curso de graduação em Engenharia Química, tais como: operações unitárias, modelagem e simulação de processos industriais. A prática sempre ajuda a consolidar os conhecimentos teóricos.

De forma a organizar uma leitura que facilite o entendimento de cada etapa envolvida neste trabalho, o texto foi dividido em seis capítulos:

O segundo capítulo apresenta uma rápida revisão bibliográfica sobre os assuntos discutidos nos capítulos posteriores, tais como destilação, extração líquido-líquido, eficiências teóricas e informações relevantes do sulfolane. O terceiro capítulo descreve a unidade de extração de BTX simulada. O quarto capítulo apresenta a simulação estática realizada da unidade, assim como sua validação. O quinto capítulo descreve as melhorias estudadas na unidade e por fim, no sexto capítulo são colocadas as conclusões do trabalho e as sugestões para novas linhas de pesquisa na área.

2. Fundamentos Teóricos e Revisão Bibliográfica

2.1 Destilação

A destilação, também denominada fracionamento ou destilação fracionada, é o método de separação mais usado na indústria química. Em 1984 foi estimado que o total de energia consumida pela indústria química e de petróleo dos Estados Unidos situava-se em torno de 2,9 milhões de barris de petróleo por dia. Deste total, ao redor de 30%, equivalente a 870 milhões de barris por dia, foi devido a processos de separação de misturas, sendo que a maior parte era consumida por processos de destilação. (BRAVO 1984 *et al.* Apud KELLER, 1987).

Esta operação se baseia na adição de calor a uma carga líquida (fornecimento de calor latente), gerando dessa forma uma fase vapor. Assim, no contato líquido-vapor, ocorre transferência de massa de uma fase a outra, de modo a aumentar a concentração do componente mais volátil no vapor e do componente menos volátil no líquido. (KISTER, 1992)

2.1.1 Conceitos de Eficiências

Na destilação, a maior separação possível com o uso de pratos é atingida quando a fase vapor e a fase líquida, que saem do mesmo prato, estão em equilíbrio termodinâmico (LOCKETT,1986). A este estágio, dá-se o nome de estágio ideal ou prato teórico, porém esse equilíbrio termodinâmico entre as fases é praticamente impossível de ser atingido numa coluna real. Utiliza-se então a definição de eficiência para aproximar o estágio de equilíbrio à situação real, que considera as não-idealidades do sistema.

Na literatura, há uma série de definições de eficiência de prato, dentre os quais destacam-se: eficiência global (E_{OC}), eficiência de ponto (E_{OG}), e eficiência de Murphree (E_{MV}).

2.1.1.1 Eficiência Global (E_{OC})

A eficiência global é a mais utilizada em simulações e projetos. É definida como a razão entre o número de estágios de equilíbrio (calculado para uma determinada separação - N_T) e o número de estágios reais necessários para efetuar a separação (N_R).

$$E_{OC} = \frac{N_T}{N_R} \quad (1)$$

Esta definição de Eficiência Global foi utilizada na simulação de duas colunas extratoras, no presente trabalho.

2.1.1.2 Eficiência de Ponto (E_{OG})

A eficiência de ponto (E_{OG}) considera a variação da composição de um dado componente (variação da composição real em relação à de equilíbrio) em apenas um ponto do prato, conforme apresenta a equação 3:

$$E_{OG} = \frac{y_n - y_{n+1}}{y_n^* - y_{n+1}} \quad (2)$$

Onde:

y_n = Valor de y no vapor deixando um ponto no prato n ;

y_{n+1} = Valor de y no vapor deixando um ponto no prato $n+1$;

y_n^* = Fração molar no vapor em equilíbrio com o líquido que deixa o prato n ;

Sabendo que a fração do componente em questão, num certo ponto do prato pode atingir no máximo o valor de equilíbrio, conclui-se que a eficiência de ponto é sempre inferior a 1.

2.1.1.3 Eficiência de Murphree (E_{MV})

A eficiência de Murphree (ou de prato) descreve a eficiência de um só estágio. A E_{MV} pode ser tanto definida na fase vapor que sobe para o prato superior, quanto na fase líquida que desce para o prato inferior. A Figura 2.1 mostra o contato entre as fases líquido e vapor num prato de uma coluna de destilação:

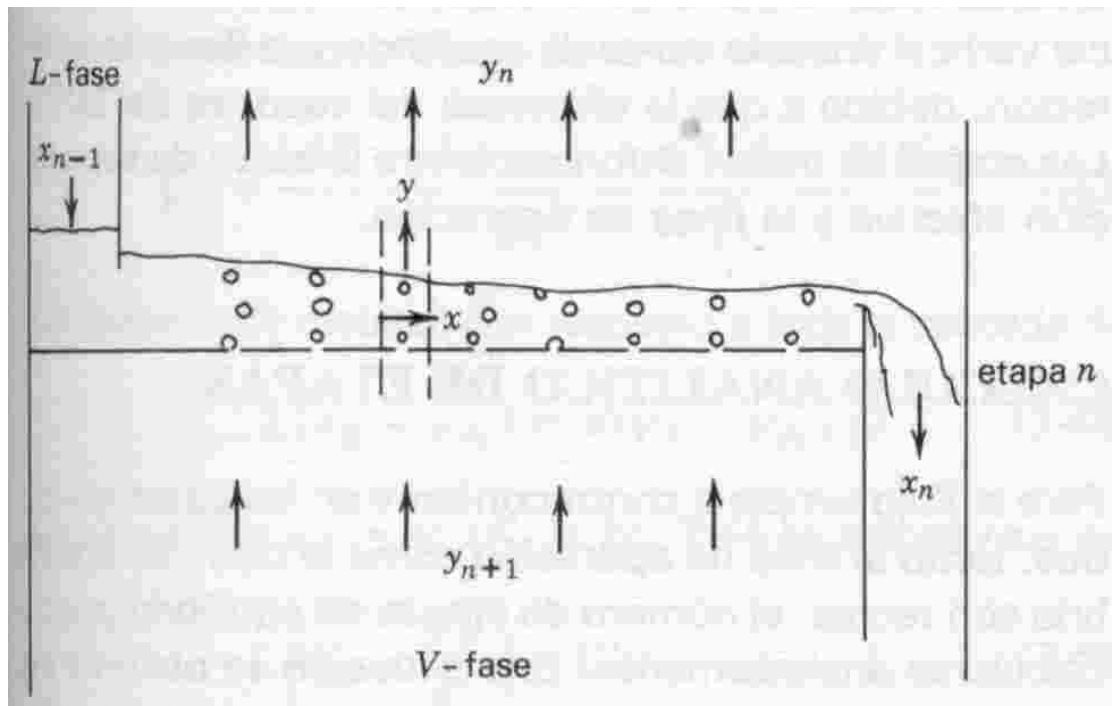


Figura 2.1: Contato líquido-vapor. Extraído de FOUST *et al* (1982)

Define-se, portanto, a eficiência de prato como a razão entre a variação na real composição da fase e a variação da composição da fase dada pela condição de equilíbrio.

$$E_{MV} = \frac{\bar{y}_n - y_{n+1}}{y_n^* - y_{n+1}} \quad (3)$$

Onde:

\bar{y}_n = Valor médio de y no vapor deixando o prato n ;

y_{n+1} = Valor de y no vapor deixando um ponto no prato $n+1$;

y_n^* = Fração molar no vapor em equilíbrio com o líquido que deixa o prato n ;

Essa equação é similar a equação da eficiência de ponto (equação 2), porém a concentração da mistura de vapor utilizada (que sai e entra no prato) é média.

2.2 Extração líquido-líquido

A separação de componentes de uma mistura homogênea é um problema frequentemente encontrado na indústria química. Uma das soluções mais comuns é a criação (ou adição) de uma segunda fase – solvente orgânico ou inorgânico, imiscível ou parcialmente miscível à solução original. Dessa forma, os diferentes componentes da mistura se distribuem entre as duas fases, de acordo com as condições de equilíbrio do sistema. À medida que os componentes são extraídos da mistura inicial, a fase solvente se transforma em extrato e a fase original em refinado. Esse processo é denominado Extração Líquido-Líquido, ou Extração por Solvente. (HANSON, 1975)

Essa operação é realizada em equipamentos de estágios ou de contato contínuo e na maioria dos casos é necessária uma segunda extração - ou destilação - para separar os componentes do extrato resultante. A Figura 2.2 ilustra a transferência de compostos de uma fase líquida para a outra fase líquida (solvente), em uma mistura imiscível:



Figura 2.0.2: Extração líquido-líquido

Utiliza-se a extração líquido-líquido nos seguintes casos: (HANSON, 1975)

- Os componentes da mistura homogênea são pouco voláteis, necessitando temperaturas muito altas e pressões muito baixas para a destilação;
- Os componentes a separar formam mistura azeotrópica;
- Os componentes possuem pontos de ebulição muito próximos, necessitando a construção de torres de destilação muito altas (necessidade de vários estágios de equilíbrio);
- Os componentes se degradam (decompõem) quando é atingida a temperatura de destilação;
- A fração do componente menos volátil que se quer separar é muito pequena. O custo para vaporizar toda a solução é muito alto;

2.2.1 Escolha do Solvente

Existem inúmeros princípios e parâmetros importantes a serem estudados ao escolher o melhor solvente para a operação de extração:

- 1) *Seletividade*: considerada uma das propriedades mais importantes na escolha do solvente. Este fator indica a facilidade do solvente de extrair um componente da solução, em relação aos demais. Assim como a volatilidade relativa em destilação, quanto maior a seletividade entre dois compostos, mais fácil é a separação por extração líquido-líquido.

$$\alpha(a, b) = \frac{X_a \cdot Y_b}{Y_a \cdot X_b} \quad (4)$$

X_a = Fração em peso do soluto a no refinado;

X_b = Fração em peso do soluto b no refinado;

Y_a = Fração em peso do soluto a no extrato;

Y_b = Fração em peso do soluto b no extrato;

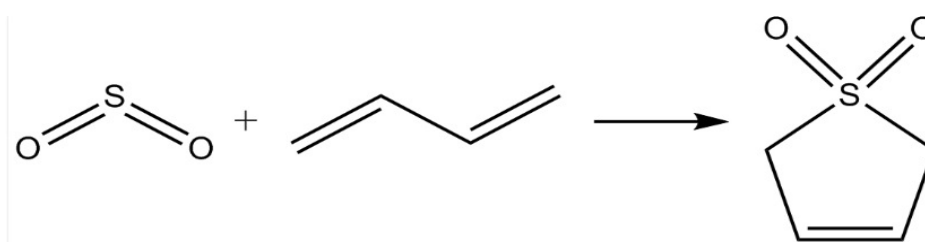
- 2) *Recuperabilidade do Solvente:* após extrair o soluto da carga, o solvente deve ser facilmente separado dos produtos resultantes da extração. O solvente recuperado é geralmente reutilizado no processo, após passar por uma destilação, com o objetivo de reduzir os custos operacionais da unidade. Por esse motivo, a volatilidade relativa da substância a ser separada em relação ao solvente deve ser alta (opta-se sempre por solventes menos voláteis), pois além de viabilizar a destilação, evitam-se perdas de solvente por vaporização no topo da coluna.
- 3) *Densidade:* a diferença de densidade das fases em contato é também importante e deve ser a maior possível, pois além de reforçar o contato entre as camadas imiscíveis, aumenta também o contato das fases líquidas com o equipamento – principalmente em equipamentos de contato contínuo.
- 4) *Tensão Interfacial:* a tensão interfacial entre as fases imiscíveis deve ser bem estabelecida, de preferência assumindo valores altos para uma rápida ação. No entanto, valores muito altos de tensão interfacial podem trazer dificuldades numa adequada dispersão de um líquido no outro e se muito baixos podem acarretar em formação de emulsões estáveis dentro do equipamento.
- 5) *Reatividade Química:* reações químicas entre solvente e componentes da carga resultam, na maior parte dos casos, em produtos indesejados na operação (ex.: polimerização, decomposição do solvente, etc). Por isso, escolhem-se solventes não reativos com os componentes presentes no processo.
- 6) *Corrosividade:* por razões econômicas, o solvente não pode causar danos de corrosão aos equipamentos.
- 7) *Pressão de Vapor:* a pressão de vapor do solvente proposto para a extração deve ser razoavelmente baixa, para viabilizar a operação à pressão atmosférica (ou moderadas pressões).
- 8) *Custos:* opta-se sempre por solventes mais baratos que respeitem os parâmetros citados acima.

De todas as propriedades descritas, as mais importantes para a escolha do solvente são: seletividade, tensão interfacial, densidade, reatividade química e custos. Essas cinco são fundamentais para a operação do processo. As demais propriedades devem ser vistas como considerações importantes, para redução de custos e bom funcionamento da extração.

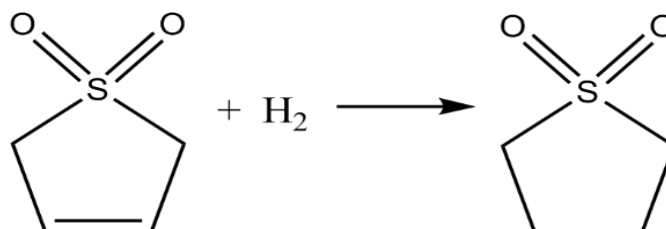
2.3 Sulfolano

A introdução do Sulfolano pela *Shell Oil Company* representa um dos mais importantes avanços industriais na produção de aromáticos em larga escala (HANSON, 1975).

Sulfolano ($C_4H_8O_2S$) é “2,3,4,5-tetraidrotiofeno-1,1-dióxido”, também conhecido como *tetrametileno sulfona*, é sintetizado a partir da reação de uma molécula de Dióxido de Enxofre (SO_2) com uma molécula de Butadieno (C_4H_6), formando Sulfoleno ($C_4H_6O_2S$):



O Sulfoleno é então hidrogenado a Sulfolano:



Anteriormente, o solvente mais utilizado para a separação de aromáticos e parafinas era o Dietilenoglicol ($C_4H_{10}O_3$), porém a substituição pelo Sulfolano trouxe muitas vantagens ao processo. Algumas delas são listadas a seguir:

SIMULAÇÃO E MELHORIAS DE UMA UNIDADE DE EXTRAÇÃO DE AROMÁTICOS

- Sulfolano é mais seletivo que Dietilenoglicol, exceto perto do “plait point”;
- A seletividade do Sulfolano é menos sensível a diferença de peso molecular entre aromáticos e parafinas;
- Os hidrocarbonetos são muito mais solúveis em sulfolano;
- As extrações com Sulfolano ocorrem em temperaturas mais baixas que com Dietilenoglicol ($T \sim 302^{\circ}\text{F}$);

3. Unidade de Extração de Aromáticos (Processo Sulfolano)

A Unidade de Extração de Aromáticos tem como objetivo a obtenção de um extrato aromático contendo Benzeno, Tolueno e Xileno, através do método Shell de extração por solvente sulfolano. Essa extração ocorre a partir do corte C6-C9 bihidrogenado, proveniente de uma Unidade de Hidrogenação de Gasolina de Pirólise (tratamento da gasolina de pirólise, cujo objetivo é obter uma fração de C6-C9, que contém os hidrocarbonetos aromáticos com 6, 7, 8 e 9 átomos de carbono). Esses componentes aromáticos são posteriormente separados na Unidade de Fracionamento de BTX. A Figura 3.1 apresenta o fluxograma simplificado do processo de extração de aromáticos Shell (*Sulfolane Process*):

Sulfolane Process

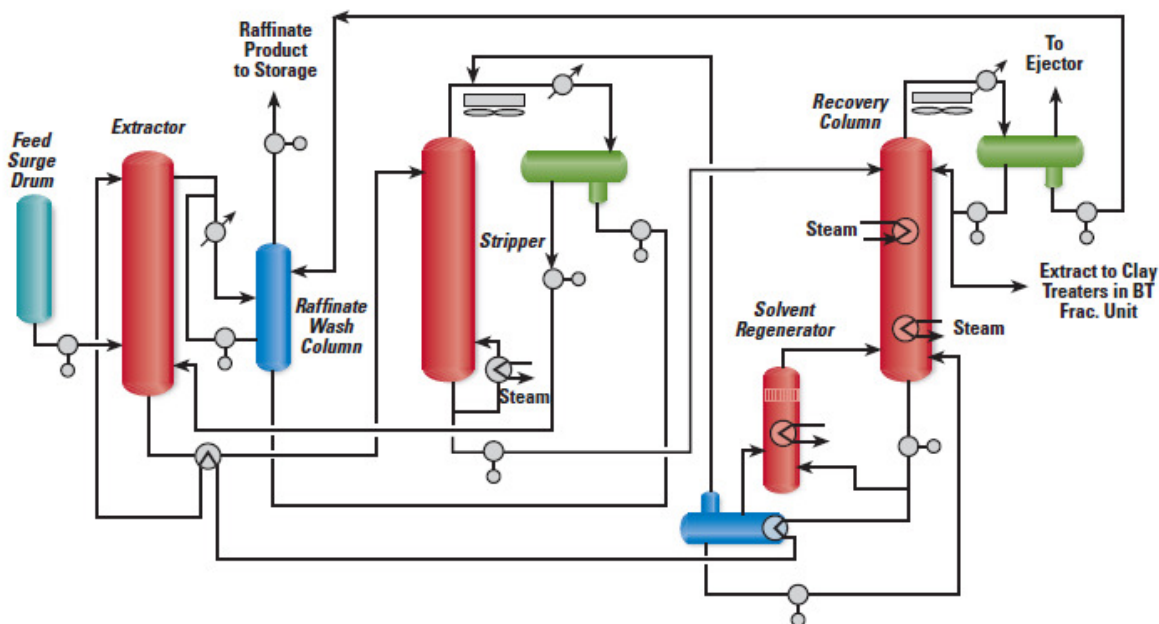


Figura 3.1: Processo de Extração com Sulfolane. Fonte: Shell Global Solutions Handbook

Verifica-se a partir da Figura 3.1 que a unidade de extração de aromáticos possui um total de seis colunas: duas colunas de extração (extratora e lavadora de refinado) e quatro colunas de destilação (stripper, recuperadora de solvente, retificadora de água e regeneradora de solvente). Maiores detalhes da unidade podem ser vistos no anexo 1.

3.1 Extratora - T01

O objetivo da extratora é extrair os aromáticos dos não-aromáticos, através do solvente sulfolane.

A carga entra na unidade diretamente na extratora, num prato de alimentação localizado na metade da coluna. O solvente, praticamente puro, entra pelo topo da extratora e flui descendente em contracorrente a carga, formando duas fases dentro da coluna. Devido à seletividade do solvente, os aromáticos e os não-aromáticos leves são miscíveis ao solvente e saem como extrato, no fundo da coluna. Já os não-aromáticos pesados saem como refinado, pelo topo da extratora, conforme ilustra a Figura 3.2:

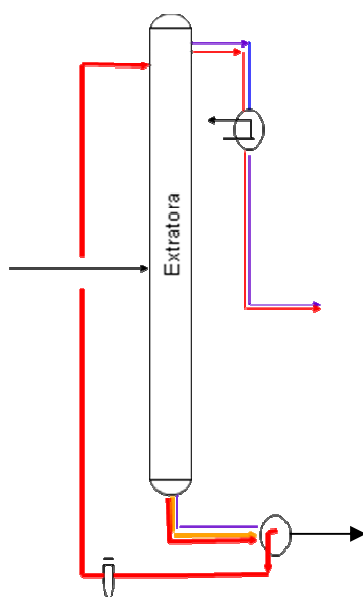


Figura 3.2: Esquema da coluna de extração T01

A extratora possui dois permutadores, um na corrente de topo e outro na corrente de fundo. O permutador de fundo da coluna esquenta o extrato resfriando o solvente, que segue para o topo da extratora. Após a troca térmica, o extrato é bombeado para a stripper. Já a corrente de topo (refinado) é resfriada e flui para a lavadora de refinado.

Além da carga, a extratora apresenta uma segunda alimentação (localizada em um prato inferior à alimentação original). Essa corrente de reciclo, proveniente do topo da

stripper, é rica em benzeno e em não-aromáticos leves e tem como objetivo aumentar a concentração de benzeno na extratora (reduzindo a concentração de não-aromáticos leves no extrato).

3.2 Lavadora de Refinado – T02

Após o refinado da extratora ser resfriado no permutador de topo (Figura 3.2), a corrente segue para a lavadora de refinado, que tem como principal objetivo remover o sulfolane em excesso dos não-aromáticos. A lavadora de refinado possui duas alimentações, conforme ilustra a Figura 3.3:

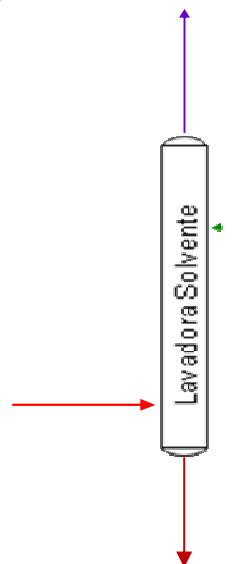


Figura 3.3: Esquema da coluna de extração T02

No fundo da coluna entra uma corrente composta de não-aromáticos e solvente, e pelo topo da coluna entra água, proveniente do vaso separador (tipo bota) localizado no topo da coluna recuperadora de solvente.

O refinado resultante, que é composto por C6-C9 não-aromáticos (produto secundário da unidade de extração), e o extrato (água rica e traços de solvente) é misturado com a água do vaso acumulador de topo da stripper e segue para a coluna retificadora de água para recuperar o seu conteúdo de sulfolane.

3.3 Coluna Retificadora (ou stripper) - T03

O solvente rico, retirado do fundo da extratora e aquecido pelo solvente pobre no permutador, é enviado para a coluna retificadora extrativa na qual ocorre o esgotamento parcial dos hidrocarbonetos não-aromáticos da corrente de solvente rico. A especificação do BTX em não aromáticos ocorre na T03. A carga que entra no topo da torre é composta de extrato do fundo da T01, conforme mostra a Figura 3.4:

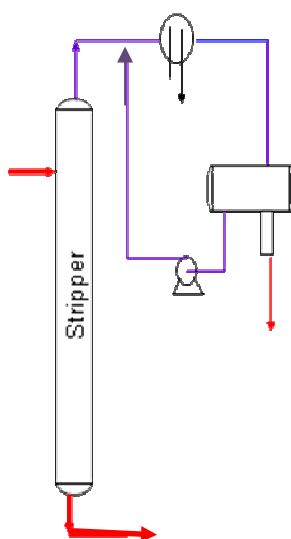


Figura 3.4: Esquema da coluna retificadora T03

Os vapores de topo da retificadora, contendo os hidrocarbonetos não-aromáticos esgotados do extrato combinam-se com os vapores de topo da retificadora de água e alimentam o vaso do coletor da stripper.

A corrente de fundo da retificadora, contendo extrato retificado e todo o solvente, com baixo teor de hidrocarbonetos não-aromáticos é enviada como carga para a recuperadora T04.

3.4 Recuperadora de Solvente – T04

A corrente de fundo da retificadora de extrato é enviada para a recuperadora de solvente, entrando na seção intermediária desta torre. Na seção inferior da torre entra vapor

de retificação (esgotamento) proveniente do fundo da retificadora de água. Essa coluna tem a função de separar os componentes aromáticos (destilado) do solvente (produto de fundo).

É importante salientar que a T04 opera numa pressão abaixo da atmosférica, pois dessa forma reduz-se o ponto de ebulição e conseqüentemente a degradação térmica do solvente.

O vapor de topo da coluna é condensado num permutador e após é coletado no vaso de refluxo, conforme ilustra a figura abaixo. Uma parte do produto aromático retorna à coluna como refluxo e a água retirada do fundo do vaso coletor é enviada ao topo da T02, onde é reutilizada para lavar o solvente (Figura 3.3). A Figura 3.5 mostra o esquema da recuperadora de solvente:

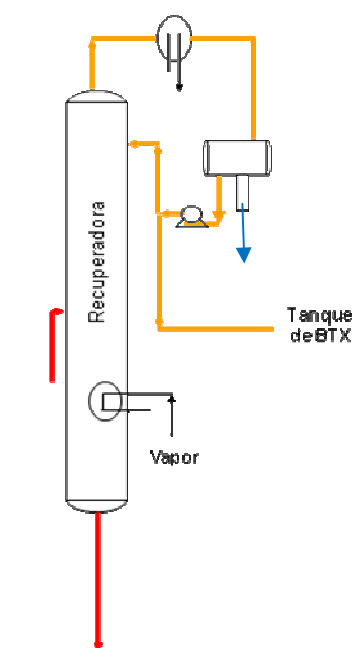


Figura 3.5: Esquema da recuperadora de solvente T04

3.5 Retificadora (ou stripper) de Água – T05

A torre retificadora de água fornece água e vapor de retificação (estripagem) livre de hidrocarbonetos não-aromáticos para a torre recuperadora.

A água de fundo da T02 combinada com a água da bota do vaso coletor da stripper (T03) entra no topo da retificadora de água. O vapor de topo contendo água e a maior parte de hidrocarbonetos não-aromáticos combina-se com o vapor de topo da T03.

O solvente recuperado vindo da lavadora de refinado (T02) que sai no fundo da T05 é enviado para a torre recuperadora de solvente (T04).

3.6 Regeneradora de Solvente – T06

A carga da regeneradora de solvente é uma corrente desviada do solvente circulante que sai do fundo da T04. A coluna regeneradora de solvente tem a função de remover da corrente de solvente circulante, produtos gerados pela degradação do mesmo. Usa-se vácuo e vapor na regeneradora de solvente (para reduzir a pressão parcial do sulfolane) visando a operação com temperaturas mais baixas e evitar a degradação do solvente.

O vapor de retificação da T05 é enviado para o regenerador de solvente. O vapor de topo do regenerador segue para a recuperadora de solvente.

4. Simulação e Validação

A partir de uma unidade industrial de extração de aromáticos, realizou-se uma simulação visando reproduzir no simulador os resultados obtidos na planta para então realizar melhorias e futuras otimizações a partir da simulação na unidade. Para isso, fez-se uso do software “Aspen Plus versão 2006”.

Neste capítulo, mostra-se a construção da simulação (pacotes termodinâmicos utilizados, flowsheet e metodologia) e em seguida a sua validação.

4.1 Modelo Utilizado na Simulação

A simulação foi realizada com um pacote termodinâmico desenvolvido especialmente para o processo de extração de aromáticos, criado pelo Research Institute of Petroleum Processing (RIPP) e adaptado pela SINOPEC, Instituto de Pesquisa de Processamento de Petróleo da China, para que fosse possível sua utilização em conjunto com a Aspen Technology Inc.'s no simulador comercial Aspen Plus.

Neste pacote, a não idealidade da fase vapor foi representada pela Equação Virial com o Segundo Coeficiente, B_{ij} , calculado através da equação de Tsonopoulos. Para a fase líquida foi utilizado o modelo NRTL modificado, ambos com parâmetros ajustados a partir de dados experimentais.

O modelo utilizado para o Coeficiente de Atividade é uma modificação do NRTL (Non-Random, Two-Liquid) proposto por Renon e Prauniz (1968) em que seu terceiro parâmetro, α_{ij} , foi fixado em $-1,0$. Esta aproximação facilita o cálculo do coeficiente de atividade para o tipo de sistema estudado. Este modelo foi denominado Local Effective Mole Fraction (LEMF) e é representado pelo conjunto de equações mostrado a seguir: (MARINA et al, 1973)

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_j x_j S_{ji} G_{ji}}{\sum_k x_k G_{ki}} + \sum_j \frac{x_j G_{ij}}{\sum_k x_k G_{kj}} \left(S_{ij} - \frac{\sum_m x_m S_{mj} G_{mj}}{\sum_k x_k G_{kj}} \right) \quad (5)$$

$$G_{ij} = \exp(-\alpha_{ij} S_{ij})$$

$$S_{ij} = a_{ij} + b_{ij} / T$$

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ji} = -1.0$$

γ_i = Coeficiente de Atividade do componente *i*

x_i = Fração molar do componente *i*

a_{ij}, b_{ij} = Parâmetros do modelo LEMF

T = Temperatura absoluta

4.2 Construção da Simulação

Para a validação da simulação, foram levantados dados operacionais de uma unidade industrial de extração de BTX e realizou-se também um balanço de massa por componente em torno da unidade. Para isso, escolheu-se um dia em que a unidade mantinha-se em estado estacionário (ou seja, sem variações na carga, reciclos, refluxos, etc). A Tabela 4.1 apresenta os componentes presentes na unidade:

Tabela 4.1: Componentes presentes na unidade e na simulação

Aromáticos	Naftênicos	Parafínicos	Solventes
Benzeno	Ciclopentano	n-butano	Sulfolane
Tolueno	Metilciclopentano	n-pentano	Água
Etilbenzeno	Ciclohexano	n-hexano	-
p-xileno	Dimetilciclopentano	n-heptano	-
m-xileno	Metilciclohexano	n-octano	-
o-xileno	Dimetilciclohexano	n-nonano	-
Trimetilbenzeno	-	n-decano	-

SIMULAÇÃO E MELHORIAS DE UMA UNIDADE DE EXTRAÇÃO DE AROMÁTICOS

Segundo a Tabela 4.1, existem quatro diferentes grupos químicos adicionados à simulação: aromáticos, naftênicos, parafínicos e solventes. É importante observar que, na prática, há outros hidrocarbonetos presentes na carga da unidade, porém realizou-se um agrupamento dos componentes, de acordo com o número de átomos de carbono e com a função estrutural (a carga da unidade é composta por cerca de 100 componentes, portanto, esse agrupamento facilita a simulação).

O fluxograma configurado para a simulação pode ser observado na Figura 4.1:

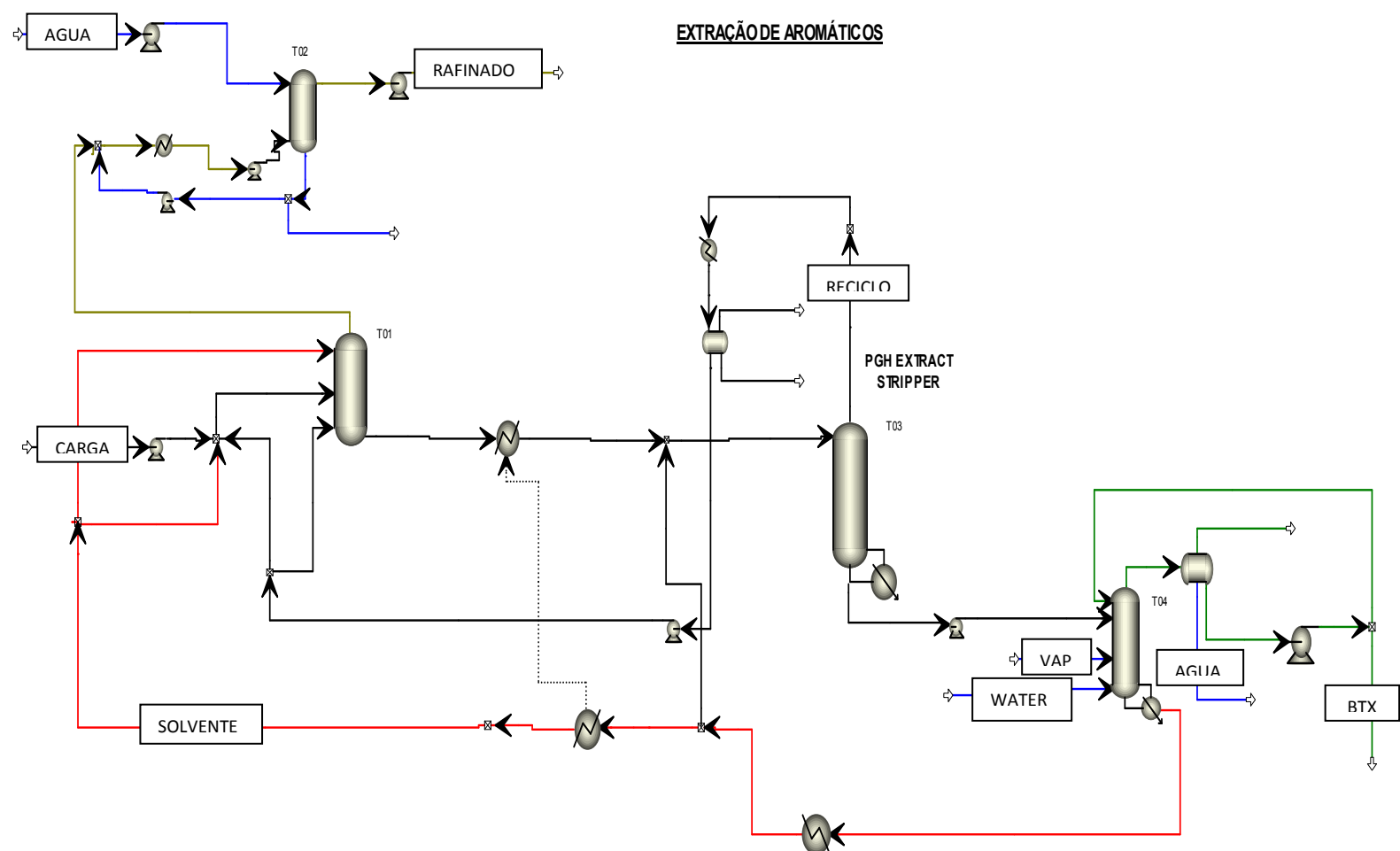


Figura 4.1: Componentes presentes na simulação

As cores das correntes da simulação representam:

- **Azul:** Água (correntes ricas em água);

SIMULAÇÃO E MELHORIAS DE UMA UNIDADE DE EXTRAÇÃO DE AROMÁTICOS

- **Vermelho:** Solvente (correntes ricas em solvente);
- **Verde:** Aromáticos (BTX);
- **Marron:** Não aromáticos;

Conforme apresentado no capítulo anterior, a unidade é composta por seis colunas (duas de extração e quatro de destilação). Para facilitar a construção da simulação, duas colunas foram excluídas da simulação: a retificadora de água (T05) e a regeneradora de solvente (T06) foram substituídas pelas correntes de entrada VAP e WATER na recuperadora de solvente (T04).

A corrente WATER é composta por água (97% em massa) e solvente (3% em massa). A taxa mássica dessa corrente é 2,2 ton/h e a temperatura é de 100°C. A corrente VAP apresenta a mesma composição e taxa mássica da corrente WATER, porém uma temperatura de 180°C. Ambas correntes alimentam o prato de fundo da recuperadora de solvente.

A unidade de extração de BTX recebe uma carga proveniente de uma unidade de bihidrogenação da gasolina de pirólise, de composição especificada conforme mostra a Tabela 4.2 (maiores detalhes podem ser vistos nos anexos):

Tabela 4.2: Carga da unidade de BTX simulada

Carga	Dados de Planta	
	% massa	Kg/h
Parafínicos	10,30	4366
Aromáticos	74,40	31527
Naftênicos	15,30	6484
Solventes	0,00	0
Total	100,00	42377

Portanto, 74,4% da carga é composta de aromáticos. Essa aromaticidade não pode ultrapassar o valor de 80% a fim de evitar formação de uma única fase dentro da coluna (o que prejudica o processo de extração).

SIMULAÇÃO E MELHORIAS DE UMA UNIDADE DE EXTRAÇÃO DE AROMÁTICOS

As principais características das colunas de extração utilizadas nessa simulação encontram-se na Tabela 4.3:

Tabela 4.3: Condições de operação das colunas de extração

Condições	T01	T02
Número de pratos teóricos	24	2
Prato de carga teórico	13 e 24	1 e 2
Vazão total de solvente (ton/h)	160,5	3,6
Vazão do Reciclo (ton/h) para a 22T01	24	-
Reciclo total para 22T01 (ton/h)	28	-
Vazão de reciclo de água para a 22T02 (ton/h)	-	3,5
Temperatura do solvente primário (°C)	93	-
Pressão no topo (kgf/cm ² abs.)	5	3,1
Pressão no fundo (kgf/cm ² abs.)	8	4,6

Conforme apresenta a Tabela 4.3, a coluna T01 possui 24 estágios de equilíbrio e recebe a carga no prato 13 (essa coluna também tem uma segunda alimentação no fundo da coluna – reciclo da T03). O solvente entra no topo da T01 com uma temperatura de 93°C e a diferença de pressão entre o topo e o fundo é de 3 kgf/cm².

Já a coluna T02 é representada no simulador com apenas 2 estágios de equilíbrio, recendo carga no topo (água) e no fundo (refinado da T01). Essa coluna possui um reciclo no fundo, ou seja, 3,5 ton/h do extrato da T02 volta para a alimentação, controlando dessa forma a perda de solvente pela corrente de topo.

Na Tabela 4.4, as principais características das colunas de destilação são apresentadas:

Tabela 4.4: Condições de operação das colunas de destilação

Condições	T03	T04
Número de pratos	30	30
Prato de carga	1	16
Eficiência de Murphree por estágio (%)	50-75	50-75
Vazão de refluxo (kg/h)	-	15,5
Pressão no topo (kgf/cm ² abs.)	2,4	1,22
Pressão no fundo (kgf/cm ² abs.)	2,84	1,76

SIMULAÇÃO E MELHORIAS DE UMA UNIDADE DE EXTRAÇÃO DE AROMÁTICOS

A stripper (T03) tem 30 estágios de equilíbrio, a alimentação entra pelo topo – prato 1 - não possui condensador, apenas um refeedor termosifão e a eficiência utilizada na simulação é a Eficiência de Murphree. Os pratos de topo possuem uma eficiência mais elevada, da ordem de 75%, já os pratos de fundo possuem uma eficiência mais baixa, da ordem de 50%.

Por fim, a recuperadora de solvente também tem 30 estágios de equilíbrio. A alimentação da coluna ocorre no prato 16 e a vazão de refluxo é de 15,5 ton/h. Esse refluxo é responsável pela especificação da corrente de topo de BTX em solvente.

A simulação apresentou inicialmente alguns problemas de convergência, necessitando a criação de alguns blocos de convergência (dessa forma a simulação ocorre na sequência desejada, sendo possível contornar tais problemas).

4.3 Validação da Simulação

Após prover todas informações ao simulador e contornar alguns problemas de convergência encontrados ao longo da simulação, obtiveram-se os seguintes valores para a corrente de produtos BTX, ilustrados na Tabela 4.5:

Tabela 4.5: Validação da corrente de BTX

BTX	Dados de Planta		Resultados da Simulação	
	% massa	Kg/h	% massa	Kg/h
Parafínicos	0,08	25	0	0,99
Aromáticos	99,8	31292	99,8	31357
Naftênicos	0,0913	27	0,0610	19
Solventes	0	0	0,0910	27
Total	100	31346	100	31405

A corrente de BTX na simulação apresenta praticamente o mesmo teor de aromáticos e não-aromáticos que o resultado das análises da planta. Os 27Kg/h de água na corrente de BTX que a simulação apresenta não é considerado erro de simulação. O analisador utilizado para determinar a quantidade de hidrocarbonetos no topo da T04 não

detecta água. Portanto, tem-se realmente na planta uma pequena parcela de água na corrente final de BTX, que na prática não é determinada.

A recuperadora de solvente possui quatro medidores de temperatura entre o topo e o fundo. Portanto, para conferir os resultados encontrados na Tabela 4.5, analisou-se também o perfil de temperatura da recuperadora de solvente. Abaixo, a Figura 4.2 apresenta o perfil de temperatura ao longo da T04:

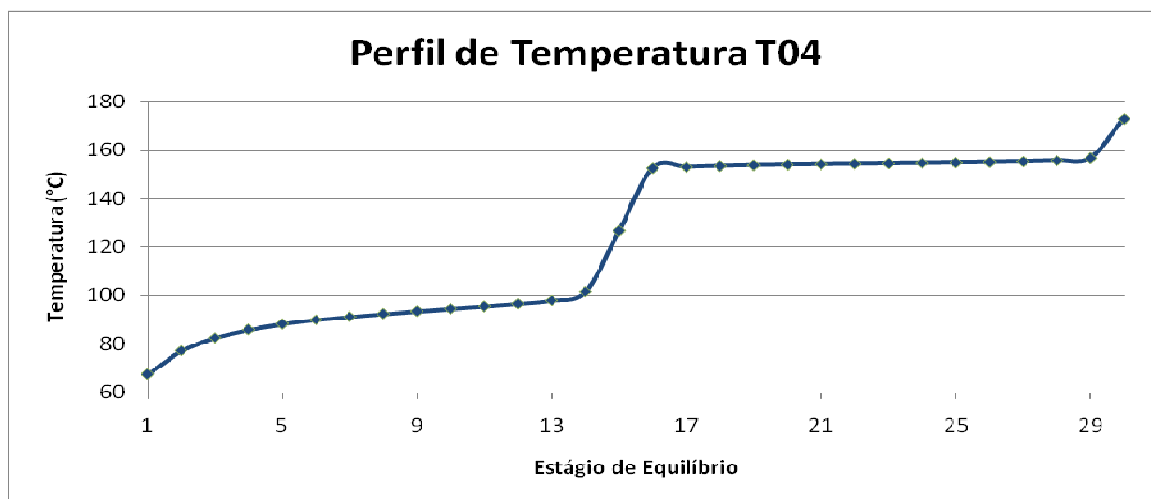


Figura 4.2: Perfil de temperatura da recuperadora de solvente

Compararam-se então os resultados do perfil de temperatura da simulação (Figura 4.2), com os valores indicados nos medidores de planta, conforme mostra a Tabela 4.6:

Tabela 4.6: Comparação dados de planta com dados de simulação

Estágio	T04	
	Planta (°C)	Simulação (°C)
2	76,3	77,1
7	91,8	91,2
21	147	154
30	176,4	173

Considerou-se na simulação o condensador como estágio 1. O medidor de temperatura presente no topo da coluna (ou seja, no segundo estágio de equilíbrio) indica

SIMULAÇÃO E MELHORIAS DE UMA UNIDADE DE EXTRAÇÃO DE AROMÁTICOS

uma temperatura muito próxima ao resultado da simulação. Nos estágios 21 e 30 o valor simulado apresenta um pequeno desvio em relação aos indicadores da planta, porém atribuí-se esse desvio aos erros de medidas, associados aos medidores e também aos erros de simulação.

A Tabela 4.7 apresenta os resultados da simulação referente à corrente de refinado, produto de topo da lavadora de refinado:

Tabela 4.7: Validação da corrente de Refinado

Refinado	Dados de Planta		Resultados da Simulação	
	% massa	Kg/h	% massa	Kg/h
Parafínicos	39,82	4395	39,56	4365
Aromáticos	1,03	113	1,86	205
Naftênicos	59,15	6530	58,57	6463
Solventes	0,00	0	0,00	0
Total	100,00	11039	100,00	11034

Conforme indica a Tabela 4.7, a simulação apresenta uma taxa de aromáticos um pouco mais elevada na corrente de refinado que os dados de planta. Já os parafínicos e os naftênicos estão bem próximos das análises realizadas na planta. Resultados detalhados estão disponíveis nos anexos 2, 3 e 4 deste trabalho.

5. Melhorias

Após a validação da simulação, conforme apresentado no capítulo anterior, duas modificações foram estudadas na unidade, a fim de melhorar o desempenho operacional do processo, especificação dos produtos e ganhos operacionais.

Neste capítulo será mostrado como a temperatura e a taxa mássica de solvente primário da extratora T01 afeta a perda de aromáticos no refinado (obtida pela soma do teor de aromáticos nesta corrente) e a pureza do BTX (obtida pela soma de não-aromáticos na corrente de BTX produto).

Essas análises foram realizadas usando os dados considerados na validação da simulação. É importante lembrar que para outro conjunto de condições operacionais (composição da carga diferente, taxa de reciclo mais elevada, etc) os resultados podem ser diferentes dos encontrados neste trabalho, e que para cada análise realizada foram mantidas as variáveis no valor original, alterando apenas aquela em estudo.

5.1 *Temperatura do Solvente*

A temperatura de operação da extratora T01 depende unicamente da temperatura de entrada do solvente circulante (solvente primário), pois a única fonte de calor da coluna de extração T01 é o solvente primário quente (93°C). A carga desta coluna entra à temperatura ambiente. A temperatura do solvente primário tem influência definida em duas variáveis de processo: solubilidade dos hidrocarbonetos e seletividade do solvente em relação aos aromáticos e não-aromáticos.

Em temperaturas elevadas, as solubilidades (tanto dos aromáticos como dos não-aromáticos) aumentam, mas a seletividade do solvente em relação aos não-aromáticos diminui. Já em temperaturas baixas a seletividade em relação aos aromáticos aumenta, mas a solubilidade dos aromáticos e não-aromáticos diminui.

SIMULAÇÃO E MELHORIAS DE UMA UNIDADE DE EXTRAÇÃO DE AROMÁTICOS

Como a seletividade do sulfolane para a dissolução dos aromáticos em relação aos não-aromáticos é maior em temperaturas mais baixas, uma redução da temperatura de entrada do solvente reduz significativamente os componentes não-aromáticos no extrato, melhorando assim a pureza do extrato.

A Figura 5.1 ilustra o efeito da temperatura no equilíbrio dos componentes presentes na extratora:

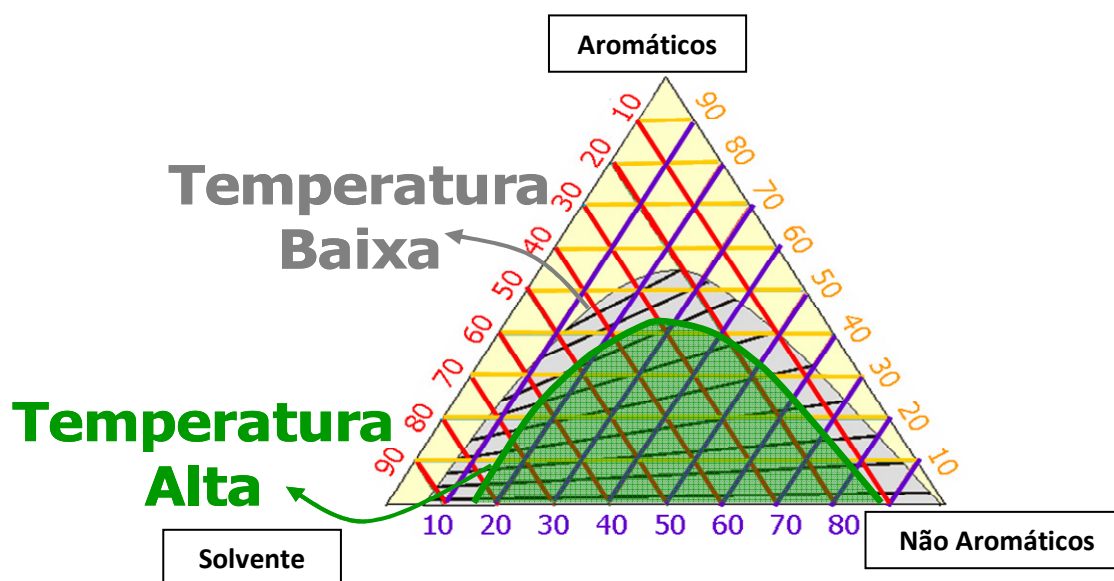


Figura 5.1 : Diagrama trifásico dos componentes da extratora. Fonte: UOP

Com a redução da temperatura na extratora T01, o solvente rico carrega menos não-aromáticos, facilitando a operação da stripper T03, pois uma menor quantidade de não-aromáticos precisará ser destilada pelo topo. Assim, o reciclo fica mais rico em aromáticos o que favorece a extração. A Tabela 5.1 mostra as concentrações dos hidrocarbonetos na corrente BTX produto (topo da T04) em relação à temperatura:

Tabela 5.1: Variação dos componentes na corrente BTX produto (kg/h) com a redução da temperatura

Temperatura (°C)	93	82	72	62	52	45
Parafínicos	0,99	0,45	0,42	0,22	0,21	0,19
Aromáticos	31357,85	31335,20	31318,95	31283,82	31271,61	31263,46
Naftênicos	19,88	12,72	12,66	10,47	10,51	10,44
Solventes	27,49	53,11	54,62	76,04	76,71	78,03
Total	31406,22	31401,48	31386,66	31370,54	31359,04	31352,13

Conforme a Tabela 5.1, a taxa mássica de não-aromáticos na corrente BTX reduz com a redução da temperatura, ou seja, a corrente fica mais pura em BTX. Observa-se também um aumento na perda de solvente (sulfolane), porém a recuperadora de solvente, nas atuais condições de operação, é superespecificada em relação à perda de sulfolane no topo da T04, tornando aceitável esse aumento na concentração de solvente no produto BTX.

A Figura 5.2 ilustra a redução de não aromáticos na corrente BTX com a redução da temperatura:

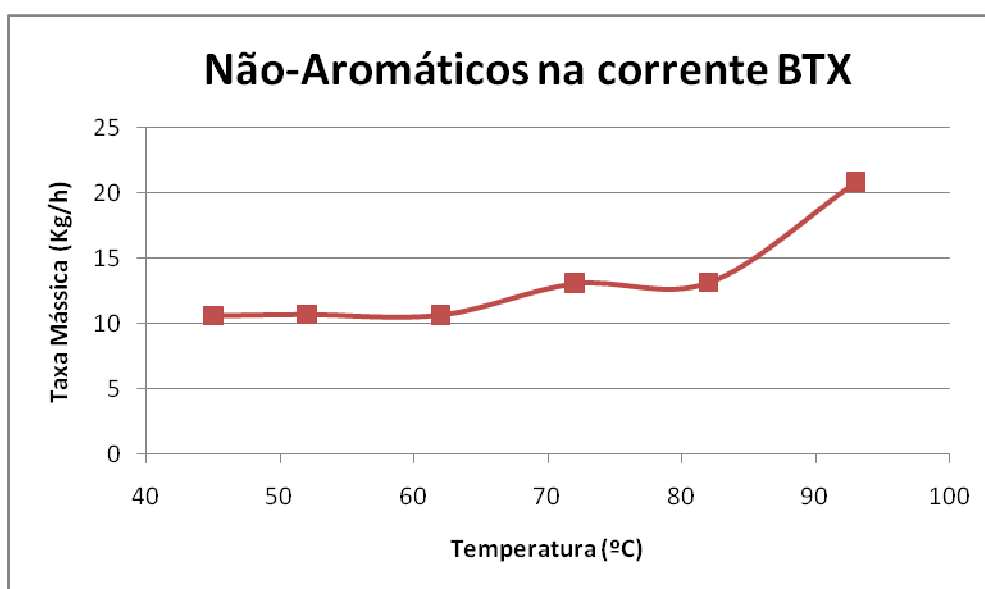


Figura 5.2: Taxa mássica de não-aromáticos no BTX produto versus temperatura

De forma similar, analisaram-se as perdas na corrente de refinado. A Tabela 5.2 apresenta as taxas mássicas em diferentes temperaturas:

SIMULAÇÃO E MELHORIAS DE UMA UNIDADE DE EXTRAÇÃO DE AROMÁTICOS

Tabela 5.2: Variação dos componentes na corrente Refinado (Kg/h) com a redução da temperatura

Temperatura (°C)	93	82	72	62	52	45
Parafínicos	4365,62	4365,72	4366,25	4365,82	4365,92	4365,62
Aromáticos	205,73	236,09	253,51	289,57	301,43	313,38
Naftênicos	6463,39	6468,22	6470,70	6474,44	6474,61	6474,95
Solventes	0,06	0,23	0,23	0,38	0,38	0,39
Total	11034,81	11070,26	11090,70	11130,21	11142,34	11154,34

Observa-se na Tabela 5.2 um aumento de aromáticos no refinado, ou seja, aumento na perda de produto. Essa perda ocorre devido à redução da solubilidade de aromáticos (e não-aromáticos) no solvente com a redução da temperatura. A Figura 5.3 ilustra esse aumento em relação à temperatura:

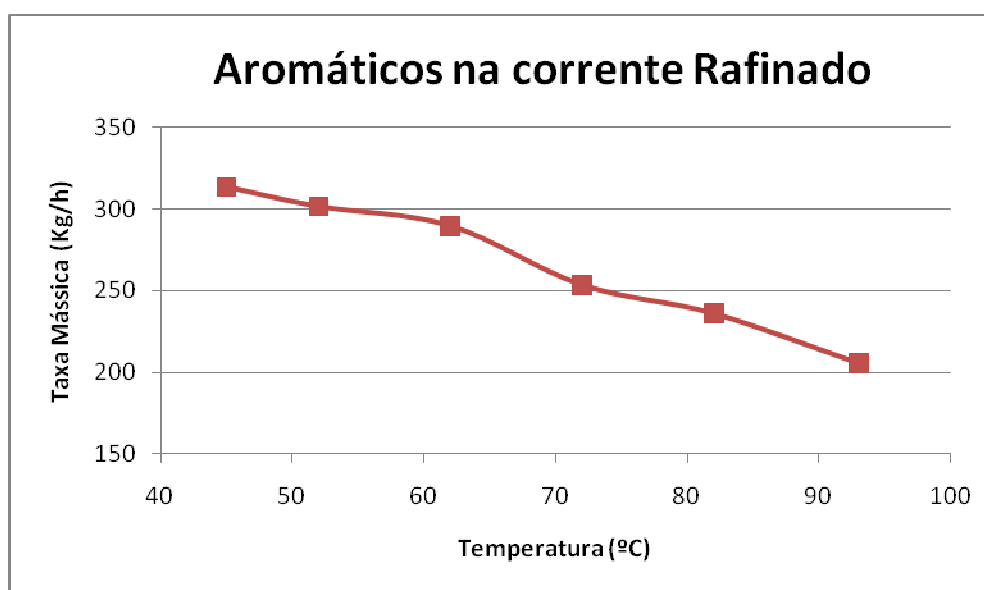


Figure 5.3: Taxa mássica de aromáticos no Refinado produto

Portanto, a redução da temperatura melhora a pureza do BTX produto, porém aumenta a perda de aromáticos no refinado, o que levaria à não viabilidade do projeto em estudo (pois reduzir a temperatura para perder aromáticos reduziria também a rentabilidade do processo). Por esse motivo, estudou-se o comportamento da taxa mássica de solvente primário na extratora, assunto desenvolvido no próximo item deste capítulo.

5.2 Taxa Mássica de Solvente Primário

A unidade de extração de aromáticos opera com 160,5 ton/h de solvente circulando pela unidade. Ao sair da recuperadora de solvente (T04) e passar pelo trocador de calor para atingir a temperatura de operação, parte do solvente entra no topo da extratora T01 (denominado solvente primário) e parte do solvente entra diretamente na carga da unidade (denominado solvente terciário), visando solubilizar antes mesmo de entrar na coluna os aromáticos.

No entanto, a vazão de solvente primário é um dos fatores utilizados para o controle e especificação de aromáticos na corrente de refinado. Quando essa vazão é baixa e o solvente não consegue solubilizar os hidrocarbonetos da carga, uma redução da temperatura implica em uma redução da recuperação de aromáticos. Quando essa vazão é alta e o solvente consegue solubilizar os hidrocarbonetos da carga, uma redução da temperatura implica em uma maior recuperação dos aromáticos.

Após a redução da temperatura de operação da extratora a 45°C, fez-se uma análise de sensibilidade da vazão de solvente primário em relação ao teor de aromáticos no refinado produto. A Figura 5.4 apresenta a sensibilidade da taxa de aromáticos na corrente de refinado, com a variação da taxa de solvente primário na extratora:

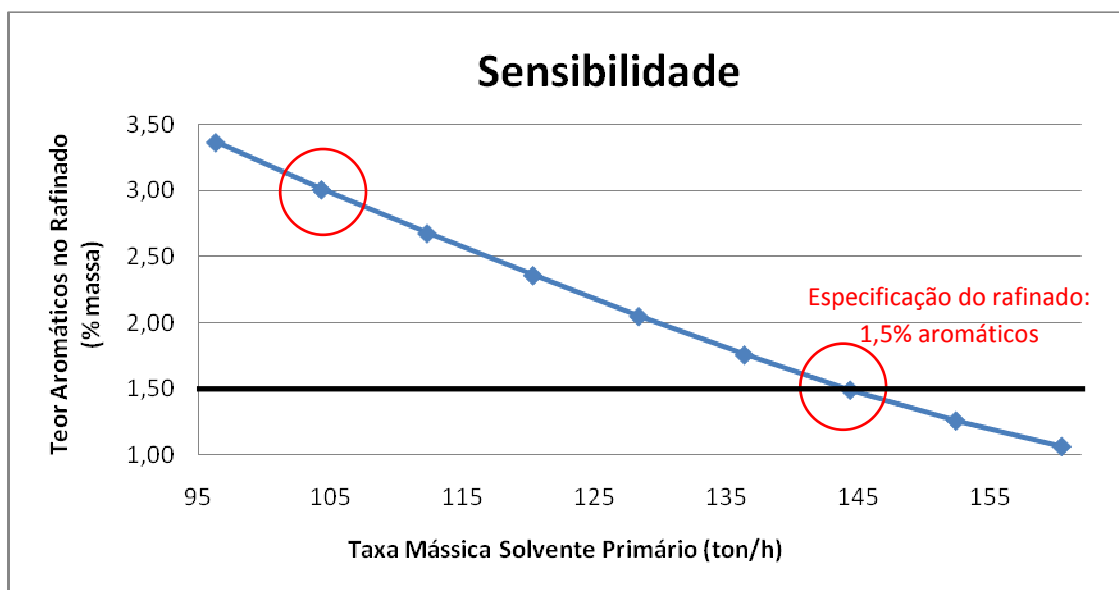


Figura 5.4: Taxa mássica de aromáticos no Refinado produto

SIMULAÇÃO E MELHORIAS DE UMA UNIDADE DE EXTRAÇÃO DE AROMÁTICOS

Conforme a Figura 5.4, uma maior taxa de solvente primário na extratora resulta em uma redução de aromáticos no refinado produto.

Desta forma, para compensar a redução da solubilidade do sulfolane decorrente da redução de temperatura de operação, é necessário aumentar a vazão de solvente para solubilizar os aromáticos excedentes, impedindo-os de sair pelo topo da T01 junto com os não-aromáticos.

Dessa forma, deve-se aumentar em 22% a taxa mássica de solvente primário (operar com 135 Kg/h entrando no topo da extratora).

A Tabela 5.3 apresenta o balanço de massa da corrente de produto BTX:

Tabela 5.3: Comparação entre composição da simulação inicial e após melhorias na corrente BTX

BTX	Simulação		Projeto	
	% massa	Kg/h	% massa	Kg/h
Parafínicos	0,00	0,99	0,00	0,18
Aromáticos	99,85	31357,60	99,80	31407,37
Naftênicos	0,06	19,88	0,00	10,32
Solventes	0,09	27,52	0,20	27,60
Total	100,00	31405,99	100,00	31445,46

Os valores abaixo da linha “Simulação” são aqueles apresentados na validação, no capítulo anterior. Já os valores abaixo da linha “Projeto” mostram os resultados da modificação na simulação validada. O objetivo da Tabela 5.3 é comparar os ganhos na corrente de BTX produto.

Com a redução da temperatura e aumento da vazão de solvente primário (caso projeto), tem-se uma redução no teor de não-aromáticos, acompanhado de um aumento no teor de aromáticos.

A Tabela 5.4 mostra a composição final da corrente de refinado produto:

SIMULAÇÃO E MELHORIAS DE UMA UNIDADE DE EXTRAÇÃO DE AROMÁTICOS

Tabela 5.4: Comparação entre composição da simulação inicial e após melhorias na corrente Refinado

Refinado	Simulação		Projeto	
	% massa	Kg/h	% massa	Kg/h
Parafínicos	39,56	4365,66	39,70	4366,49
Aromáticos	1,86	205,76	1,49	164,62
Naftênicos	58,57	6463,20	58,81	6474,47
Solventes	0,00	0,07	0,00	0,34
Total	100,00	11034,70	100,00	11005,92

Da mesma forma que a corrente de BTX, o refinado produto fica com uma pureza maior, ou seja, apresenta uma redução no teor de aromáticos.

6. Conclusão

O presente trabalho teve como objetivo alinhar sustentabilidade com rentabilidade, propondo soluções de redução das perdas de produto e energia. A unidade estudada, construída na década de 80, possui até hoje gargalos energéticos que através de novas tecnologias e deste presente estudo poderão ser corrigidas nos próximos anos.

A redução da temperatura do solvente utilizado na extração de aromáticos da corrente de C5-C9 possibilitará uma maior seletividade na extratora, implicando em uma melhor especificação dos produtos (refinado e BTX). Este ganho pode ser visto como uma redução do consumo energético, pois para a mesma quantidade de carga C5-C8, recupera-se mais produtos que possuem um valor agregado.

Com uma maior recuperação de BTX na unidade de extração de aromáticos, conseqüentemente, há uma maior recuperação de Benzeno, Tolueno e Xilenos na unidade de fracionamento de BTX. Dessa forma, a relação energia/petroquímico tende a diminuir com o aumento da produção de petroquímicos.

Além disso, a simulação validada poderá ser utilizada futuramente, em estudos de aumento de carga, redução de pressão e utilidades na unidade, facilitando o trabalho dos engenheiros de processo e produção da planta. Com a redução da temperatura do solvente, a coluna T03 pode ser ainda otimizada. A alimentação da stripper, após as otimizações estudadas neste trabalho, ficou mais rica em aromáticos e mais pobre em não-aromáticos, o que facilita a separação dos componentes.

A próxima etapa do estudo será reduzir a pressão de operação da T03, visando uma redução de energia da unidade, foco inicial do trabalho. Também será estudado o aumento do número de pratos da extratora T02, com o objetivo de reduzir as perdas de produto na corrente de água (fundo da T02).

Este trabalho é apenas um primeiro passo realizado nesse novo contexto econômico mundial. Os estudos de melhorias em processos já existentes tende cada vez mais a aumentar nas grandes petroquímicas junto com o desenvolvimento de novas tecnologias.

7. Referências Bibliográficas

1. FOUST, A.S.; WENZEL, L.A; CLUMP, C.W; MAUS, L.; ANDERSEN, L.B *Princípios das operações unitárias*. 2 ed. Rio de Janeiro. Ed. LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 1982
2. SMITH, B.S. *Design of equilibrium stage processes*. 1 ed. New York. Ed. Editorial Advisory Board, 1963;
3. CHAUVEL, A.; LEFEBVRE, G.; RAIMBAULT, C. *Production d'oléfines et d'aromatiques. Le vapocraquage et les BTX*. 1 ed. Paris. Ed. Éditions Technip et Institut Français du Pétrole, 1980;
4. ROSE, L.M. *Distillation design in practice*. 1 ed. New York. Ed. Elsevier Science Publishing Company INC., 1935;
5. KISTER, H.Z. *Distillation – design*. 1 ed. New York. Ed. McGraw-Hill, 1992;
6. KISTER, H.Z. *Troubleshoot Distillation Simulations*. Chemical Engineering Progress, p.63, 1995
7. UOP *Shell Sulfolane Process Technology Training Manual*, 1995;
8. MARINA, J. M.; TASSIOS, D. T. *Prediction of Ternary Liquid-Liquid Equilibrium from Binary Data*. Ind. Eng. Chem. Process. Des. Develop., Vol.12, N.3, p.271, 1973;
9. HANSON, C. *Recent Advances in Liquid-Liquid Extraction*. Oxford. Ed. Pergamon Press, 1971;

ANEXO 2: VALIDAÇÃO DA SIMULAÇÃO - CARGA

	<i>Dados Planta</i>		<i>Dados Simulação</i>	
	Carga		PGH-02	
	% Carga	Kg/h	% Carga	Kg/h
	42,3 ton/h		42,3 ton/h	
Parafínicos	10,30	4366,35	10,30	4366,33
n-Butano	0,00	0,00	0,00	0,00
n-Pentano	0,50	210,98	0,50	211,15
n-Hexano	5,75	2438,42	5,75	2438,41
n-Heptano	2,08	879,97	2,08	879,80
n-Octano	0,91	384,53	0,91	384,57
n-Nonano	0,75	318,38	0,75	318,42
n-Decano	0,32	134,07	0,32	133,98
Naftênicos	15,30	6484,83	15,30	6485,27
Ciclopentano	0,61	258,26	0,61	258,22
Metilciclopentano	6,97	2952,23	6,97	2952,30
Dimetilciclopentano	2,40	1017,98	2,40	1018,02
Ciclohexano	1,76	747,77	1,76	747,93
Metilciclohexano	1,86	786,73	1,86	786,94
Dimetilciclohexano	1,70	721,86	1,70	721,86
Aromáticos	74,39	31526,82	74,39	31526,39
Benzeno	38,84	16458,37	38,84	16458,34
Tolueno	19,67	8337,71	19,67	8337,50
Etilbenzeno	7,12	3017,65	7,12	3017,60
p-Xileno	0,96	406,23	0,96	406,19
o-Xileno	1,59	675,56	1,59	675,43
m-Xileno	3,57	1512,20	3,57	1512,40
1,2,4-Trimetilbenzeno	2,64	1119,11	2,64	1118,93
Solventes	0,00	0,00	0,00	0,00
Sulfolane	0,00	0,00	0,00	0,00
Água	0,00	0,00	0,00	0,00
Total	100,00	42377,99	100,00	42377,99

ANEXO 3: VALIDAÇÃO DA SIMULAÇÃO – CORRENTE BTX PRODUTO

	<i>Dados Planta</i>		<i>Dados Simulação</i>	
	BTX		BTX	
	%BTX	Kg/h	%BTX	Kg/h
	31,3 ton/h		31,1 ton/h	
Parafínicos	0,08	25,81	0,00	1,29
n-Butano	0,00	0,00	0,00	0,00
n-Pentano	0,00	0,00	0,00	0,00
n-Hexano	0,00	0,00	0,00	0,00
n-Heptano	0,00	0,00	0,00	0,08
n-Octano	0,02	5,11	0,00	0,94
n-Nonano	0,05	14,77	0,00	0,26
n-Decano	0,02	5,93	0,00	0,01
Naftênicos	0,09	27,94	0,07	21,77
Ciclopentano	0,00	0,00	0,00	0,00
Metilciclopentano	0,00	0,00	0,00	0,26
Dimetilciclopentano	0,00	0,00	0,00	0,00
Ciclohexano	0,00	0,00	0,01	1,70
Metilciclohexano	0,00	0,66	0,06	19,55
Dimetilciclohexano	0,09	27,28	0,00	0,26
Aromáticos	99,83	31292,54	99,84	31058,17
Benzeno	52,51	16459,14	52,90	16455,28
Tolueno	26,44	8288,48	26,77	8328,66
Etilbenzeno	9,43	2955,93	9,62	2991,39
p-Xileno	1,20	376,54	1,29	401,17
o-Xileno	2,11	660,60	2,12	659,37
m-Xileno	4,79	1501,33	4,80	1492,92
1,2,4-Trimetilbenzeno	3,35	1050,53	2,34	729,37
Solventes	0,00	0,00	0,09	27,65
Sulfolane	0,00	0,00	0,00	0,08
Água	0,00	0,00	0,09	27,57
Total	100,00	31346,30	100,00	31108,88

ANEXO 4: VALIDAÇÃO DA SIMULAÇÃO – CORRENTE RAFINADO PRODUTO

	<i>Dados Planta</i>		<i>Dados Simulação</i>	
	RAF27A		RAF27A	
	%Refinado	Kg/h	%Refinado	Kg/h
	11,03 ton/h		11,2 ton/h	
Parafínicos	39,82	4395,81	39,01	4365,66
n-Butano	0,00	0,00	0,00	0,00
n-Pentano	1,92	212,41	1,89	211,19
n-Hexano	22,61	2495,86	21,80	2438,93
n-Heptano	9,03	997,44	7,86	879,78
n-Octano	2,95	325,74	3,43	383,63
n-Nonano	2,27	250,96	2,84	318,16
n-Decano	1,03	113,40	1,20	133,97
Naftênicos	59,15	6530,56	57,76	6462,87
Ciclopentano	2,62	288,71	2,31	257,99
Metilciclopentano	27,41	3026,23	26,38	2951,54
Dimetilciclopentano	8,98	991,64	9,10	1018,10
Ciclohexano	6,74	743,64	6,67	745,95
Metilciclohexano	7,10	784,37	6,86	767,57
Dimetilciclohexano	6,30	695,97	6,45	721,72
Aromáticos	1,03	113,52	3,23	361,27
Benzeno	0,00	0,00	0,04	4,85
Tolueno	0,01	1,18	0,05	5,40
Etilbenzeno	0,13	14,72	0,39	43,16
p-Xileno	0,00	0,00	0,03	3,37
o-Xileno	0,07	7,47	0,13	14,41
m-Xileno	0,08	8,30	0,12	13,40
1,2,4- Trimetilbenzeno	0,74	81,85	2,47	276,68
Solventes	0,00	0,00	0,00	0,07
Sulfolane	0,00	0,00	0,00	0,05
Água	0,00	0,00	0,00	0,02
Total	100,00	11039,89	100,00	11189,87