

AVALIAÇÃO DO PROCESSO DE PRODUÇÃO DE DIMETIL ÉTER VIA HIDROGENAÇÃO DO CO₂ POR ROTA DIRETA

Manuel Fernando Arias Pérez

Profa. Rita Maria De Brito Alves

Escola Politécnica/Universidade de São Paulo

manuel.arias@correo.uis.edu.co

Objetivos

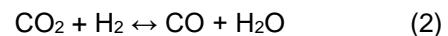
Os objetivos específicos da pesquisa foram: i) determinar a estrutura do fluxograma para a produção de dimetil éter por rota direta, ii) avaliar o efeito dos parâmetros e condições operacionais sobre a redução das emissões de CO₂ do processo, e iii) analisar o desempenho econômico do processo, identificando os principais fatores que afetam sua variação.

Métodos e Procedimentos

Para esta pesquisa, todas as informações necessárias foram coletadas da literatura científica. De acordo com as necessidades de cada uma das etapas do processo, a simulação do processo e o dimensionamento dos equipamentos foram realizados usando métodos internos de cálculo do software Aspen Plus V10 (APV10) e algumas de suas

ferramentas como Data Fit, Análise de Sensibilidade, Análise Econômica, Calculator e Design Spec.

O fluxograma (PFD) é composto de seções de reação e separação e equipamento auxiliar para atingir condições de operação específicas. Foi utilizado modelo termodinâmico SR-POLAR e um conjunto de três reações (equações 1 a 3) [1].



Resultados

A Figura 1 apresenta o PFD final, o qual produz 116 mil toneladas/ano de dimetil éter (DME) com uma pureza de 99.9 % massa/massa.

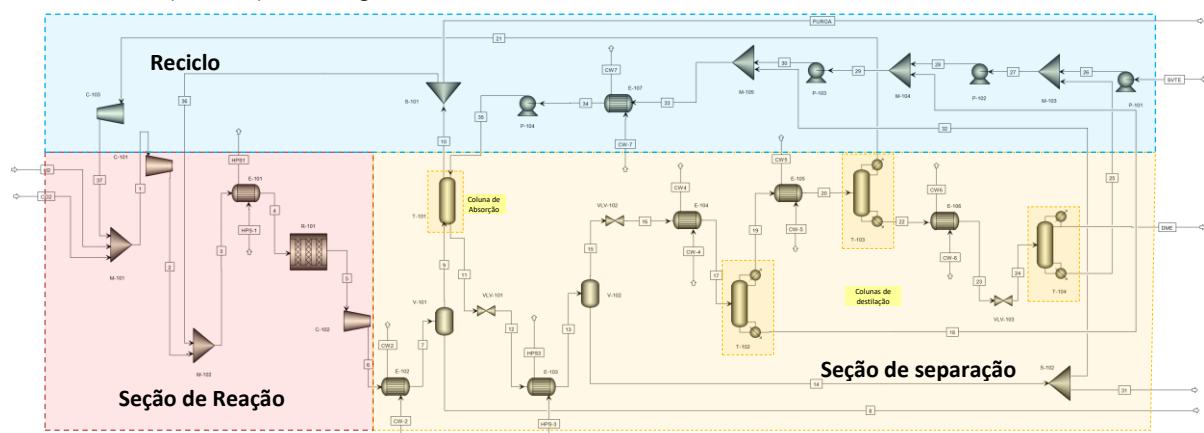


Figura 1. PFD para a síntese direta do DME a partir da hidrogenação do CO₂

A Tabela 1 apresenta os principais parâmetros operacionais do reator de leito fixo (R-101) modelado com a opção cinética RPlug do APV10.

Tabela 1. Parâmetros operacionais do reator

Tipo de operação	Isotérmica a 240 °C
Pressão de entrada	40 bar
Conversão de CO ₂	15.7 %
Rendimento de DME	17.2 %
Tempo de residência	2.17 s

Para a etapa de separação, uma coluna de absorção foi utilizada para recuperar aproximadamente 97.7% do DME dos reagentes não convertidos. A coluna de absorção, com pratos., opera a 40 °C e 40 bar e utilizou-se como solvente 21027 kmol/h de uma solução aquosa a 82 % mol de metanol (CH₃OH). Posteriormente, um trem de três colunas de destilação (Figura 2) foi projetado para recuperar parcialmente o CH₃OH + H₂O (na C-102) e reciclá-lo para a coluna de absorção; recuperar o CO₂ (na C-103) e reciclá-lo para o reator; e, finalmente, obter o DME (na C-104) na pureza necessária.

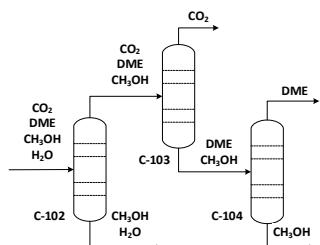


Figura 2. Sequência das colunas de destilação

Trocadores de calor foram usados para modificar a temperatura e as bombas e compressores para aumentar a pressão das correntes de reciclo e de *make-up* associadas ao solvente e reagentes. Como correntes de *make-up*, o solvente (91.3 % mol CH₃OH, 8.7 % mol H₂O) foi alimentado a 1 bar, 25 °C, e os reagentes foram alimentados em correntes separadas: Hidrogênio a 20.3 bar, 30°C, e o CO₂ a 20.3 bar, 32°C. A razão molar Solvente/H₂/CO₂ no processo foi 0.5:3.1:1.

Para alcançar uma alta conversão global de CO₂ (xCO_{2,g}), uma análise de sensibilidade global (Figura 3) permitiu selecionar o divisor

do reciclo e purga gasosa (S-101) como o ponto mais significativo do processo, pois com uma divisão de 99% para o reciclo, a xCO_{2,g} atingiu o 96.2 %.

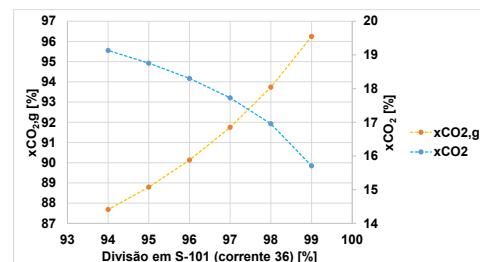


Figura 3. Análise de sensibilidade no divisor S-101

Com base nas informações de estimativa de custos de Turton [2], os custos estimados foram: 40.6 MUSD (milhões de dólares) para equipamentos, 32.9 MUSD/ano para utilidades, 1.3 MUSD/ano para pessoal e 45.7 MUSD/ano para matérias-primas. Esses custos foram altos devido à quantidade de solvente no sistema, à alta pressão operacional e ao consumo de vapor de alta pressão e matérias-primas. Como receita, apenas foram considerados os 71.9 MUSD/ano estimados pela venda do DME.

Conclusões

O processo desenvolvido torna tecnicamente viável a produção de 116000 toneladas/ano de DME a 99.9% m/m, com um reator PBR, uma coluna de absorção, três colunas de destilação, trocadores de calor, bombas e compressores. A conversão global de CO₂ foi 96.3 %. Fatores como a alta pressão operacional ou o consumo de matérias-primas aumentaram os custos que não foram compensados pela receita, e por isso, o processo não foi economicamente viável.

Referências Bibliográficas

- [1] X. Wang, «Study on Intrinsic Kinetics of Dimethyl Ether Synthesis from CO₂ Hydrogenation», Nanjing University of Technology, 2004.
- [2] R. Turton, J. A. Shaeiwitz, D. Bhattacharyya, y W. B. Whiting, *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*, 5 ed. Pearson Education, 2018.