

## **Simulação e análise ambiental do processo de purificação do metilciclohexano por destilação extrativa com uso de *software* livre**

### **Simulation and environmental analysis of the purification process of methylcyclohexane by extractive distillation using free *software***

DOI:10.34117/bjdv8n11-223

Recebimento dos originais: 24/10/2022

Aceitação para publicação: 22/11/2022

#### **Vitoria Ingrid Figueira Silveira**

Mestranda em Engenharia Química

Instituição: Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

Endereço: Cidade Universitária Zeferino Vaz, Barão Geraldo, Campinas - SP,

CEP: 13083-970

E-mail: vitoriafigueirasilveira@gmail.com

#### **Maria Luana Crystina de Sousa e Sousa**

Bacharel em Engenharia Química

Instituição: Universidade Federal do Amazonas (UFAM)

Endereço: Av. General Rodrigo Octavio Jordão Ramos, 1200, Coroado I, Manaus - AM,

CEP: 69067-005

E-mail: luanacrystinasousa@gmail.com

#### **Jéssica Correa da Fonseca**

Bacharel em Engenharia Química

Instituição: Universidade Federal do Amazonas (UFAM)

Endereço: Av. General Rodrigo Octavio Jordão Ramos, 1200, Coroado I, Manaus - AM,

CEP: 69067-005

#### **Arley Silva Rossi**

Doutor em Engenharia Química

Instituição: Universidade Federal do Amazonas (UFAM)

Endereço: Av. General Rodrigo Octavio Jordão Ramos, 1200, Coroado I, Manaus - AM,

CEP: 69067-005

E-mail: arleyrossi@ufam.edu.br

### **RESUMO**

Nas últimas décadas, a indústria química tem buscado desenvolver processos mais ambientalmente favoráveis. O presente estudo tem como objetivo avaliar o impacto ambiental do processo de purificação do metilciclohexano através da destilação extrativa com etilbenzeno como solvente. Existem diferentes tipos de indicadores ambientais na engenharia que podem ser empregados para avaliar um processo químico, entre os vários, pode-se destacar o algoritmo WAR. Essa metodologia avalia o potencial de impacto ambiental (PEI) a partir dos dados do balanço de massa e energia do processo. O presente trabalho utilizou o software iiSE para construir o fluxograma do processo e fornecer os dados necessário de balanço material para análise ambiental. O iiSE é um simulador de processos de estado estacionário orientado para equações. Nesse estudo, a pureza do metilciclohexano obtida foi de 90,8%, um pouco abaixo dos valores exigidos pelo

mercado (>98%). O metilciclohexano perdido no processo influenciando negativamente a análise ambiental do método, devido ao alto teor de compostos orgânicos. Diante disto, os resultados alcançados mostram que é preciso otimizar os parâmetros operacionais atuais das colunas ou investigar outros tipos de solventes.

**Palavras-chave:** purificação, simulação, destilação.

## ABSTRACT

In recent decades, the chemical industry has sought to develop more environmentally friendly processes. The present study aims to evaluate the environmental impact of the purification process of methylcyclohexane through extractive distillation with ethylbenzene as solvent. There are different types of environmental indicators in engineering that can be employed to evaluate a chemical process, among the several, the WAR algorithm can be highlighted. This methodology evaluates the potential environmental impact (PEI) from the mass and energy balance data of the process. The present work used the iiSE software to build the process flowchart and provide the necessary material balance data for environmental analysis. The iiSE is an equation-oriented steady-state process simulator. In this study, the purity of methylcyclohexane obtained was 90.8%, slightly below the values required by the market (>98%). The methylcyclohexane lost in the process negatively influencing the environmental analysis of the method, due to the high content of organic compounds. In view of this, the results achieved show that it is necessary to optimize the current operational parameters of the columns or investigate other types of solvents.

**Keywords:** purification, simulation, distillation.

## 1 INTRODUÇÃO

As colunas de destilação são umas das principais operações de purificação empregadas nos setores industriais. O processo de destilação se baseia numa mistura de multicomponentes com volatilidades distintas, onde a separação dos componentes ocorre pelo sucessivo aquecimento, vaporização e condensação. Contudo, o sistema de destilação pode impactar negativamente na eficiência de um processo em razão da alta demanda energética e geração de resíduos (FASCINI, et al., 2018). Mesmo assim, a destilação se mostra a rota tecnológica mais apropriada para diversos processos, tais como: produção de etanol anidro, empregando glicerina como agente extrator (MATUGI, 2013); purificação de benzeno, purificação do éter dietílico. Segundo Silva et al., (2019), a destilação corresponde por 90% a 95% dos processos de separação na indústria química.

Dentro desse contexto, observa-se a oportunidade de analisar os efeitos dos resíduos gerados nas colunas de destilação, e para esta análise utilizou-se o *software* WAR (*Waste Reduction Algorithm*) (WAR-GUI, 2011). O programa WAR é uma tecnologia desenvolvida pela agência de proteção ambiental do Estados Unidos (EPA), e emprega uma metodologia

que analisa o impacto ambiental de um processo levando em consideração os potenciais de impactos ambientais (*Potential Environmental Impact – PEI*), este método leva em consideração oito categorias de impactos ambientais, descritas em Young e Cabezas (1999). Fascini et al., (2018) utilizou o algoritmo WAR na análise ambiental do processo de destilação com arraste a vapor de acetona, contribuindo na análise e desenvolvimento do processo. Deste modo, o presente trabalho utilizou ferramentas computacionais no processo de purificação do metilciclohexano. Tal composto possui inúmeras aplicações industriais tais como: uso em borracha, revestimento, síntese orgânica entre outros. Nestes processos é exigido um alto teor de pureza de metilciclohexano (>98%). O objetivo desse estudo foi analisar o impacto ambiental do processo de destilação extrativa na purificação do metilciclohexano por meio do uso de *software* WAR.

## 2 METODOLOGIA

O presente estudo simulou o processo de purificação do metilciclohexano (MCH) utilizando o simulador de processos iiSE v.1.8.2001 (*Industrial Integrated Simulation Environment*), baseado no de Silva et al., (2019). A corrente de alimentação é composta por uma mistura equimolar de metilciclohexano (MCH) e etilbenzeno (EB). O processo de purificação empregou a destilação extrativa e o estireno (E) foi agente extrator selecionado. Desta forma, o sistema envolve a utilização de duas colunas de destilação: coluna 1 (coluna extrativa) e a coluna 2 (coluna regenerativa do solvente). Os dados operacionais das correntes de alimentação, solvente e do sistema de destilação estão descritos na Figura 1. No sistema de destilação cada coluna apresenta um refeedor na base da coluna e um condensador parcial no topo da coluna.

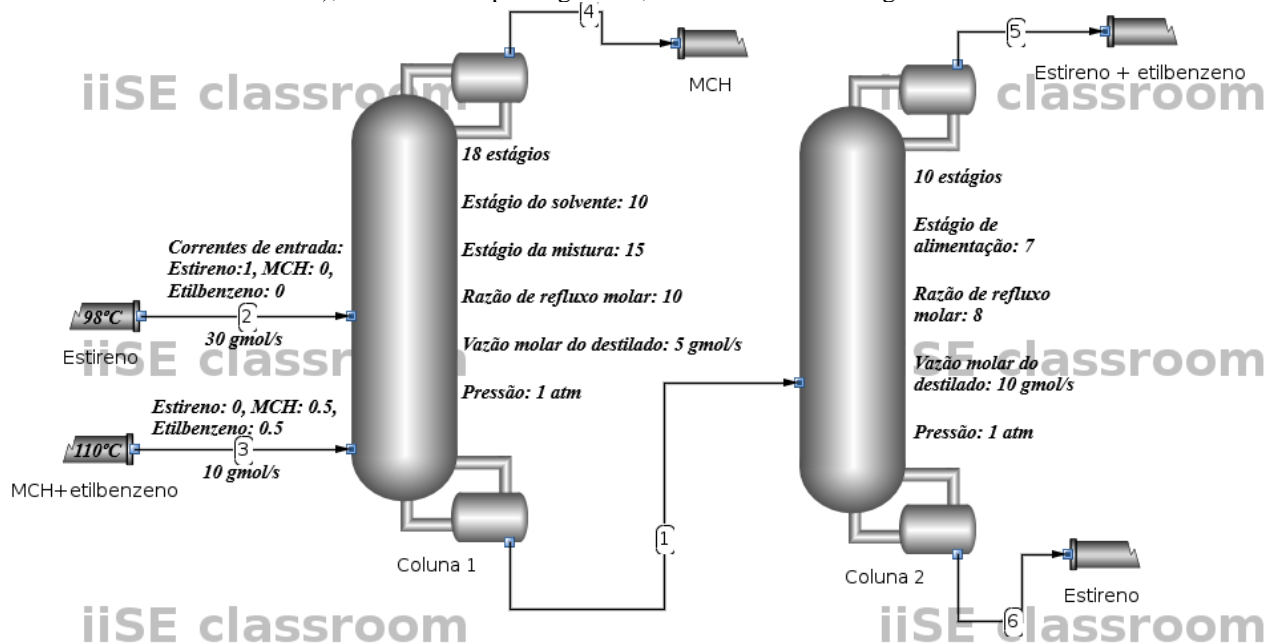
### 2.1. SIMULAÇÃO

A simulação do processo de purificação do metilciclohexano empregou componentes presentes no banco de dados do iiSE, e o pacote termodinâmico selecionado para representar as operações foram os modelos de Peng-Robinson (PG) para os compostos governados pelas equações de estado e Van-der-Waals para os compostos que seguem a regra da mistura. O simulador dispõe de equipamentos da indústria química de processo o qual foi possível obter o fluxograma do processo, conforme mostrado na Figura 1 (SILVA et al., 2019).

Todo o balanço de massa e energia do processo foram realizados pelo simulador iiSE, e as especificações das colunas foram seguidas de acordo com Silva et al., (2019). A partir do

balanço de massa e energia fornecidos pelo simulador foi possível fazer a análise ambiental com o auxílio do *software* WAR versão 1.0.17, produzido pela Agência Nacional de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (USA-EPA). O *software* WAR é um método que se baseia em avaliar o impacto ambiental de um processo verificando os potenciais de impacto ambientais (PEI – *Potential Environmental Impact*), essa metodologia considera oito categorias de impacto ambientais, a descrição completa pode ser consultada nos trabalhos de Young e Cabezas (1999).

Figura 1 – Fluxograma do processo de separação utilizando destilação extrativa. Dados: coluna 1 (coluna extrativa – destilação extrativa), corrente alimentação equimolar 10 gmols/s (MCH+EB); a 100 °C, corrente solvente puro (E) 30 gmols/s a 98 °C; corrente destilado (MCH) 5 gmols/s; coluna 2 (coluna regenerativa do solvente), corrente de topo 10 gmols/s; corrente de fundo 25 gmols/s.



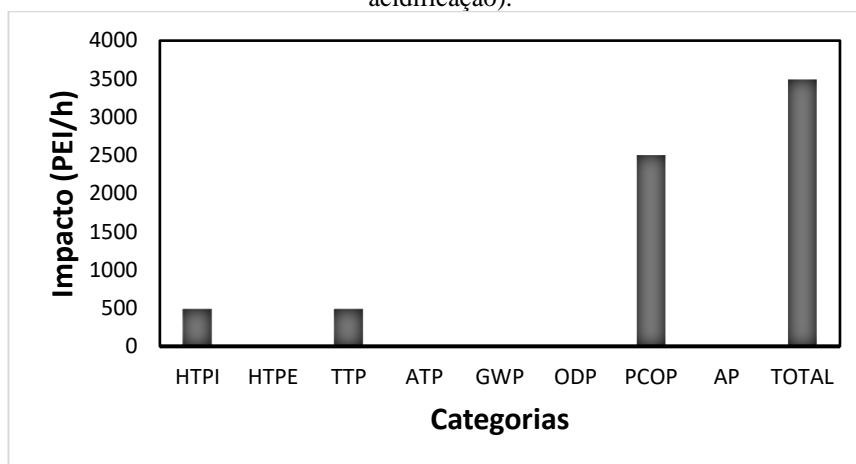
### 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

No topo da coluna extrativa foi obtido MCH com 90,8% de pureza. Segundo Silva et al. (2019) o uso industrial do MCH exige purezas > 98 a 99%. Logo, observa-se que ocorreu perda do componente no processo. Analisando a corrente de topo da coluna regenerativa (Figura 2), o valor de PEI total obtido do processo investigado foi de aproximadamente 3500 PEI/hr, percebe-se que a categoria de maior contribuição para este resultado foi o Potencial de Oxidação Fotoquímico (PCOP).

Esse resultado mostra que há perigo de oxidação dos componentes químicos quando enviado para a atmosfera proporcionando uma poluição atmosférica. Uma possível explicação para esse valor de PEI pode ser as condições operacionais empregadas na coluna 1 que

ocasionaram a perda de MCH para a coluna regenerativa. Além disso, o desempenho da coluna regenerativa não foi satisfatória, uma vez que a corrente de topo (efluente) apresenta alta concentração de solvente (~64%), mostrando que boa parte do solvente empregado no processo está sendo emitida para a atmosfera.

Figura 2 – Análise do impacto ambiental da corrente efluente (topo da coluna) gerada na coluna regenerativa utilizando o algoritmo WAR. Legenda: Potencial de Impacto Ambiental (PEI) total, Categorias dos Impactos: HTPI (potencial de toxicidade humana por ingestão); HTPE (potencial de toxicidade humana por exposição); TTP (potencial de toxicidade terrestre); ATP (potencial de toxicidade aquática); GWP (potencial aquecimento global); ODP (potencial de depleção de oxônio); PCOP (potencial de oxidação fotoquímico); AP (potencial de acidificação).



#### 4 CONCLUSÃO

Com o uso do simulador de processos iiSE foi possível avaliar a metodologia de purificação do metilciclohexano e o uso do *software* WAR permitiu fazer a avaliação do ponto de vista ambiental das correntes efluentes geradas no processo. Diante dos resultados obtidos, as condições operacionais das colunas extrativa e regenerativa precisam ser otimizadas para elevar o grau de pureza de MCH na corrente destilado na coluna 1. Bem como, aumentar a taxa de recuperação do solvente na coluna regenerativa. Outro aspecto a ser levado em consideração é o estudo de outros compostos alternativos de solvente para serem utilizados na destilação extrativa.

## REFERÊNCIAS

FASCINI, C. M; LIMA, M. S; SILVA, L.Y. A. **Aplicação do algoritmo WAR ao processo de destilação com arraste a vapor de acetona.** XXII Congresso Brasileiro de Engenharia Química -São Paulo -SP.

MATUGI, K. **Produção de etanol anidro por destilação extrativa utilizando soluções salinas e glicerol.** São Carlos, 2013. Dissertação (mestrado em engenharia química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química - Universidade Federal de São Carlos.

SILVA, F. F. D; SOUZA, F. S; HAMM, J. B. S. **Simulação e otimização do processo de separação de uma mistura de metilciclohexano e tolueno em uma coluna de destilação extrativa.** Revista de Química Industrial, v.22 n° 764, 2019.

USA-EPA, WAR graphical user interface (WAR-GUI), 2011.

YOUNG, D; CABEZAS, H. **Designing sustainable processes with simulation: the waste reduction (WAR) algorithm.** Computed Chemical Engineering, v. 23, p. 1477-1491, 1999.