



SIMULAÇÃO DO PROCESSO PRODUTIVO DO CUMENO ATRAVÉS DA ALQUILAÇÃO DE BENZENO: UMA ABORDAGEM DIDÁTICA COM O SIMULADOR ASPEN PLUS NA ENGENHARIA QUÍMICA

DOI: 10.37702/2175-957X.COBENGE.2025.6431

Autores: ARTHUR CRUZ WALLAU, FERNANDA MACHADO SERAPHIM, NATHAN PEREIRA SOUZA, BIANCA LEME DE CAMARGO, PRISCILLA CIBELLE OLIVEIRA DE SOUZA FIRMINO

Resumo: Este trabalho apresenta a simulação computacional da produção de cumeno via alquilação do benzeno com propeno, utilizando o software ASPEN Plus V12. O modelo do processo inclui dois reatores de leito fixo em série e um sistema de separação com três colunas. Foram selecionados modelos termodinâmicos adequados e realizada a análise dos resultados em contexto industrial. A simulação atingiu conversão completa do propeno e pureza de cumeno superior a 99%, demonstrando a viabilidade técnica do processo. A abordagem adotada permite explorar otimizações e análises de sensibilidade, promovendo uma visão sistêmica das interações entre as operações unitárias e a viabilidade econômica do processo. A metodologia pode ser aplicada a outros processos industriais relevantes, mantendo o equilíbrio entre complexidade técnica e clareza na representação do sistema.

Palavras-chave: Cumeno, Simulação de processos, ASPEN Plus

SIMULAÇÃO DO PROCESSO PRODUTIVO DO CUMENO ATRAVÉS DA ALQUILAÇÃO DE BENZENO: UMA ABORDAGEM DIDÁTICA COM O SIMULADOR ASPEN PLUS NA ENGENHARIA QUÍMICA

1 INTRODUÇÃO

O cumeno (isopropilbenzeno) representa um intermediário petroquímico de significativa relevância na indústria química global, com produção mundial estimada em 15,5 milhões de toneladas em 2022 e crescimento projetado de 4,1% ao ano até 2032 (CHEMANALYST, 2022). O mercado global foi avaliado em 21,2 bilhões de dólares americanos em 2023, com projeção para atingir 30,8 bilhões até 2033, representando taxa de crescimento anual composta de 4,1% (IMARC GROUP, 2024). A relevância estratégica do cumeno deriva de seu papel como precursor na produção de fenol e acetona através do processo Hock, sendo que aproximadamente 95% da produção global destina-se a esta aplicação (ABDOLMALEKI; BAYRAMI, 2024).

A síntese industrial do cumeno fundamenta-se na reação de alquilação de Friedel-Crafts entre benzeno e propileno, empregando catalisadores ácidos (DEGNAN et al., 2001). A evolução tecnológica dos catalisadores progrediu desde ácido fosfórico sólido e cloreto de alumínio até as zeólitas modernas, que apresentam maior seletividade e estabilidade operacional (PEREGO; POLLESEL, 2004). As zeólitas, particularmente as do tipo Beta, MCM-22 e Y, demonstraram eficiência superior devido à combinação de propriedades ácidas adequadas e estrutura porosa otimizada para a reação (ZHANG et al., 2018).

No contexto educacional da engenharia química, a integração de softwares de simulação de processos tornou-se componente essencial na formação profissional (CLARK; DIBIASIO; DIXON, 2001). O *ASPEN Plus*, desenvolvido através de colaboração entre o *Massachusetts Institute of Technology* e o Departamento de Energia dos Estados Unidos na década de 1970, evoluiu de ferramenta experimental acadêmica para padrão industrial de simulação de processos. A implementação sistemática de simuladores no currículo de engenharia química demonstrou eficácia comprovada na preparação de estudantes para desafios profissionais (ROCKSTRAW, 2005).

A incorporação de simulação computacional no ensino de engenharia química proporciona desenvolvimento de competências essenciais para a prática profissional moderna (KOMULAINEN et al., 2012). Estudantes desenvolvem capacidade de análise de processos complexos sem os riscos e custos associados à operação de plantas reais, construindo intuição sobre interações entre variáveis operacionais (CASTRELLÓN et al., 2011). A experiência com ferramentas computacionais utilizadas industrialmente reduz o período de adaptação dos recém-formados ao ambiente profissional, competência valorizada pelos empregadores do setor químico (SHAO; SHIFLETT, 2021).

Este trabalho apresenta o desenvolvimento de uma simulação computacional do processo de produção de cumeno utilizando o software *ASPEN Plus* V12, com objetivos pedagógicos e técnicos integrados. A seleção do processo de cumeno como estudo de caso justifica-se pela relevância industrial do produto, complexidade técnica adequada para exploração didática e disponibilidade de dados operacionais confiáveis na literatura especializada (LUYBEN, 2010). A metodologia adotada visa demonstrar a aplicação de conceitos fundamentais de engenharia química através de caso industrial relevante, ilustrando estratégias pedagógicas eficazes para o ensino de simulação de processos.

2 METODOLOGIA

2.1 Desenvolvimento da Simulação

A simulação do processo de produção de cumeno foi desenvolvida no software *ASPEN Plus* V12, utilizando como referência os dados operacionais e configuração do processo otimizado apresentados por Norouzi et al. (2014). A metodologia de construção da simulação seguiu uma abordagem sistemática para garantir a representação adequada do processo industrial.

O desenvolvimento iniciou-se com a definição dos componentes do sistema através do banco de dados do simulador, incluindo benzeno, propileno, propano, cumeno (isopropilbenzeno) e diisopropilbenzeno (DIPB).

2.2 Estruturação do Processo

A definição dos componentes químicos no sistema constitui etapa fundamental da simulação (PATHAK; AGARWAL; GERA; KAISTHA, 2011). Utilizando o banco de dados integrado do *ASPEN Plus*, foram especificados os componentes: benzeno (C_6H_6), propileno (C_3H_6), propano (C_3H_8) como impureza típica do propileno industrial, cumeno (C_9H_{12}) como produto principal, e diisopropilbenzeno ($C_{12}H_{18}$) como subproduto, conforme composições industriais típicas reportadas por Samad et al. (2023).

O modelo termodinâmico NRTL-RK (*Non-Random Two Liquids* - Redlich-Kwong) foi selecionado para representação do sistema, adequado para misturas não-ideais contendo aromáticos em pressões elevadas (PRAUSNITZ; LICHTENTHALER; AZEVEDO, 1999). Este modelo combina a equação NRTL para fase líquida com equação de estado Redlich-Kwong para fase vapor, proporcionando representação precisa do equilíbrio líquido-vapor na faixa operacional do processo, conforme validado por Junqueira et al (2018). A seleção apropriada do modelo termodinâmico constitui decisão crítica em simulação de processos, requerendo compreensão dos fundamentos termodinâmicos e características específicas do sistema (PATHAK; AGARWAL; GERA; KAISTHA, 2011).

2.3 Modelagem do Sistema Reacional

As reações implementadas no sistema incluem a formação de cumeno (reação principal) e formação indesejada de DIPB, ambas seguindo cinética de primeira ordem em relação ao propileno, com constantes cinéticas seguindo a equação de Arrhenius. As constantes de velocidade das reações são expressas em termos da temperatura absoluta T (K) e da constante universal dos gases $R = 8,314 \text{ kJ}/(\text{kmol}\cdot\text{K})$.

Para a formação de cumeno (reação principal), a constante cinética k_A ($\text{kmol}/(\text{m}^3\cdot\text{s}\cdot\text{bar})$) é dada por (NOROUZI et al., 2014) de acordo com a Equação 1:

$$k_A = 6510 \times e^{\left(\frac{-52554}{RT}\right)} \quad (1)$$

A formação indesejada de DIPB segue cinética similar, com constante k_B ($\text{kmol}/(\text{m}^3\cdot\text{s}\cdot\text{bar})$) (NOROUZI et al., 2014), conforme Equação 2:

$$k_B = 450 \times e^{\left(\frac{-55000}{RT}\right)} \quad (2)$$

Na seção de transalquilação, a conversão de DIPB em cumeno adicional ocorre através de reação reversível com benzeno. As constantes de velocidade direta k_C (s^{-1}) e reversa k_D (s^{-1}) são (NOROUZI et al., 2014), como apresentado Equações 3 e 4, respectivamente:

$$k_C = 2,529 \times 10^8 \times e^{\left(\frac{-100000}{RT}\right)} \quad (3)$$

$$k_D = 3,877 \times 10^9 \times e^{\left(\frac{-127240}{RT}\right)} \quad (4)$$

2.4 Sistema de Separação

O sistema de separação representa componente essencial do processo, responsável pela purificação do produto e recuperação de reagentes não convertidos (SAMAD et al., 2023). A configuração implementada consistiu em três colunas de destilação sequenciais, cada uma com função específica no esquema global de separação, conforme práticas industriais estabelecidas (NOROUZI et al., 2014).

O dimensionamento preliminar das colunas utilizou métodos simplificados disponíveis no *ASPEN Plus*, incluindo cálculos de refluxo mínimo pelo método de Underwood e número mínimo de estágios pelo método de Fenske (CASTRELLÓN et al., 2011). Posteriormente, simulação rigorosa prato a prato foi realizada para ajuste das condições operacionais e verificação do atendimento às especificações de produto, metodologia que demonstra aos estudantes a importância de métodos aproximados para estimativas iniciais.

2.5 Pedagógica com Prática Industrial

A metodologia de ensino incorporou elementos que conectam experiência acadêmica com realidade industrial (CUADRI et al., 2020). Dados operacionais típicos foram obtidos da literatura técnica, incluindo temperaturas de operação entre 150-200°C, pressões de 25-35 bar, e razão molar benzeno/propileno entre 5-8 para minimizar formação de subprodutos (NOROUZI, 2014). Estas condições foram apresentadas como resultado de otimização econômica considerando custos de matéria-prima, energia e equipamentos, conforme análises industriais documentadas por Junqueira et al. (2018).

A inclusão de aspectos econômicos na simulação permite compreensão de que decisões de engenharia envolvem compromissos entre eficiência técnica e viabilidade econômica (SAMAD et al., 2023). Análises de sensibilidade foram realizadas para demonstrar como variações nas condições operacionais afetam desempenho técnico e rentabilidade do processo, seguindo metodologia estabelecida por Pathak et al (2011).

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

O processo simulado apresentou convergência satisfatória, com erro relativo máximo de $6,78 \times 10^{-5}$, conferindo alta confiabilidade aos resultados obtidos.

3.1 Conversão e Seletividade

O processo simulado apresentou convergência satisfatória após ajustes apropriados nos parâmetros de cálculo e estimativas iniciais, consistente com experiências reportadas por Junqueira et al (2018). A experiência de resolução de problemas de convergência constitui aspecto valioso do aprendizado, desenvolvendo habilidades de diagnóstico essenciais para prática profissional (KOMULAINEN et al., 2012). Os estudantes aprenderam interpretar mensagens de erro, identificar loops de reciclo problemáticos e aplicar estratégias de

convergência como *tear streams* e *design specs*, competências destacadas por Shao e Shiflett (2021).

A simulação alcançou conversão completa do propileno (>99,9%), valores consistentes com operação industrial otimizada reportada por Luyben (2010). A seletividade para cumeno foi de 92,3%, com restante convertido principalmente em diisopropilbenzeno (que será, no reator de transalquilação, convertido ao cumeno, provendo ao processo seletividade global acima de 99% para cumeno), alinhado com dados industriais apresentados por Norouzi et al. (2014). Estes resultados demonstram importância do controle adequado das condições reacionais e razão de alimentação dos reagentes para maximizar produção do produto desejado.

3.2 Desempenho do Sistema de Separação

Conforme apresentado na Tabela 1, o desempenho do sistema de separação atendeu especificações industriais típicas, com recuperação de benzeno superior a 99,9% e pureza do cumeno produto de 99,5% em massa (DEGNAN et al., 2001). A coluna despropanizadora operou com 18 estágios teóricos e razão de refluxo de 2,5, removendo eficientemente propano presente como impureza.

Tabela 1: Vazões mássicas e condições das principais correntes de processo

Corrente	Benzeno (kg/h)	Propeno (kg/h)	Cumeno (kg/h)	T (°C)	P (bar)
Alimentação Benzeno	7.893,39	0,00	0,00	30,0	35,0
Alimentação Propeno	0,00	4.208,06	0,00	30,0	35,0
Saída Reator 1	36.228,64	0,00	13.474,09	254,6	40,0
Produto Cumeno	69,16	0,00	12.020,71	150,2	1,0
Reciclo Benzeno	31.070,37	0,00	143,33	85,8	1,2

Fonte: Autoria própria (2025)

A coluna de recuperação de benzeno, operando próxima à pressão atmosférica, requereu 24 estágios teóricos devido à proximidade dos pontos de ebulição de benzeno e cumeno. O uso de gráficos de McCabe-Thiele gerados pelo *ASPEN Plus* permitiu visualização clara do perfil de composição ao longo da coluna, facilitando compreensão dos conceitos de destilação multicomponente. A integração energética entre condensadores e refeedores demonstrou potencial para redução do consumo de utilidades, introduzindo conceitos de integração de processos e sustentabilidade.

3.3 Desenvolvimento de Competências Profissionais

A experiência com simulação do processo de cumeno no *ASPEN Plus* desenvolveu competências alinhadas com demandas do mercado para engenheiros químicos, conforme documentado por Rockstraw (2005). A capacidade de traduzir conhecimento teórico em modelos computacionais funcionais representa habilidade fundamental na engenharia moderna, onde simulação precede frequentemente implementação física de processos (KOMULAINEN et al., 2012).

Os estudantes desenvolveram compreensão integrada de como diferentes operações unitárias interagem em processo industrial completo. A necessidade de considerar simultaneamente aspectos de reação química, separação, integração energética e viabilidade econômica promove pensamento sistêmico essencial para prática da engenharia de processos (RUIZ-RAMOS et al., 2017). Esta visão contrasta com abordagem

compartimentalizada frequentemente adotada em disciplinas tradicionais que tratam operações unitárias isoladamente (CALVO; PRIETO, 2016).

3.4 Aplicações Industriais e Preparação Profissional

Na indústria química e petroquímica, o *ASPEN Plus* é utilizado rotineiramente para projeto de novas plantas, *revamp* de unidades existentes, otimização de condições operacionais e *troubleshooting* de problemas de processo. A familiaridade com o software adquirida através do exercício educacional prepara estudantes para contribuir efetivamente em equipes de engenharia desde início de suas carreiras profissionais (SHAO; SHIFLETT, 2021).

Empresas de engenharia e consultorias valorizam profissionais com experiência em simulação de processos, competência que permite avaliação rápida de alternativas de processo e otimização de projetos sem necessidade de experimentação física custosa. A capacidade de realizar estudos de viabilidade técnico-econômica utilizando ferramentas de simulação tornou-se requisito comum em descrições de vagas para engenheiros de processo, conforme análise de mercado realizada por *Straits Research* (2024).

3.5 Extensões e Aplicações Avançadas

O modelo desenvolvido para processo de cumeno serve como base para explorações avançadas de conceitos de engenharia de processos. Análises de otimização podem ser realizadas para determinar condições operacionais que maximizem lucro ou minimizem consumo energético, introduzindo conceitos de programação matemática aplicada a processos químicos. Estudos de análise de risco e propagação de incertezas demonstram como variabilidade nas condições de alimentação e parâmetros de processo afetam qualidade do produto e rentabilidade.

A inclusão de controladores e análise dinâmica permite explorar aspectos de controle de processos, área crescentemente importante com digitalização da indústria química. Simulações dinâmicas revelam comportamentos transientes durante partidas, paradas e perturbações, preparando estudantes para desafios operacionais reais. A integração com ferramentas de otimização em tempo real e conceitos de Indústria 4.0 demonstra evolução contínua da prática de engenharia química o que permite não apenas uma visão de processo químico industrial estruturado como também a prática em desenvolvimentos avançados.

4 CONCLUSÃO

A implementação da simulação do processo de produção de cumeno utilizando *ASPEN Plus* V12 demonstrou eficácia como ferramenta pedagógica para ensino de engenharia química, corroborando resultados reportados por Norouzi et al. em 2014. A abordagem adotada permitiu integração bem-sucedida de conceitos teóricos fundamentais com aplicação prática relevante para indústria, desenvolvendo competências profissionais valorizadas no mercado de trabalho conforme documentado por Rockstraw (2005).

A experiência educacional transcendeu o aprendizado operacional do software, promovendo compreensão profunda de como ferramentas computacionais modernas transformam a prática da engenharia química. Os estudantes desenvolveram capacidade de pensar sistemicamente sobre processos complexos, considerar interações entre diferentes operações unitárias e tomar decisões baseadas em análise quantitativa rigorosa, habilidades essenciais identificadas por Dahm et al. (2009). Estas competências preparam futuros engenheiros para contribuir efetivamente em ambiente industrial crescentemente digitalizado.

A metodologia aplicada pode ser adaptada para outros processos químicos de importância industrial, mantendo equilíbrio entre complexidade técnica e valor pedagógico. A

escolha de processos com dados industriais disponíveis e relevância econômica atual maximiza engajamento dos estudantes e transferibilidade das competências desenvolvidas. Recomenda-se que instituições de ensino em engenharia química incorporem sistematicamente simulação de processos ao longo do currículo, progredindo de aplicações simples para projetos integrados complexos.

O desenvolvimento contínuo de competências em simulação e modelagem constitui requisito essencial para formação de engenheiros químicos preparados para desafios da indústria moderna. A familiaridade com ferramentas computacionais padrão da indústria, combinada com sólida fundamentação teórica e capacidade de pensamento crítico, posiciona graduados para sucesso em carreiras técnicas exigentes e em constante evolução, conforme análises de mercado realizadas por S&P Global (2022) e IMARC Group (2024).

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à Pontifícia Universidade Católica de Campinas pelo suporte técnico e infraestrutura disponibilizada.

REFERÊNCIAS

- ABDOLMALEKI, Gelareh; BAYRAMI, Zahra. Cumene. In: WEXLER, Philip (Ed.). **Encyclopedia of Toxicology**. 4. ed. Amsterdã: Elsevier, 2024. v. 3, p. 337-343.
- CALVO, L.; PRIETO, C. The teaching of enhanced distillation processes using a commercial simulator and a project-based learning approach. **Education for Chemical Engineers**, Londres, v. 17, p. 65-74, 2016.
- CASTRELLÓN, T. *et al.* Using process simulators in the study, design, and control of distillation columns for undergraduate chemical engineering courses. **Computer Applications in Engineering Education**, Hoboken, v. 19, n. 3, p. 621-630, 2011.
- CHEMANALYST. **Cumene Market Size, Growth Analysis & Forecast To 2032**. Houston: ChemAnalyst, 2022.
- CLARK, W. M.; DIBIASIO, D.; DIXON, A. G. A project-based spiral curriculum for introductory courses in ChE: Part 1. Curriculum design. **Chemical Engineering Education**, Gainesville, v. 34, n. 3, p. 190-199, 2001.
- CUADRI, A. A.; MARTÍN-ALFONSO, J. E.; URBANO, J. Using Mathcad to facilitate the design of chemical reactors involving multiple reactions. **Computer Applications in Engineering Education**, Hoboken, v. 28, n. 2, p. 293-303, 2020.
- DAHM, K. *et al.* Enhancing student learning in an introductory chemical engineering course using computational tools. **Chemical Engineering Education**, Gainesville, v. 43, n. 3, p. 218-224, 2009.
- DEGNAN, T. F. *et al.* Alkylation of aromatics with ethylene and propylene: recent developments in commercial processes. **Applied Catalysis A: General**, Amsterdã, v. 221, n. 1-2, p. 283-294, 2001.
- IMARC GROUP. **Cumene Market: Global Industry Trends, Share, Size, Growth, Opportunity and Forecast 2024-2032**. Nova York: IMARC Group, 2024.
- JUNQUEIRA, P. G.; MANGILI, P. V.; SANTOS, R. O.; SANTOS, L. S.; PRATA, D. M. Economic and environmental analysis of the cumene production process using computational simulation. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, Amsterdã, v. 130, p. 309-325, 2018.
- KOMULAINEN, T. M. *et al.* Experiences on dynamic simulation software in chemical engineering education. **Education for Chemical Engineers**, Londres, v. 7, n. 4, p. e153-e162, 2012.
- LUYBEN, W. L. Design and control of the cumene process. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, Washington, v. 49, n. 2, p. 719-734, 2010.
- NOROUZI, H. R. *et al.* Economic design and optimization of zeolite-based cumene production plant. **Chemical Engineering Communications**, Filadélfia, v. 201, n. 10, p. 1270-1293, 2014.
- PATHAK, A. S.; AGARWAL, S.; GERA, V.; KAISTHA, N. Design and Control of a Vapor-Phase Conventional Process and Reactive Distillation Process for Cumene Production. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, Washington, v. 50, n. 6, p. 3312-3326, 2011.
- PEREGO, C.; POLLESEL, I. Combining alkylation and transalkylation for alkylaromatic production. **Green Chemistry**, Cambridge, v. 6, n. 7, p. 274-279, 2004.

PRAUSNITZ, J. M.; LICHTENTHALER, R. N.; AZEVEDO, E. G. **Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria**. 3. ed. Upper Saddle River, EUA: Prentice Hall, 1999.

ROCKSTRAW, D. A. ASPEN Plus® in the ChE curriculum: Suitable course content and teaching methodology. **Chemical Engineering Education**, Gainesville, v. 39, n. 1, p. 68-75, 2005.

RUIZ-RAMOS, E. *et al.* Learning and researching based on local experience and simulation software for graduate and undergraduate courses in Chemical and Environmental Engineering. **Education for Chemical Engineers**, Londres, v. 21, p. 50-61, 2017.

SAMAD, W. Z. *et al.* Thermodynamic Analysis of Cumene Production Plant through Integrated Energy and Exergy Analysis. **Energy**, Oxford, v. 270, p. 126840, 2023.

SHAO, M.; SHIFLETT, M. B. A Student-Led Approach to Integrate ASPEN Plus® in the Chemical Engineering Curriculum at the University of Kansas. **Chemical Engineering Education**, Gainesville, v. 55, n. 1, p. 31-41, 2021.

STRAITS RESEARCH. **Global Cumene Market Revenue is Estimated to Reach USD 30.39 billion by 2031, Growing at a CAGR of 4.7%**. Nova York: Straits Research, 2024.

TSAY, C.; PATTISON, R. C.; PIANA, M. R.; BALDEA, M. A survey of optimal process design capabilities and practices in the chemical and petrochemical industries. **Computers & Chemical Engineering**, v. 112, p. 180-189, 2018.

ZHANG, W.; BAO, X.; GUO, X.; WANG, X. Reaction mechanism of alkylation of benzene with propylene to produce cumene over H-beta zeolite: A DFT study. **Molecular Catalysis**, Amsterdã, v. 454, p. 1-11, 2018.

SIMULATION OF CUMENE PROCESS USING ASPEN PLUS: PEDAGOGICAL AND INDUSTRIAL TOOL

Abstract: *This work presents the development of computational simulation for cumene production through benzene alkylation with propylene using ASPEN Plus V12 software focusing on educational application and professional competencies development for chemical engineering students. The methodology integrated theoretical concepts with practical industrial application through systematic construction of process model including two fixed-bed reactors in series and three-column separation system. Students developed competencies in thermodynamic model selection translating theoretical knowledge to computational models and interpreting simulation results within industrial context. The simulation achieved complete propylene conversion and cumene purity exceeding 99 percent demonstrating technical feasibility while providing platform for exploring process optimization and sensitivity analysis. Experience with industry-standard software prepared students for professional challenges reducing adaptation time in industrial environments. The pedagogical approach promoted systemic thinking about complex processes considering interactions between unit operations and economic viability. Results demonstrate effectiveness of process simulation as an educational tool for developing professional competencies aligned with modern chemical industry demands. The methodology can be extended to other industrially relevant processes maintaining balance between technical complexity and pedagogical value.*

Keywords: *cumene production, process simulation, ASPEN Plus, engineering education, industrial processes*

