

Desenvolvimento de um modelo digital de simulação dinâmica da seção de síntese e separação de metanol com reciclo de alta pressão

Gabriel dos Santos Pereira^a, Lucas Bonfim Rocha^b, Heleno Bispo^c, Sérgio Mauro da Silva Neiro^d, Ariosto Araújo de Moraes Júnior^e, Felipe Luiz de Assunção Bezerra^{a,*}

^a Departamento de Engenharia Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), Londrina-PR, Brasil

^b Departamento de Engenharia Química, Universidade Estadual de Maringá (UEM), Maringá-PR, Brasil

^c Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de Campina Grande (UFCG), Campina Grande-PB, Brasil

^d Escola de Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia (UFU), Uberlândia-MG, Brasil

^e Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal da Paraíba (UFPB), João Pessoa-PB, Brasil

* felipibezerra@utfpr.edu.br

RESUMO

A síntese de metanol exige altas taxas de reciclo, tornando sua dinâmica complexa. Distúrbios de carga propagam-se pelo circuito, onde o acúmulo de inertes reduz a pressão parcial dos reagentes e a taxa reacional. Este trabalho analisa o comportamento transiente de um modelo dinâmico fenomenológico da síntese de metanol no simulador AVEVA Process Simulation. A metodologia envolveu a conversão do estado estacionário ao modo dinâmico via regime intermediário *Fluid Flow*, definindo coeficientes de válvulas e *hold-ups* de projeto. Testes de perturbação em malha aberta evidenciaram a coerência física da planta, registrando desvios transientes de vazão induzidos pelo efeito bola de neve, inércia térmica compatível com a topologia TEMA, e o comportamento integrador do vaso separador. O modelo consolida uma bancada virtual robusta para simulações de perturbações e estudos de controle.

Palavras-chave: Processos Dinâmicos, Simulação de Modelos Complexos, Reciclo de gases, Purga de Inertes, Operabilidade de Processos.

1 Motivação e Propósito

O metanol atua como um vetor químico e energético fundamental na indústria moderna. A rota de produção a partir de gás de síntese (*syngas*) exige que a conversão ocorra sob rigorosas condições de alta pressão e temperatura. A tecnologia de modelos digitais tem transformado o setor químico ao integrar dados para aprimorar a otimização de processos e a sustentabilidade destas rotas complexas (Mane et al., 2024). Contudo, a literatura científica comumente aborda esta etapa de síntese focada apenas em otimizações no estado estacionário, negligenciando os gargalos da operação industrial diária. O comportamento transiente de uma instalação real sofre forte influência das restrições cinéticas das reações químicas, do efeito bola de neve intrínseco ao sistema de reciclo e da dinâmica de *hold-up* dos equipamentos físicos. Compreender essa dinâmica é o que separa um modelo teórico de uma planta segura, sendo um fator decisivo para prever riscos, otimizar procedimentos de partida (*startups*) e reduzir paradas não programadas em complexos industriais, como os petroquímicos.

O desafio central desta operação reside no sistema principal de escoamento de recirculação: o circuito contendo o reprocessamento de reagentes não reagidos na corrente de reciclo. A conversão da síntese catalítica por passagem é severamente limitada pelas restrições cinéticas e presença de inertes, exigindo o retorno contínuo de elevadas taxas de vazão de monóxido de carbono e hidrogênio não reagidos. Neste circuito fechado, o acúmulo progressivo de gases inertes induz o fenômeno de sufocamento de massa e a elevação drástica da pressão, o que representa um potencial comprometimento das condições adequadas para operação desejada do processo. Consequentemente, a transição deste sistema para o regime dinâmico impõe barreiras fenomenológicas de elevada complexidade, tendo em vista que todas as propriedades das correntes do sistema estão sendo alteradas constantemente ao longo do tempo, o que exige um mapeamento rigoroso das quedas de pressão, da inércia térmica dos equipamentos e do balanço de momentos para evitar singularidades matemáticas e garantir a aplicabilidade do modelo.

O propósito deste trabalho é, utilizando técnicas de modelagem e simulação de processos, realizar uma análise transiente, simulada em modo dinâmico no software AVEVA Process Simulation (APS), da seção reacional e de separação primária de metanol. O presente trabalho traz à tona um sistema que foi previamente simulado em estado estacionário (Pereira et al., 2025). A pesquisa fundamenta-se na evolução deste modelo para o regime dinâmico, empregando a simulação preditiva avançada como ferramenta de digitalização (de Beer & Depew, 2021). Para garantir a coerência fenomenológica no novo regime, o escopo da modelagem estabelece as restrições de escoamento induzido por gradientes de pressão por meio do dimensionamento de válvulas e da definição dos *hold-ups* de projeto dos equipamentos físicos. O escopo abrange a definição dos *hold-ups* de projeto e a configuração de uma infraestrutura de instrumentação que viabilize a monitoração e a manipulação das variáveis do processo. Esta arquitetura atua como o suporte operacional para a condução de uma análise transiente detalhada, fundamentada na aplicação de perturbações em degrau. Através da observação das respostas naturais do sistema em malha aberta, busca-se caracterizar o comportamento dinâmico e a inércia hidráulica da unidade. Com essa abordagem, objetiva-se consolidar uma plataforma virtual para a avaliação de operabilidade industrial e para a futura implementação de estratégias de controle.

2 Metodologia

A simulação do processo foi estabelecida através do software APS, suportando equações diferenciais algébricas rígidas. A estruturação metodológica transcorreu em etapas sequenciais de avaliação de balanço de pressões, dimensionamento de fronteiras hidráulicas e estrutura básica de suporte de malhas de controle.

2.1 Descrição do Processo

A planta de síntese de metanol modelada compreende a seção de conversão catalítica primária acoplada ao seu respectivo circuito de reciclo. O gás de síntese fresco (*syngas*) alimenta o sistema pela corrente *Feed* sob pressão de 96 atm, adentrando o misturador MX1, onde é combinada com a corrente S27, composta pelo gás não reagido que retorna do ciclo. A mistura reacional resultante é pré-aquecida pelo trocador de calor casca e tubo E1 (utilizando vapor saturado como utilidade) até alcançar 240 °C, fornecendo a energia de ativação necessária para a catálise química. Em seguida, a corrente adentra o reator tubular de leito fixo R1. Como a reação de síntese é fortemente exotérmica e o reator opera sob a hipótese de ser isotérmico, no modelo computacional, a energia térmica gerada é extraída através do cálculo direto da taxa de remoção de calor, simulando a ação fluidodinâmica de uma camisa de resfriamento que será detalhada em implementações futuras.

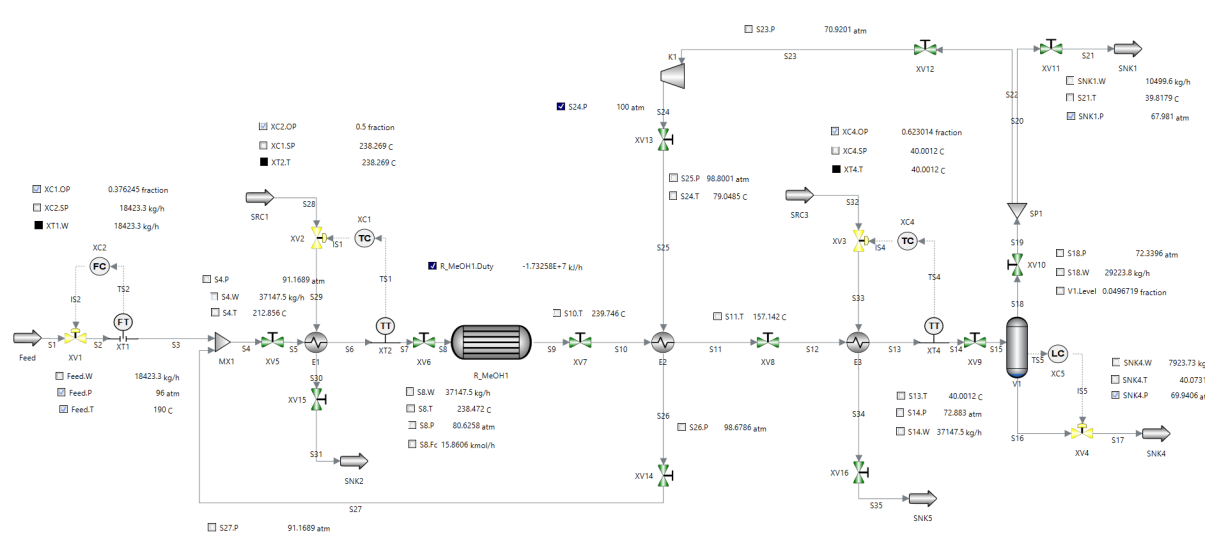
A mistura reacional aquecida, rica em metanol recém-formado, água e gases leves residuais, segue para a etapa de condicionamento térmico. Visando a maximização da eficiência energética através de integração térmica, este efluente quente atravessa o trocador E2 (Trocador Carga-Efluente), cedendo calor sensível para a corrente S25 oriunda do reciclo. Essa troca simultânea garante que o gás de reciclo seja aquecido para cerca de 230 °C antes de retornar à entrada do processo, enquanto a corrente principal de efluente sofre um resfriamento abrupto de aproximadamente 80 °C. Logo após, a corrente principal é submetida a um resfriador final (E3), alimentado por água de resfriamento, que reduz a temperatura do escoamento para 40 °C, bem como uma queda de pressão significativa de 8 atm (decorrente das válvulas e trocadores dessa etapa). Essa sequência de supressão térmica e de pressão rompe o ponto de orvalho da mistura, induzindo a condensação severa dos compostos mais pesados (como a água e o metanol).

A mistura bifásica resultante ingressa no vaso separador V1 a aproximadamente 72 atm, onde o sistema atinge o equilíbrio termodinâmico líquido-vapor e a ação gravitacional promove a segregação física das fases. A fase líquida, correspondente ao metanol cru, é extraída pelo fundo do vaso e direcionada como produto para as subsequentes etapas de purificação (que não integram o escopo desse trabalho). A fase gasosa, contendo os compostos leves não reagidos, deixa o cabeçote de topo do vaso e escoar através de um divisor direcional (SP1). Este divisor atua descartando uma fração estritamente controlada do gás na forma de purga, um mecanismo de balanço mecânico e mássico vital para expurgar compostos inertes e reduzir as limitações da cinética reacional (dado que a presença desses gases reduz a pressão parcial de reagentes e desacelera a velocidade da reação), prevenir o sufocamento no balanço de pressão do sistema, bem como assegurar o fechamento do balanço mássico global.

Por fim, a massa gasosa remanescente é tracionada pelo compressor de reciclo K1. A função primária deste equipamento é elevar a pressão do fluxo para cerca de 100 atm, repondo a energia hidráulica dissipada pela perda

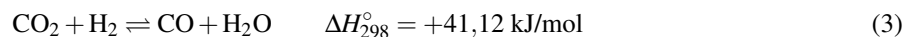
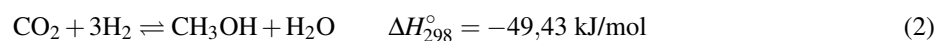
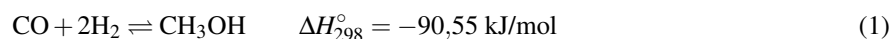
de carga de todo o circuito reacional e de separação. Esse ganho de pressão iguala a linha de reciclo às condições da rede de alimentação fresca, permitindo o correto balanço de momentos no misturador MX1 e a reinjeção contínua do gás a montante do reator. A Figura 1 ilustra a topologia mecânica e interconexão do processo.

Figura 1: Fluxograma do modelo digital do sistema de síntese e reciclo de metanol.



2.2 Modelagem Termodinâmica e Cinética Reacional

A fidelidade da simulação de alta pressão foi baseada no modelo termodinâmico Predictive Soave-Redlich-Kwong (PSRK), selecionado por sua alta capacidade preditiva e aderência ao comportamento transiente das fases líquida e gasosa nas condições críticas do reator (Hoseiny et al., 2016). O reator tubular de leito fixo foi configurado com um volume físico industrial de 40,7 metros cúbicos, distribuído ao longo de 2962 tubos (Rezaie et al., 2005). A biblioteca cinética nativa foi substituída por um conjunto de equações diferenciais customizadas baseadas no modelo LHHW (Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson). O diferencial do modelo implementado utiliza o cálculo instantâneo da fugacidade dos reagentes em substituição às frações molares para garantir uma resposta precisa à inibição catalítica por adsorção (Rezaie et al., 2005). A estequiometria do gás de alimentação foi balanceada preliminarmente, inserindo-se uma corrente de ajuste rica em hidrogênio para elevar o Módulo de Síntese a valores próximos da razão ideal de 2,0, mitigando gargalos de conversão atrelados ao excesso ou déficit de reagentes (Fekri Lari et al., 2019; Puig-Gamero et al., 2018). As reações principais que governam a síntese de metanol e ditam o comportamento termodinâmico da zona reacional estão descritas pelas Equações 1, 2 e 3.



2.3 Transição Dinâmica e Fronteiras Hidráulicas

A transição do domínio estacionário para o dinâmico no APS exige a reestruturação da malha para um escoamento induzido puramente por gradientes de pressão, abandonando as especificações de vazão fixa. Para documentar e garantir a reprodutibilidade deste modelo digital, a conversão fenomenológica foi estruturada em um protocolo rigoroso de quatro etapas. O primeiro passo consistiu na redefinição das fronteiras hidráulicas do sistema. As correntes de alimentação, tanto a principal do processo (*Feed*) quanto as duas dos fluidos de trabalho dos trocadores de calor (SRC2 e SRC3) deixaram de operar com vazões mássicas forçadas e passaram a atuar como reservatórios infinitos sob pressões absolutas constantes. Simultaneamente, os sumidouros (SNK2, SNK3, SNK4

e SNK5) foram configurados para operar sempre em pressões menores que as dos fluxos upstream, garantindo o empuxo hidráulico necessário para o escoamento contínuo através da planta.

Com o gradiente de pressão global estabelecido, o segundo passo abordou o dimensionamento das restrições mecânicas. O modelo foi convergido inicialmente no modo estacionário para calcular as quedas de pressão operacionais das válvulas ao longo toda a tubulação. A partir desse balanço, a ferramenta de dimensionamento foi acionada para calcular e fixar o coeficiente de vazão (C_v) de todas as válvulas. Ao travar o C_v no software, a geometria da válvula torna-se uma restrição física real, permitindo que a vazão flutue naturalmente em resposta às variações de pressão da rede, refletindo a hidrodinâmica de uma instalação verdadeira.

O terceiro passo englobou a alocação de inércia volumétrica aos equipamentos físicos, uma etapa matemática vital para evitar instabilidades numéricas e falhas de convergência na matriz de integração no instante inicial da dinâmica. O vaso separador de condensado recebeu um volume estático projetado para garantir um tempo de residência da fase líquida desejado, atuando como um volume de retenção contra inundações ou secamentos abruptos. Volumes proporcionais também foram atribuídos aos cascos e tubos dos trocadores de calor, conferindo a inércia térmica necessária para amortecer variações bruscas de temperatura perante distúrbios de carga. O dimensionamento detalhado dessas operações unitárias será apresentado em uma seção posterior desse trabalho.

Por fim, o quarto passo consistiu na verificação da rede hidráulica através do regime intermediário *Fluid Flow*, uma etapa de transição estrutural do simulador. Antes de acionar o motor de integração no tempo, o modelo foi comutado para este modo estacionário estritamente guiado por diferenciais de pressão. Essa fase é indispensável para garantir que o balanço de momentos esteja perfeitamente alinhado com as fronteiras de reservatório estabelecidas e com os coeficientes restritivos (C_v) das válvulas, atestando que o escoamento ocorre de forma fidedigna às leis da mecânica dos fluidos. Apenas após a confirmação da estabilidade direcional e da coerência das vazões nominais neste estágio, o software foi definitivamente comutado para o modo dinâmico. Essa progressão sequencial objetiva evitar instabilidades numéricas ou choques de matriz no instante zero, em busca de consolidar uma bancada virtual fisicamente coerente para a execução dos testes de perturbação em malha aberta.

2.4 Dimensionamento Térmico e de Separação

A transição para o regime dinâmico exigiu a substituição de blocos termodinâmicos ideais por equipamentos físicos, fundamentais para estabelecer os *hold-ups* de massa e energia do processo. O dimensionamento seguiu práticas industriais rigorosas. Para o vaso separador (V1), o diâmetro foi estipulado pela Equação de Souders-Brown, prevenindo o arraste de gotículas para o compressor. A altura projetada forneceu um tempo de residência de 1,5 minuto, criando o inventário capacitivo responsável pelo atraso físico necessário à atuação do controle de nível. Paralelamente, os trocadores de calor foram modelados na topologia de casco e tubos, seguindo as diretrizes TEMA. O condicionamento dinâmico foi viabilizado pela inversão estratégica dos graus de liberdade: ao fixar a área de contato e o coeficiente global de troca térmica (U) provenientes do estado estacionário, estabeleceu-se a condutância térmica real (UA) de cada unidade. Com essa manobra, o simulador abandona as cargas térmicas fixas (Q) e passa a recalcular o calor instantaneamente em função das variações de vazão e temperatura, assegurando a fidedignidade da inércia térmica da instalação frente a distúrbios operacionais.

2.5 Arquitetura Básica de Controladores para Testes de Perturbação

Para viabilizar a leitura e a manipulação dos parâmetros dinâmicos, mapeou-se uma arquitetura de instrumentação baseada em quatro malhas de controladores: carga de gás fresco (XV1), gestão térmica no pré-aquecedor (XV2) e no resfriador final (XV3), e nível de líquido do vaso separador (XV4). O objetivo foi facilitar a execução dos distúrbios dos testes de perturbação deste estudo pelo controle direto aos valores de abertura das válvulas, portanto adotou-se uma topologia estritamente em malha aberta (com modo totalmente manual), desativando as correções automáticas. A sobrevivência hidráulica do modelo frente aos choques operacionais, sem o colapso de pressão ou do selo líquido, foi garantida exclusivamente pelos *hold-ups* de projeto detalhados na Seção 2.4. Essa capacidade de amortecimento físico absorveu os desbalanços momentâneos, permitindo extrair a resposta transiente natural da planta livre de qualquer interferência algorítmica.

3 Resultados e Discussão

Os dimensionamentos das operações unitárias de troca térmica e de separação líquido-vapor foram realizados de acordo com as metodologias estipuladas para cada equipamento anteriormente na Seção 2.4. Os parâmetros

de projeto consolidados estão sintetizados na Tabela 1.

Tabela 1: Dimensionamento físico dos equipamentos para o modelo dinâmico.

Equipamento	Parâmetro de Projeto	Valor Calculado
Vaso Separador (V1)	Diâmetro Interno	1,68 m
Vaso Separador (V1)	Altura do Casco	3,96 m
Pré-aquecedor (E1)	Área de Troca Térmica	39,28 m ²
Integrador Carga-Efluente (E2)	Área de Troca Térmica	109,27 m ²
Resfriador Final (E3)	Área de Troca Térmica	31,73 m ²

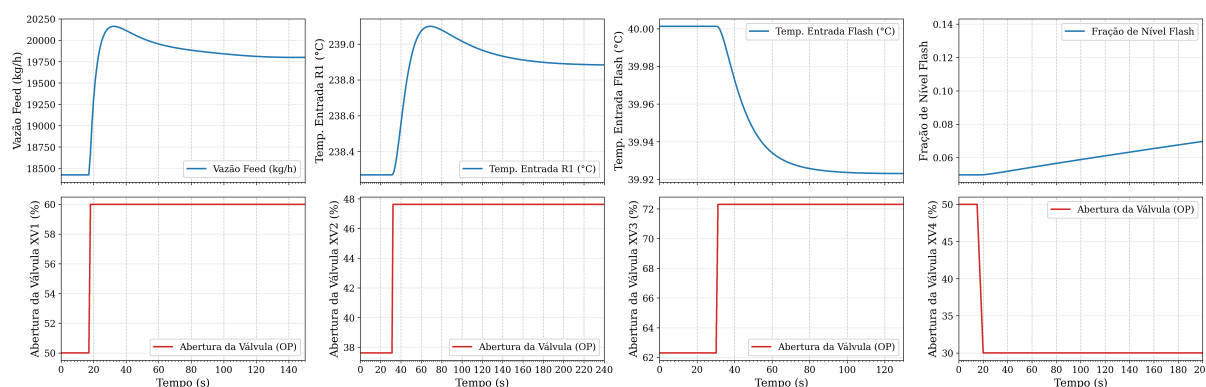
A execução dos testes de perturbação em malha estritamente aberta atua como a verificação do protocolo metodológico empregado. A estabilidade alcançada perante os distúrbios comprova que a transição via regime *Fluid Flow* e a fixação dos *hold-ups* de projeto foram bem-sucedidas em conferir realidade física ao modelo dinâmico. A Figura 2 compila a evolução temporal das variáveis críticas perante esses choques operacionais.

A análise da propagação de distúrbios inicia-se com a aplicação de um degrau positivo de 10% na abertura da válvula de carga (XV1). Conforme ilustrado no Gráfico A, a vazão de alimentação sofre um desvio transitório, atingindo um pico aproximado de 20.150 kg/h. A ausência de um salto instantâneo comprova o efeito restritivo dos coeficientes de fluxo (C_v) travados durante a comutação de regimes. Consequentemente, esse *overshoot* reflete o acúmulo de massa circulando pelo circuito, evidenciando a forte sensibilidade do sistema ao efeito bola de neve no reciclo. O amortecimento seguro desse distúrbio atesta que a rede hidráulica obedece fielmente aos gradientes físicos de pressão.

A inércia térmica e o atraso de transporte da zona reacional foram mapeados mediante perturbações nas utilidades. O Gráfico B demonstra que a temperatura de admissão do reator não responde de imediato a um degrau no pré-aquecedor (XV2), exibindo o tempo natural de trânsito do fluido na tubulação seguido por um aquecimento capacitivo. Simultaneamente, o Gráfico C revela que um distúrbio na água de resfriamento (XV3) induz uma queda suave na entrada do *flash*, estabilizando-se em 39,92 °C. O sucesso dessa topologia fundamenta-se na diretriz TEMA, que forçou o simulador a recalcular dinamicamente a condutância (UA) com base na área de troca, emulando a real capacitância do aço para simulações seguras de partidas a frio (*cold startups*).

Por fim, a importância do dimensionamento volumétrico é consolidada pela dinâmica do vaso separador (V1). Com a redução de 20% na válvula de extração (XV4), a variável de processo assumiu o comportamento integrador evidenciado no Gráfico D, desenvolvendo uma rampa de acúmulo contínua. Essa inércia linear atesta a eficácia da Equação de Souders-Brown e do *hold-up* de projeto, que juntos conceberam um pulmão de amortecimento robusto. Sem essa restrição capacitiva, o balanço de massa resultaria em transbordamento imediato, comprovando que o volume estipulado fornece a janela temporal exigida para a futura atuação segura das malhas de controle de inventário.

Figura 2: Resposta transiente em testes degrau das válvulas XV1, XV2, XV3 e XV4 em malha aberta



4 Conclusão

O presente trabalho executou com sucesso a transição de um modelo fenomenológico de síntese de metanol do estado estacionário para o modo dinâmico, utilizando o simulador AVEVA Process Simulation. A aplicação da etapa intermediária *Fluid Flow*, aliada ao dimensionamento físico dos equipamentos com base nas normativas TEMA e na formulação de Souders-Brown, mostrou-se essencial. Essa estrutura permitiu que o modelo digital não apenas convergisse matematicamente em $t = 0$, mas representasse coerentemente as restrições de escoamento e as limitações capacitivas de uma instalação petroquímica.

A condução dos testes de perturbação em malha aberta indicou a coerência da resposta dinâmica do sistema perante choques operacionais. A reprodução do efeito bola de neve no circuito de reciclo, a constatação dos atrasos de transporte térmico e o comportamento integrador no vaso separador revelaram a eficácia dos *hold-ups* adotados em projeto. Dessa forma, a pesquisa entrega à engenharia de processos um ambiente de digitalização robusto. Como perspectivas para trabalhos futuros, a plataforma desenvolvida servirá como arquitetura base para a implementação e sintonia de malhas de controle regulatório em malha fechada, bem como para a avaliação de algoritmos de controle avançado. Vislumbra-se, ainda, a integração desta simulação com ferramentas de inteligência artificial, pavimentando o caminho para a otimização em tempo real e a consolidação de um autêntico modelo digital sob o paradigma da Indústria 4.0.

Referências

- de Beer, J., & Depew, C. (2021). The Role of Process Engineering in the Digital Transformation. *Computers & Chemical Engineering*, 154, 107423. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2021.107423>
- Fekri Lari, M., Farsi, M., & Rahimpour, M. R. (2019). Modification of a Tri-Reforming Reactor Based on the Feeding Policy to Couple With Methanol and GTL Units. *Chemical Engineering Research and Design*, 144, 107–114. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2019.01.029>
- Hoseiny, S., Zare, Z., Mirvakili, A., Setoodeh, P., & Rahimpour, M. R. (2016). Simulation-Based Optimization of Operating Parameters for Methanol Synthesis Process: Application of Response Surface Methodology for Statistical Analysis. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 34, 439–448. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2016.06.075>
- Mane, S., Dhote, R. R., Sinha, A., & Thirumalaiswamy, R. (2024). Digital Twin in the Chemical Industry: A Review. *Digital Twins and Applications*, 1(2), 118–130. <https://doi.org/10.1049/dgt2.12019>
- Pereira, G. R., Bispo, H., Costa, T. V. d., & Neiro, S. M. d. S. (2025). From Process Simulation to Digital Twin: Custom Gasifier Modelling, Complex Kinetics and Optimisation in AVEVA Process Simulation. *The Institution of Engineering and Technology (IET)*. <https://doi.org/10.1049/dgt2.70009>
- Puig-Gamero, M., Argudo-Santamaria, J., Valverde, J. L., Sánchez, P., & Sanchez-Silva, L. (2018). Three Integrated Process Simulation Using Aspen Plus: Pine Gasification, Syngas Cleaning and Methanol Synthesis. *Energy Conversion and Management*, 177, 416–427. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2018.09.088>
- Rezaie, N., Jahanmiri, A., Moghtaderi, B., & Rahimpour, M. R. (2005). A Comparison of Homogeneous and Heterogeneous Dynamic Models for Industrial Methanol Reactors in the Presence of Catalyst Deactivation. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 44(8), 911–921. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2004.10.004>