ROBERTO HASSON LEVI BIANCHINI

**ESTUDO COMPARATIVO DA ABSORÇÃO E DESSORÇÃO DE
DIÓXIDO DE CARBONO EM COLUNAS PARA SOLUÇÃO DE
AMINAS: MONOETILENO AMINA E MONODIETIL AMINA/
PIPERAZINA**

São Paulo

2018

ROBERTO HASSON LEVI BIANCHINI

**ESTUDO COMPARATIVO DA ABSORÇÃO E DESSORÇÃO DE
DIÓXIDO DE CARBONO EM COLUNAS PARA SOLUÇÃO DE
AMINAS: MONOETILENOAMINA E MONODIETIL Amina/
PIPERAZINA**

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São Paulo
para obtenção do título de Mestre em
Ciências.

São Paulo

2018

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, 09 de janeiro de 2018

Assinatura do autor: -

Assinatura do orientador:

Catálogo-na-publicação

BIANCHINI, R. H. L.

ESTUDO COMPARATIVO DA ABSORÇÃO E DESSORÇÃO DE DIÓXIDO DE CARBONO EM COLUNAS PARA SOLUÇÃO DE AMINAS: MONOETILENO AMINA E MONODIETIL AMINA/ PIPERAZINA / R. H. L.

BIANCHINI -- versão corr. -- São Paulo, 2018.

147 p.

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Química.

1.Recuperação de CO₂ 2.Dessorção 3.Aminas 4.Consumo Energético
5.Análise Econômica I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica.
Departamento de Engenharia Química II.t.

ROBERTO HASSON LEVI BIANCHINI

**ESTUDO COMPARATIVO DA ABSORÇÃO E DESSORÇÃO DE
DIÓXIDO DE CARBONO EM COLUNAS PARA SOLUÇÃO DE
AMINAS: MONOETILENOAMINA E MONODIETIL Amina/
PIPERAZINA**

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São Paulo
para obtenção do título de Mestre em
Ciências.

Área de Concentração: Engenharia Química

Orientador: Prof. Dr. José Luis de Paiva

São Paulo

2018

Dedico este trabalho:

Aos meus pais, James Levi Bianchini e Elza Hasson Bianchini, pelo esforço e apoio na minha educação. E ao meu avô Leone Levi Bianchini, por inspirar na busca de novos conhecimentos.

Sem eles nada disso seria possível.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. José Luís de Paiva pelo apoio, colaboração, dedicação e orientação incondicional para a realização deste trabalho. Agradeço também pela amizade e confiança depositada em mim.

Às minhas queridas filha Raquel Luso Levi Bianchini e esposa Suzette Luso Bianchini, que muito me incentivaram.

Ao Departamento de Engenharia Química da da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo pela oportunidade de realizar o Curso de Mestrado.

Aos colegas Henry Alexander Rodriguez Flores, Michael Davis Montani Júnior e João Pedro Ferreira Del Pintor, além de todas as pessoas que colaboraram na execução deste trabalho.

RESUMO

Este trabalho tem por objetivo avaliar o desempenho econômico - custo operacional energético e custo de investimento - do processo de absorção química seguida de dessorção de dióxido de carbono (CO_2), comparando-se os seguintes solventes da classe das aminas: monoetanolamina (MEA) e a mistura metildietanolamina/piperazina (MDEA/PZ), utilizando-se o simulador de processo Aspen Plus®. Para a avaliação da operação de absorção, recorreu-se primeiramente à implementação de um modelo matemático de absorção desenvolvido em planilha eletrônica, para comparar e validar o comportamento dos perfis de temperaturas resultantes das simulações com o Aspen Plus. Este modelo foi desenvolvido a partir dos parâmetros de transferência de massa e variáveis de processo pré especificadas. Tanto no modelo em planilha como no modelo do Aspen Plus®, o dimensionamento das colunas de absorção e dessorção foram definidos a partir das variáveis de processo, considerando-se aspectos hidrodinâmicos e de transferência de massa. As simulações foram realizadas inicialmente em ciclo aberto, com as concentrações iniciais de aminas, e em seguida em ciclo fechado, com a corrente de fundo da coluna de dessorção reciclada para a alimentação da coluna de absorção, com coeficientes de carga praticamente iguais, emulando-se, assim, o ciclo fechado. Com base na literatura, estabeleceram-se as seguintes condições: a razão de 1:4 (em massa) entre a vazão de gás da mistura ar/ CO_2 e a vazão de solução de amina; faixas de pressões de operação de 1,0 bar(abs) a 1,3 bar(abs), na absorção, e 2,2 bar(abs.), na dessorção; eficiência de 94% de recuperação de CO_2 . Os dados apresentados, comparando-se MEA e a mistura MDEA/PZ revelaram uma redução no fator de consumo energético no refeedor na ordem de 15 % no sistema de dessorção empregando-se MDEA/PZ. Estimativas de custo operacionais e custo de investimento foram computados e também incluídos para a análise econômica. O crédito obtido pela diferença no custo operacional anual, entre as duas alternativas avaliadas, variou entre US\$ 50.000,00/ano e US\$ 140.000,00, em função da volatilidade do preço do insumo energético.

Palavras-chave: Recuperação de CO_2 . Absorção e Dessorção. Aminas. Consumo Energético. Análise Econômica.

ABSTRACT

The aim of this work is to evaluate the economic performance - energy operational cost and investment cost - of the chemical absorption process using carbon dioxide desorption (CO_2), comparing the following solvents of the amine class: monoethanolamine (MEA) and (MDEA / PZ), using the Aspen Plus® process simulator. For primary evaluation purpose of the absorption operation, a mathematical absorption model was developed in a spreadsheet, to compare and validate the behavior of the temperature profiles resulting from simulations with Aspen Plus. This model was developed from the pre-specified mass transfer parameters and process variables. Both in the spreadsheet model and in the AspenPlus® model, the dimensioning of the absorption and desorption columns were defined from the process variables, considering hydrodynamic and mass transfer aspects. The simulations were performed initially in the open cycle, with the initial concentrations of amines, and then in closed cycle, with the bottom stream of the desorption column recycled to feed the absorption column, with almost equal load coefficients, emulating the closed loop. Based on the literature, the following conditions were established: the ratio of 1: 4 (by mass) between the gas flow of the air / CO_2 mixture and the flow rate of the amine solution; operating pressure ranges of 1.0 bar (abs) at 1.3 bar (abs) at absorption, and 2.2 bar (abs.) at desorption; efficiency of 94% CO_2 recovery. The data presented, comparing MEA and the MDEA / PZ mixture revealed a reduction in the energy consumption factor in the order of 15% in what concerns the desorption system using MDEA / PZ. Estimates of operating costs and investment costs were computed for economic analysis. The credit obtained by the difference in the annual operating cost between the two alternatives ranged from US \$ 50,000.00 / year to US \$ 140,000.00, due to the volatility of the energy price.

Keywords: CO_2 recovery. Absorption and Desorption. Amines. Energy Consumption. Economic analysis.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Projeções de emissões de CO ₂ (gigatoneladas/ano) em escala mundial.	21
Figura 2 - Seleção de Processo de Remoção de CO ₂ .	29
Figura 3 - Perfil de concentração na interface gás-líquido	31
Figura 4 - Esquema ilustrativo das concentrações no processo com reação química instantânea e irreversível, segundo o modelo de filme duplo. Fonte: Adaptado de SHERWOOD e PIGFORD (1975)	33
Figura 5 - Fator de aumento para uma reação de 2ª ordem em função do número de Hatta.	35
Figura 6 - Esquema da coluna de absorção. Fonte: (PAIVA, 2008)	37
Figura 7 - Características de perda de carga nas colunas recheadas	45
Figura 8 - Diagrama HETP x Velocidade do gás	46
Figura 9 - Correlação generalizada de perda de carga	47
Figura 10 - Correlação generalizada para queda de pressão em recheios estruturados	49
Figura 11 - Fator de capacidade x Parâmetro de fluxo. Fonte: LOCKETT(1986)	51
Figura 12 - Fator de capacidade x Parâmetro de fluxo	51
Figura 13 - Perfil de temperaturas e fluxo de CO ₂ na interface gás-líquido.	53
Figura 14 - Esquema simplificado do sistema de dessorção	56
Figura 15 - Monoetanolamina (MEA),	57
Figura 16 - Metildietanolamina (MDEA)	57
Figura 17 - Piperazina (PZ)	57
Figura 18 - Diagrama de processo simplificado de absorção química com amina.	61
Figura 19 - Razão de Refluxo x Custo	66
Figura 20 - Fluxograma de Processo –ASPEN Plus	70
Figura 21 - Fluxograma de blocos –Dimensionamento hidráulico do Absorvedor.	81
Figura 22- Fluxogramas de blocos-Balanço de Massa	82
Figura 23- Fluxogramas de blocos-Balanço de massa (continuação da Figura 22)	83
Figura 24 - Fluxograma de blocos-Balanço de Energia	84
Figura 25 - Perfis de temperaturas do gás e do líquido ao longo da coluna de absorção de MEA, calculadas	85

Figura 26 - Fluxograma do volume de controle do processo de dessorção	90
Figura 27 - Perfis de Temperaturas – Fase Líquida e Fase Vapor no Stripper	90
Figura 28- Perfis de temperatura no Absorvedor	91
Figura 29 - Carga térmica em função de CO ₂ recuperado no stripper.....	92
Figura 30 - Fator de energia (MJ/kg CO ₂) em função da eficiência de recuperação de CO ₂ (%).....	93
Figura 31 - Fluxo de análise de decisão técnico-econômica de investimento	94
Figura 32 - Evolução dos preços de óleo combustível 1A e gás natural .	
Fonte: Anuário estatístico brasileiro do petróleo (2016).	102
Figura 33 - Evolução do custo do vapor saturado a 143°C.	102
Figura 34 - Valor Presente Acumulado com investimento direto em função da Taxa de juros, para custo de tonelada de vapor de US\$8,67.	108
Figura 35 - Receita Operacional Líquida Acumulada (VPL) na taxa de desconto de 5 % a.a. para os seguintes custos de tonelada de vapor: US\$18,57; US\$12,95 e US\$8,67.	109
Figura 36 - Sistema de captura/tratamento de CO ₂ do gás da pós combustão da caldeira de.....	110

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Fator de espuma do sistema para aminas-pratos	52
Tabela 2 - Soluções aquosas de MEA,DEA,MDEA,PZ e misturas a 40°C.....	60
Tabela 3 - Características dos solventes usados em absorção	60
Tabela 4 - Desempenho de dispositivos internos de contato	63
Tabela 5 - Alimentação do gás, na entrada de fundo da coluna de absorção.....	68
Tabela 6 - Alimentação do líquido, na entrada de topo da coluna de absorção.	68
Tabela 7 - Grandezas e parâmetros de projeto da coluna de absorção.....	69
Tabela 8 - Condições de processo da corrente de alimentação Fluegas para a coluna de absorção	72
Tabela 9 - Corrente de alimentação da coluna de absorção (Leanin) na primeira iteração-MEA.....	72
Tabela 10 - Alimentação de solução aquosa de MEA reciclada na coluna de absorção na iteração final	73
Tabela 11- Corrente de alimentação da coluna de absorção (Leanin) na primeira iteração) - MDEA+PZ.	74
Tabela 12 - Alimentação de solução aquosa de MDEA/PZ pobre, na iteração final	75
Tabela 13 - Dispositivos de contato estudados no simulador de processos.-	76
Tabela 14 - Parâmetros de projeto de entrada das colunas de absorção e stripper – solução de MEA	76
Tabela 15 - Parâmetros de projeto de entrada das colunas de absorção e stripper – solução de MDEA/PZ	77
Tabela 16 - Principais parâmetros da geometria das colunas de prato.....	77
Tabela 17- Características do recheio estruturado.....	77
Tabela 18 - Resultados sumarizados dos cálculos das temperaturas, concentrações de MEA, frações molares de CO ₂ ao longo da altura do leito do Absorvedor	85
Tabela 19 - Resultados sumarizados dos cálculos do simulador para sistema de coluna de absorção (recheio estruturado) e stripper (pratos perfurados).....	87
Tabela 20 - Resultados sumarizados dos cálculos do simulador para sistema de coluna de absorção (recheio estruturado) e stripper (recheio estruturado).....	88
Tabela 21 - Demanda energética no reboiler do stripper (coluna de pratos e recheio).....	91
Tabela 22 - Demanda energética no condensador do Stripper - $\Delta t = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$	91

Tabela 23 - Fatores típicos de custo de investimento baseados no custo de equipamentos para projetos com valores inferiores à US\$ 10 MM.	95
Tabela 24 - Custos estimado dos recheios estruturados 250 Y	97
Tabela 25 - Custo estimado dos equipamentos principais – Sistema MDEA+PZ ...	98
Tabela 26 - Custo estimado do investimento total (COPEX) na combinação de recheios estruturados para o sistema de MDEA+PZ.....	98
Tabela 27 - Custo estimado do investimento total na combinação de recheio estruturado e pratos para o sistema de MDEA+PZ	99
Tabela 28 - Cálculo do custo de vapor a partir do gás natural e do óleo combustível.	101
Tabela 29 - Custos Unitários das matérias primas e utilidades.....	103
Tabela 30 - Custos operacionais (OPEX) – solução de MEA. Ano de ref: 2015. ...	103
Tabela 31 - Custos operacionais (OPEX) – solução de MDEA +PZ. Ano de ref: 2015.	104
Tabela 32 - Custos operacionais (OPEX) em base anual (US\$) – Diferenças entre cenários: MEA e MDEA+PZ	104
Tabela 33 - Custos operacionais (OPEX) em base anual (US\$) – Diferenças entre cenários: MEA e MDEA+PZ	105
Tabela 34 - Premissas da análise econômica para investimentos.	107
Tabela 35 - Valores de Investimento Direto parcelados em períodos da vida útil , em US\$, para a alternativa de recheio estruturado combinado com pratos.....	108

LISTA DE SÍMBOLOS

a_e	área efetiva específica do recheio, m^2/m^3
a_p	área da superfície do recheio por unidade de volume, m^2/m^3
A	área da secção transversal da coluna de recheio, m^2
C_A	concentração molar do componente A no líquido, $kmol/m^3$
C_B	concentração molar do componente B no líquido, $kmol/m^3$
C_A^i	concentração molar do componente A na interface do líquido – gás, $kmol/m^3$
C_A	concentração molar do componente A na fase líquida no seio do líquido, $kmol/m^3$
C_p	calor específico, J/kgK
C_i	custo em dólar, US\$
dA_i	área interfacial elementar do recheio, m^2
dh	elemento altura de diferencial de volume dentro da coluna, m
d	diâmetro nominal da coluna, m
D_{A-B}	difusividade de A em B
E	fator de aumento
$F_{P...}$	fator do recheio, $1/m$ (1/pé)
g	aceleração da gravidade, $9,8 m/s^2$
G	vazão molar do gás (ar + CO_2), $kmol/s$
G_M	fluxo molar de gás (ar + CO_2), $kmol/(m^2.s)$
h	altura do leito de recheio, m
Ha	número de Hatta
H_i	constante da lei de Henry para o componente A
H_B	entalpia específica do fundo, kJ/kg
H_F	entalpia específica de alimentação, kJ/kg
H_D	entalpia específica do destilado, kJ/kg
H_{OL}	altura de uma unidade de transferência, m
H_r	calor de absorção (reação), kJ/mol
HETP (AETP)	altura equivalente ao prato teórico, m
k_G	coeficiente de transferência de massa individual no lado do gás, m/s
K_G	coeficiente global de transferência de massa, $kmol / kPa \cdot m^2s$
k_L	coeficiente de transferência de massa individual no lado do líquido, m/s
k_{La_e}	coeficiente de transferência de massa volumétrico da fase líquida, $1/s$

k_{mn}	constante cinética de velocidade de reação definida para equação de 2ª ordem, $m^3/kmol\ s$
L	vazão molar de líquido (solução de amina), $kmol/s$
L_M	fluxo molar de líquido(solução de amina), $kmol/m^2\ s$
PM_i	massa molecular da espécie i
PM	massa molecular da mistura gasosa
L_p	perímetro molhado da secção transversal do recheio, m
m,n	ordens da reação química em relação ao componente A e B
n_i	vazão molar do componente i , $kmol/s$
N_A	fluxo molar de A (CO_2) na interface gás-líquido, $kmol\ (A)/m^2\ s$
N_{OG}	número de unidades de transferência para a fase vapor
N_{OL}	número de unidades de transferência para a fase líquida
N_{Sh}	número adimensional de Sherwood, fase gás
N_{Re}	número adimensional de Reynolds, fase gás
N_{SC}	número adimensional de Schmidt, fase gás
NPV	Valor Presente, US\$
P_A	pressão parcial do componente A, kPa
P	Pressão total do sistema, kPa
Q_F	energia de alimentação, kJ/h
Q_D	energia do destilado, kJ/h
Q_{WR}	energia do refluxo líquido, kJ/h
Q_{Bot}	energia do produto de fundo, kJ/h
Q_L	vazão volumétrica do líquido, m^3/s
Q_G	vazão volumétrica do gás, m^3/s
R	constante universal dos gases, $8,314 \times 10^{-3}\ kPa\ m^3/(mol\ K)$
R_r	razão de refluxo externodefinida como W_D/W_R
t_c	tempo de contato para transferência de massa por difusão
T	temperatura, K
U	coeficiente de transporte de calor na fase gasosa , $kJ\ m^{-2}\ K^{-1}$
U_s	velocidade superficial do gás, m/s
V	volume da solução, m^3
V_i	volume do componente i , m^3
W_L	vazão mássica de líquido, kg/s

W_G vazão mássica de gás, kg/s

W_F vazão mássica de alimentação, kg /h

W_B vazão mássica de fundo, kg/h

W_D vazão mássica de destilado, kg/h

W_{WR} vazão mássica de refluxo líquido, kg/h

x_A fração molar do componente A (CO_2) na fase líquida no seio do líquido

y_A fração molar do componente A (CO_2) na fase vapor no seio do gas

y_A^i fração molar do componente A (CO_2) na fase vapor na interface gás-líquido

y_A^* fração molar do componente A (CO_2) que estaria em equilíbrio com a fase líquida

LISTA DE SÍMBOLOS GREGOS

δ_L	espessurado filme líquido referente à teoria do filme
δ_G	espessura do filme de gás referente à teoria do filme
Δ	diferença entre grandezas
ρ_L	densidade do líquido, kg/m^3
ρ_G	densidade do gás, kg/m^3
σ	tensão superficial, N/m
μ_G	viscosidade do gás, kg/m s
μ_L	viscosidade do líquido, kg/m s
ν	viscosidade cinemática do líquido, cSt
λ	fator de absorção
η	eficiência de recuperação de CO_2

LISTA DE INDÍCES INFERIORES

A	componente A
B	componente B
Bot	vazão de fundo
c	tempo de contacto
F	alimentação
G	fase gasosa
I	gás inerte
M	molar
m	ordem em relação ao componente A
n	ordem em relação ao componente B e número de estágios no modelo Excel referente ao perímetro molhado
r	razão de refluxo
WR	refluxo líquido

LISTA DE ÍNDICES SUPERIORES

- i interface
- b seio da fase considerada
- * em equilíbrio com a concentração principal na outra fase

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	21
1.1 Objetivos Gerais	23
1.2 Objetivos Específicos	23
2. REVISÃO DA LITERATURA	25
2.1 Processos de Remoção de CO ₂	25
2.1.1 Absorção Física e Absorção Química	26
2.1.2 Destilação Criogênica	27
2.1.3 Adsorção	27
2.1.4 Separação de Membrana	28
2.2 Absorção e Dessorção com Reação Química	29
2.2.1 Teoria da absorção física	30
2.2.2 Teoria da absorção com reação química	31
2.2.3 Transferência de massa na fase líquida com reação química	33
2.2.4 Coeficiente de transferência de massa na absorção química	35
2.3 Correlações de Balanço de Massa e de Energia	36
2.3.1 Balanço de Massa para absorção monocomponente	36
2.3.2 Cálculo da altura da coluna de recheio na absorção monocomponente	38
2.3.3 Parâmetros de transferência de massa	42
2.3.4 Hidrodinâmicas (capacidade, eficiência) para as colunas de recheio e de pratos	44
2.3.5 Desenvolvimento dos balanços de energia	53
2.4 Processos de Absorção e Dessorção de CO ₂	57
2.4.1 Principais solventes e suas características físico-químicas	57
2.4.2 Descrição simplificada de Processo	60
2.5 Características de Colunas de Absorção e Dessorção	62
2.5.1 Dispositivos de contato líquido/vapor	62
3. MATERIAIS E MÉTODOS	65
3.1. Dados e especificações para o modelo implementado em planilha eletrônica	67

3.2 Simulações utilizando o simulador de processo Aspen para o processo de remoção de CO ₂	69
3.2.1 Parâmetros de processo de entrada constantes nas simulações	71
3.2.2 Razão de refluxo, vazão de destilado e dimensionamento dos equipamentos de dessorção e absorção	75
3.2.3 Estudo dos dispositivos de contato das colunas	76
3.2.5 Geometria do Prato Perfurado e características dos recheios	77
3.2.6 Fator de Espuma	78
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	79
4.1 Modelo matemático em planilha eletrônica para o processo de absorção	79
4.2 Resultados das simulações com o programa ASPEN Plus para as soluções de MEA e de MDEA/PZ	86
4.3 Análise de sensibilidade da demanda energética no sistema	92
4.4 Análise técnico-econômica do sistema de absorção e dessorção de CO ₂	93
4.4.1 Custo de Investimento (CAPEX)	94
4.4.2 Custos Operacionais e economia em dólar americano	99
4.4.3 Análise Econômica do Investimento para a instalação de absorção e dessorção de CO ₂ com solução de MDEA+PZ.	105
5. CONCLUSÕES	111
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	113
ANEXO A : Modelo matemático da Coluna de Absorção	
ANEXO B : Dados de Saída das Simulações de MDEA +PZ e MEA .-Aspen Plus. Iteração Final.....	
ANEXO C: Folha de Dados das Colunas de Absorção e Dessorção (Stripper) e Trocadores de Calor- (MDEA+PZ)	

1. INTRODUÇÃO

O gás dióxido de carbono (CO_2) é o maior contaminante causador do efeito estufa gerado pela queima de materiais combustíveis na matriz energética (60%), meios de transporte (30%) e aquecimento de residências em países frios (10%) (ARESTA, 2003). Segundo informações da Agência Internacional de Energia (IEA), as emissões globais de gases lançados na atmosfera como CO_2 foram de 32 gigatoneladas em 2014.

As projeções de emissões de CO_2 na atmosfera em escala mundial são muito sensíveis ao consumo dos combustíveis fósseis (óleo combustível do petróleo, gás natural e carvão), segundo a agência de energia americana U.S. Energy Information Administration, conforme ilustrado na Figura 1.

O CO_2 recuperado pode ser utilizado em aplicações industriais, na produção de uréia, no tratamento de água, como fluido refrigerante e na produção de gelo seco ou reinjetado em poços de petróleo esgotados e aquíferos salinos em armazenagem geológica, na condição supercrítica (SELEGHIM, 2013).

Figura 1 - Projeções de emissões de CO_2 (gigatoneladas/ano) em escala mundial.

Fonte: U.S Energy Information Administration, Annual Energy Outlook(2017)

Dentre as tecnologias atualmente utilizadas para captura de CO₂, a absorção química em um solvente líquido é provavelmente a mais importante empregada na indústria para concentrações de CO₂ inferiores a 15%, em temperaturas entre 20°C e 60 °C e pressões próximas à ambiente.

O processo de absorção mais usual é com o emprego de solução de monoetanolamina (MEA). Este processo consome em média cerca de 340 kWh por tonelada de CO₂ removido. Enquanto que no processo de destilação criogênica tem-se um consumo de 600 kWh a 800 kWh por tonelada de CO₂ removido.

A MEA é a alcanolamina mais utilizada no processo de absorção, por proporcionar maior velocidade de reação na absorção (alta entalpia de absorção). Entretanto, o uso da MEA (amina primária) requer maior energia na dessorção, além da sua agressividade corrosiva para aço carbono, com impacto no custo de operação e no custo do investimento.

Recentemente, novas classes de aminas, como a mistura de mononodietilamina (MDEA), amina terciária, aditivada com piperazina (PZ), amina secundária, tem sido objeto de interesse na captura de CO₂. Combinando-se alta entalpia de reação da amina secundária com a baixa entalpia de reação da amina terciária, com razoável taxa de absorção na operação e menor demanda de energia na operação de dessorção, além de aumentar a resistência à degradação térmica e oxidativa da solução, com menor taxa de corrosão nos equipamentos (CLOSMANN et al., 2009).

As avaliações preliminares da operação de absorção, por meio do modelo implementado em planilha eletrônica - Excel, se deram a partir de parâmetros de transferência de massa e de transferência de energia obtidos em estudo desenvolvido por Rodriguez (2011) e complementados por dados disponíveis na literatura.

Realizaram-se simulações elaboradas a partir do programa Aspen Plus para o estudo de recuperação de CO₂ em processo de absorção e dessorção, tanto para a solução de MEA como para a solução MDEA/PZ. Possibilitando-se, assim uma análise técnico-econômica comparativa da utilização de cada um dos solventes. As simulações foram realizadas em regime estacionário e, inicialmente, em ciclo aberto para maior entendimento do processo. Na sequência, estudou-se a simulação emulando-se o ciclo fechado. A capacidade de recuperação de CO₂ da mistura de ar

foi investigada em função de diferentes variáveis, tais como: razão de refluxo, vazão de destilado, concentração de amina, concentrações de carbamato e bicarbonato na entrada e na saída das colunas de absorção e dessorção. O estudo considerou, também, as condições operacionais associadas aos tipos de dispositivos de contato internos às colunas e da demanda energética para cada solução de amina, como base de dados para a análise econômica de ambas as alternativas estudadas.

1.1 Objetivos Gerais

Avaliar o desempenho técnico e econômico do processo de absorção química seguida de dessorção de dióxido de carbono (CO_2) por meio da comparação entre solventes da classe das aminas: monoetanolamina (MEA) e mistura metildietanolamina/piperazina (MDEA/PZ).

1.2 Objetivos Específicos

- a) Pré dimensionar um sistema constituído de uma coluna de absorção em escala industrial de recheio estruturado, inicialmente por modelo implementado em planilha Excel e consolidar posteriormente por simulação o sistema combinado de coluna de absorção e de dessorção de CO_2 com seus equipamentos associados utilizando o aplicativo Aspen Plus.
- b) Determinar os perfis de temperatura da coluna, a partir do número de estágios calculados via transporte de massa e de energia, no tratamento de uma vazão industrial do sistema ar e CO_2 .
- c) Comparar a influência de cada solução amínica no consumo de energia ao se tratar uma vazão industrial do sistema ar e CO_2 .
- d) Comparar a influência de cada solução amínica, avaliando-se por meio de simulação o desempenho energético concomitantemente com o efeito no dimensionamento das colunas e seus equipamentos associados.
- e) Estimar o custo operacional para as situações simuladas com a solução de MEA e com a solução de MDEA/PZ.
- f) Estimar o custo do investimento para o resultado simulado de MDEA/ PZ para a instalação do sistema completo de recuperação de CO_2

- g) Elaborar a análise econômica do investimento com base no crédito obtido pelas diferenças nos custos operacionais entre as duas alternativas de soluções amínicas avaliadas.

7

2. REVISÃO DA LITERATURA

Na presente revisão, inicialmente na subdivisão 2.1 faz-se uma breve apresentação das tecnologias utilizadas para os processos de remoção de CO_2 de uma corrente de gás industrial com ênfase nas tecnologias em processos de pós combustão. Na subdivisão 2.2 são apresentados conceitos gerais de absorção de gases e regeneração de solvente como sem reação química (absorção química e física). Apresentam-se na subdivisão 2.3 os balanços de massa e de energia para colunas de absorção e dessorção e aspectos hidrodinâmicos das colunas. Na subdivisão 2.4 é apresentado o processo de absorção e dessorção simplificado. Finalmente, na subdivisão 2.5, são apresentadas as características dos dispositivos de contato (tipos de recheio e prato) para colunas de absorção e dessorção.

2.1 Processos de Remoção de CO_2

Segundo Aresta (2003) as principais rotas tecnológicas para remoção de CO_2 são:

- Pré combustão; combustão do combustível de correntes com oxigênio puro e gás residual da queima reciclado para produção de altas concentrações de CO_2 .
- Eliminação de carbono antes da pré combustão, convertendo o combustível em hidrogênio com a eliminação de CO_2 e particulados, após o CO produzido reagir com vapor num reator de leito catalítico.
- Processos de Pós Combustão.

A captura de CO_2 de gases residuais originários principalmente após a combustão, objeto deste estudo, pode ser efetuado por quatro diferentes processos, a saber :

- Absorção Física e Absorção Química
- Destilação Criogênica
- Adsorção
- Separação de Membrana

2.1.1 Absorção Física e Absorção Química

O processo de absorção da substância gasosa de interesse, no caso o CO_2 , é seguido do processo de regeneração do solvente (regeneração ou esgotamento), para transferência da substância absorvida no solvente para o vapor d'água. A absorção e regeneração podem ser realizadas em dispositivos de contato, principalmente em colunas de recheio ou de pratos.

A seguir faz-se uma descrição breve da absorção física e da absorção química, para comparação com as demais tecnologias apresentadas, nas faixas de aplicações e de consumo de energia.

Absorção Física

Atualmente existem várias unidades de remoção de CO_2 por absorção física, como, por exemplo, a de La Barge, Wyoming e em Dakota do Norte, nos Estados Unidos, utilizando solventes como o Selexol e o Rectisol, composto de metanol (WONG e BIOLETTI, 2002). A operação ocorre em condições de pressões elevadas e baixas temperaturas na faixa de 0°C e 5°C . O solvente é regenerado por aquecimento e em pressão reduzida.

Este processo é empregado para grandes volumes de gás, como no tratamento de gás de natural para remoção de CO_2 e H_2S e na remoção de CO_2 do gás de síntese e da corrente de hidrogênio em plantas de gaseificação de carvão.

Absorção Química

Processos de absorção química utilizam solventes de natureza reativa com o componente gasoso que se deseja absorver. O componente absorvido é convertido num composto estável como consequência da reação com o solvente reativo. Da mesma forma que a absorção física, o processo absorção química e regeneração do solvente é realizada geralmente em colunas de recheio ou de pratos. A absorção química é comumente utilizada em plantas comerciais para tratar até 800 ton/dia de gás (WONG e BIOLETTI, 2002).

Os solventes reativos, normalmente empregados na absorção com reação química para absorção de CO_2 em correntes gasosas diluídas inferiores a 15%, constituem-se de soluções aquosas de alcanolaminas, por proporcionar em alta

solubilidade (KOHL e RIESENFELD, 1985). As alcanolaminas são uma classe de compostos químicos orgânicos nitrogenados derivados da amônia (NH_3), que resultam da substituição parcial dos hidrogênios da amônia por radicais alquila ou arila.

O processo de absorção por solução de aminas (MEA) consome em média cerca de 340 kWh por tonelada de CO_2 removido contra de 600 kWh a 800 kWh por tonelada de CO_2 removido no processo de destilação criogênica (SIMONS, 2010).

2.1.2 Destilação Criogênica

A destilação criogênica é o processo comercial utilizado economicamente para purificação de gases com concentrações elevadas de CO_2 , acima de 75%. O processo compreende o resfriamento dos gases para liquefação do CO_2 em baixíssima temperatura, ao redor de -57°C , pronto para ser transportado em tubo, nas pressões entre 60 bar e 200 bar, para consumo final ou estocagem. A sua maior desvantagem reside no custo energético na refrigeração. No entanto a destilação criogênica tem sido demonstrada vantajosa em tratar gases em alta pressão como no processo de pré-combustão para descarbonização.

As correntes gasosas com alto teor de hidrocarbonetos requerem o uso de uma coluna de destilação para purificação do CO_2 . O sistema de refrigeração utiliza reciclo de CO_2 comprimido, liquefeito e expandido em pressões pouco acima de 5,18 bar, para suprir a carga de refrigeração necessária (ARESTA, 2003).

2.1.3 Adsorção

O processo de adsorção de um constituinte de uma mistura gasosa consiste de duas etapas: adsorção e dessorção, envolvendo-se superfícies sólidas adsorventes.

A adsorção do CO_2 numa mistura de gases ocorre no processo de adsorção física. Quanto maior a afinidade entre a espécie adsorvida (adsorbato) e a superfície sólida adsorvente, mais difícil e energeticamente intensivas é a etapa de dessorção, para regenerar o adsorvente (MADEIRA, 2008).

Os adsorventes costumeiramente empregados na adsorção de CO₂ são as zeólitas, carvão ativado e sílica gel, com predominância para as zeólitas.

A mistura de gases contendo CO₂ proveniente do processo de combustão nas usinas térmicas de geração de energia elétrica e nas refinarias de petróleo, na produção de hidrogênio de alta pureza, são liberados em temperaturas elevadas entre 300°C e 500 °C e em alta pressão entre 4 a 10 bar para ser purificada em sistemas que operam segundo ciclos de balanço de pressão denominado PSA (Pressure Swing Adsorption). Quanto maior for a pressão mais eficiente será a adsorção e vice versa na etapa de dessorção e regeneração do leito sólido adsorvente (ARESTA, 2003).

A tecnologia de PSA emprega vários vasos de pressão de leito fluidizado, operando em ciclos alternados de adsorção e dessorção. A tecnologia PSA para captura de CO₂ apresenta desvantagens no seu elevado custo de energia na regeneração do adsorvente, além da demora nesta operação de até 24 horas. A adsorção é eficiente apenas na remoção de percentuais pequenos de contaminantes na alimentação (KELLER, 1984).

2.1.4 Separação de Membrana

A separação de membrana ocorre pelo grau de afinidade de certos compostos com o material da membrana. Os componentes da corrente de alimentação que atravessam a membrana se denominam permeado. Os componentes que são barrados ou não permeados que não tenham afinidade com a membrana são denominados retentado ou concentrado (MEDEIROS et al., 2009).

O emprego da tecnologia de separação de membrana é de uso em aplicações comerciais, notadamente na separação de CO₂ em concentrações superiores a 2% de correntes gasosas. Embora do ponto de vista energético seja atraente, quando comparada com outras tecnologias requerendo cerca de 70 kWh por ton CO₂ recuperado, a separação de membranas ainda apresenta limitações tecnológicas (SIMONS, 2010) no desenvolvimento das membranas. As membranas geralmente constituídos de materiais poliméricos apresentam perda de eficiência na separação (*swelling stress*) quando expostas ao CO₂ em temperaturas e pressões elevadas (ARESTA, 2003). Atualmente tem sido objeto de estudo a aplicação de sistemas

híbridos combinado dos processos de absorção de aminas com separação por membranas, para remoção do CO_2 na corrente de gás natural.

A Figura 2 ilustra uma indicação para a seleção de processo entre a absorção e separação por membrana, para uma determinada condição de vazão de gás e concentração de CO_2 na alimentação (MEDEIROS et al., 2009).

Figura 2-Seleção de Processo de Remoção de CO_2 .

Fonte: MEDEIROS et al. (2009).

2.2 Absorção e Dessorção com Reação Química

O processo de absorção e dessorção com reação química com alcanolaminas para remoção do CO_2 e de H_2S de uma corrente gasosa é uma das tecnologias mais utilizadas comercialmente. Sistemas baseados em soluções aquosas de alcanolaminas proporcionam a remoção eficiente de CO_2 com um grau de pureza elevado de correntes gasosas diluídas no limite de 15% de CO_2 , em condições entre 20°C e 60°C , operação de absorção e baixas pressões próximas à pressão atmosférica (KOHL e RIESENFELD, 1985).

As alcanolaminas removem o CO_2 do gás pela reação exotérmica do CO_2 com o grupo funcional amina da alcanolamina. O efeito da reação química é o de aumentar a velocidade de absorção, comparado com os sistemas onde a absorção é puramente física.

A velocidade de absorção do gás é determinada pelas condições físico-químicas (solubilidade do gás, difusividade do gás dissolvido e do reagente na solução; cinética da reação; viscosidade e densidade do líquido e pelas condições hidrodinâmicas do sistema : vazão e geometria do equipamento.

2.2.1 Teoria da absorção física

A absorção física de um gás em líquido pode ser descrita em três etapas:

- I. Difusão/convecção do gás na direção da superfície líquida;
- II. Solubilização no líquido;
- III. Transporte do gás dissolvido da superfície para o seio do líquido por difusão/convecção.

O fluxo de transferência de massa do componente A (soluto) que é transferido do gás para o líquido pode ser expresso pela equação (2.2.1) e pela equação (2.2.2) (TREYBAL, 1981), expressa em termos do coeficiente global de transferência de massa e da fração molar do componente A (y_A^*) que estaria em equilíbrio com a fase líquida.

$$N_A = k_G P (y_A - y_A^i) = k_L (C_A^i - C_A) \quad (2.2.1)$$

$$N_A = K_G P (y_A - y_A^*) \quad (2.2.2)$$

A Figura 3 esquematiza o modelo da teoria do filme de Lewis e Whitman de 1924. Admite-se a existência de dois filmes estagnados, um na fase gasosa e outro na fase líquida, junto à interface gás-líquido. A transferência de massa ocorre apenas por difusão. No filme líquido de espessura δ_L a concentração de gás solúvel decresce de C_A^i na interface até C_A^b no seio do líquido. O coeficiente de transferência de massa k_L é proporcional à difusividade do componente A (soluto) no solvente B e inversamente proporcional à espessura do filme líquido δ_L .

Figura 3- Perfil de concentração na interface gás-líquido

Fonte: SHERWOOD e PIGFORD (1975)

Coeficiente de transferência de massa na absorção física

Com base na teoria do filme dupla acima exposta, a relação entre o coeficiente global de transferência de massa e os coeficientes individuais de transferência pode ser expressa pela equação (2.2.3) (TREYBAL, 1981).

$$\frac{1}{K_G} = \frac{1}{k_G} + \frac{H}{k_L} \quad (2.2.3)$$

2.2.2 Teoria da absorção com reação química

Na absorção química na fase líquida com consumo de gás dissolvido as seguintes etapas devem ser consideradas (RODRIGUEZ, 2011):

- I. Difusão do gás solúvel no seio da fase gasosa para a interface, onde se considera que o equilíbrio físico é imediatamente estabelecido;
- II. Difusão do gás dissolvido da interface para o seio do líquido; simultaneamente o reagente líquido difunde-se desde o seio do líquido para a interface;
- III. Reação química do soluto com reagentes presentes na fase líquida;
- IV. Difusão dos produtos da reação, dentro da fase líquida.

No caso de uma reação química instantânea e irreversível que ocorre na fase líquida, admite-se que o soluto A (gás) é absorvido de uma mistura de gases por uma solução líquida de substância B, que reagem entre si, de acordo com a equação (2.2.4) (RODRIGUEZ, 2011):

O componente A difunde-se até a interface, onde se dissolve. A partir daí tem-se a difusão de A no líquido no sentido contrário à difusão de B. Simultaneamente tem-se a formação de C que se difunde na direção do seio do líquido. O consumo rápido de B devido à reação, na região próxima à superfície, permite que o soluto gasoso A difunda-se em uma parte do filme líquido, na qual reage rapidamente com B. Estabelece-se assim uma região onde acontece a reação entre A e B, próximo da interface gás/ líquido, segundo a teoria do filme duplo. As velocidades de difusão de A e de B são iguais (SHERWOOD e PIGFORD, 1975).

Um exemplo ilustrativo do mecanismo de absorção com reação está ilustrado no esquema da Figura 4. Neste esquema, o eixo da ordenada pode representar tanto a pressão ou as concentrações dos componentes A, B e C. A abscissa representa a posição no filme. PQ representa o plano de interface entre a fase gás e a fase líquida. SW representa o plano de reação, onde os componentes A e B reagem, formando o componente C. O componente A difundiu-se no filme do gás e no filme líquido. A concentração C_A no líquido é igual a zero devido à consideração de reação química instantânea. Ao mesmo tempo o componente B difundiu-se do seio do líquido para a zona de reação, e o produto da reação difundiu-se para o seio do líquido. Assume-se que o componente C seja não volátil.

Figura 4- Esquema ilustrativo das concentrações no processo com reação química instantânea e irreversível, segundo o modelo de filme duplo.

Fonte: Adaptado de SHERWOOD e PIGFORD (1975)

2.2.3 Transferência de massa na fase líquida com reação química

O fluxo de transferência de massa do componente A (soluto) na fase líquida, quando há uma reação química pode ser expresso por:

$$N_A = E k_L (C_A^i - C_A^b) \quad (2.2.5)$$

Sendo E o fator de aumento, que indica a proporção de incremento na velocidade de transferência de massa com reação química em relação à velocidade de transferência de massa por absorção física. Comparando-se as equações (2.2.1) e (2.2.5), tem-se que E é a relação entre a velocidade de absorção com reação química e a velocidade de absorção física, para uma mesma diferença de concentração na fase líquida e mesmas condições hidrodinâmicas,

Segundo Astarita et al., (1983), dependendo das velocidades relativas de reação e difusão, na fase líquida, o processo de absorção com reação química pode ser classificado em:

- a. Regime muito lento
- b. Regime rápido
- c. Regime intermediário e lento
- d. Regime instantâneo.

A aplicação do modelo do filme duplo permite a definição do parâmetro que relaciona a velocidade de reação química máxima possível no filme líquido e a velocidade de absorção máxima através do mesmo filme. Este parâmetro denomina-se número de Hatta e é o indicador do regime em que a reação ocorre.

Considerando a cinética da reação química irreversível na fase líquida de ordem m e n , em relação às espécies químicas A (soluto) e B (solvente) presente em excesso, tem-se para equação cinética da reação química:

$$r_A = k_{mn} C_A^m C_B^n \quad (2.2.6)$$

Neste caso a equação para o número de Hatta é expresso pela equação (2.2.7) em função da difusividade de A no líquido, D_{AB} , da constante cinética, k_{mn} , das concentrações de A na interface, C_A^i , e de B no seio do líquido, C_B .

$$Ha = \frac{1}{k_L} \left[\left(\frac{2}{m+1} \right) \cdot k_{mn} D_{AB} C_A^i{}^{m-1} C_B^n \right] \quad (2.2.7)$$

O número adimensional de Hatta caracteriza a importância da velocidade de reação em relação à taxa de difusão. Segundo Danckwerts (1970), o fator de aumento se correlaciona com o número de Hatta, para uma reação de segunda ordem, conforme ilustrado na Figura 5.

Figura 5: Fator de aumento para uma reação de 2ª ordem em função do número de Hatta.

Fonte : DANCKWERTS (1970)

Como se pode observar na Figura 5, o número de Hatta (Ha) e o fator de aumento (E) definem a região do regime da velocidade de reação na fase líquida.

2.2.4 Coeficiente de transferência de massa na absorção química

Na absorção química tal como a absorção do CO_2 em soluções de amina, o coeficiente global também pode ser expresso e determinado em função dos coeficientes individuais de transferência de massa de gás e de líquido. O coeficiente de transferência de líquido com reação (k_L) é igual ao produto do coeficiente de transferência de líquido sem reação com o fator de aumento E:

Logo para absorção química, tem-se:

$$\frac{1}{K_G} = \frac{1}{k_G} + \frac{H}{Ek_L^0} \quad (2.2.8)$$

Lembrando que k_L^0 denota o coeficiente de transferência de massa na ausência de reação química.

O fator de aumento E engloba termos relacionados ao equilíbrio químico da reação entre solvente e soluto transferido, levando em conta as concentrações e também incluindo o termo k_{L0} no denominador, pela equação (2.2.8) de forma que o k_L^0 , se cancela. Esta característica implica que o termo $\frac{H}{Ek_L^0}$ seja independente do tamanho e condições específicas na coluna em que este parâmetro foi obtido (RODRIGUEZ, 2011).

Em equipamentos de absorção de gases tais como colunas de recheio, a área interfacial (a) é considerada outro parâmetro importante. Costuma-se apresentar as taxas de absorção em termos de coeficientes de transferência baseados em unidades de volume da coluna de absorção. Feita essa adaptação, modifica-se a equação (2.2.9) como se segue (RODRIGUEZ, 2011):

$$\frac{1}{K_G a_e} = \frac{1}{k_G a_e} + \frac{H}{Ek_L^0 a_e} \quad (2.2.9)$$

Sendo: a_e a área interfacial específica de transferência de massa por volume de leito absorvedor.

A influência das condições hidrodinâmicas do sistema sobre o processo de absorção é representada pelas velocidades de transferência de massa, tanto no lado do líquido quanto do gás, e pela área interfacial efetiva (a_e).

2.3 Correlações de Balanço de Massa e de Energia

2.3.1 Balanço de Massa para absorção monocomponente

A absorção gasosa envolve a transferência de massa de um ou mais componentes da fase gasosa para o solvente líquido. A operação inversa denomina-se dessorção (“stripping”).

O esquema da coluna de absorção do tipo recheada, com fluxos líquidos e gasosos em contracorrente está representado na Figura 6 para este estudo de recuperação de CO_2 da mistura gasosa com ar, sendo absorvido numa solução de alcanolamina.

Figura 6 - Esquema da coluna de absorção. Fonte: (PAIVA, 2008)

As vazões molares de gás e líquido usualmente são usualmente expressas pelos fluxos molares G_M e L_M :

$$G_M = \frac{G}{A} \quad (2.2.10)$$

$$L_M = \frac{L}{A} \quad (2.2.11)$$

O balanço de massa de A (CO_2) para o elemento diferencial de altura dh , envolvendo as duas fases é expresso por :

$$d(G_M y_A) = d(L_M x_A) \quad (2.2.12)$$

Os fluxos molares G_M e L_M podem ser expressos pelos respectivos fluxos molares de inertes G'_M e L'_M pelas expressões:

$$G_M = \frac{G'_M}{1 - y_A} \quad (2.2.13)$$

$$L_M = \frac{L'_M}{1-x_A} \quad (2.2.14)$$

Substituindo-se as equações (2.2.13) e (2.2.14) na equação (2.2.12) e em seguida realizando a sua integração, ao longo da coluna, do topo até a sua base, obtém-se a equação (2.2.15), relacionando os fluxos molares de inertes :

$$G_M \left[\frac{y_A}{1-y_A} - \frac{y_A}{1-y_{A2}} \right] = L_M \left[\frac{x_A}{1-x_A} - \frac{x_A}{1-x_{A2}} \right] \quad (2.2.15)$$

No caso de sistemas diluídos como no caso deste estudo, tem-se: $G_M \cong G'_M$, $L_M \cong L'_M$, $1-y_A \cong 1$, $1-x_A \cong 1$.

Simplificando-se a equação (2.2.15), resulta a relação linear de balanço de massa na secção da coluna de absorção, para a espécie química A na equação (2.2.16).

$$G_M(y_A - y_{A2}) = L_M(x_A - x_{A2}) \quad (2.2.16)$$

2.3.2 Cálculo da altura da coluna de recheio na absorção monocomponente

Do balanço de massa para o componente A (CO_2), no elemento dh para a fase gasosa até a interface, tem-se:

$$-d(Gy_A) = N_A dA_i \quad (2.2.17)$$

A área interfacial elementar pode ser expressa em função da área específica interfacial, a_e , do recheio por (TREYBAL, 1981):

$$dA_i = a_e dV = a_e A dh \quad (2.2.18)$$

No caso de transferência exclusivamente do soluto A, da fase gasosa para a líquida, o balanço na fase gasosa pode ser simplificado pela equação (2.2.19) :

$$dG_M = G_M \frac{dy_A}{1-y_A} \quad (2.2.19)$$

Fazendo-se as substituições na equação (2.2.20), resulta , para dh :

$$dh = - \frac{G_M dy_A}{N_A a_e (1-y_A)} \quad (2.2.20)$$

Substituindo o termo de fluxo molar na Equação (2.2.18) obtem-se:

$$dh = - \frac{G_M}{K_G P a_e (y_A - y_A^*)(1-y_A)} dy_A \quad (2.2.21)$$

Considerando-se a média logarítmica:

$$y_{B, LN}^* = (1-y_A)^*_{LN} \quad (2.2.22)$$

Multiplicando-se e dividindo-se a equação (2.2.21) por $y_{B, LN}^*$ e integrando-se do fundo, y_1 , ao topo, y_2 , da coluna, tem-se:

$$\int_0^h dh = - \int_{y_1}^{y_2} \frac{G_M y_{B, LN}^*}{K_G P a_e y_{B, LN}^* (y_A - y_A^*)(1-y_A)} dy_A \quad (2.2.23)$$

A equação (2.2.33) é usualmente expressa da seguinte forma:

$$h = N_{OG} H_{OG} \quad (2.2.24)$$

Sendo: $H_{OG} = \frac{G_M}{K_G a_e P y_{B, LN}^*}$ (2.2.25)

O H_{OG} é a altura da unidade de transferência global média (AUT) cuja variação ao longo da coluna é pouca intensa.

$$N_{OG} = \int_{y_2}^{y_1} \frac{y_{B, LN}^* dy_A}{(y_A - y_A^*)(1-y_A)} \quad (2.2.26)$$

O N_{OG} representa o número de unidades de transferência.

Demonstra-se que, para sistemas diluídos, as expressões para H_{OG} e N_{OG} podem ser simplificadas. Tal simplificação se dá em função da linearidade da curva de equilíbrio para sistemas diluídos, muitas vezes representados pela lei de Henry:

$$y_A^* = mx_A \quad (2.2.27)$$

$$m = \frac{H}{P} \quad (2.2.28)$$

A integral da equação (2.2.36), quando se tem soluções diluídas, como no caso deste sistema estudado simplifica-se para a equação (2.2.39):

$$N_{OG} = \frac{LN \left[\frac{y_{A1} - mx_{A2}}{y_{A2} - mx_{A2}} \left(1 - \frac{1}{\lambda} \right) + \frac{1}{\lambda} \right]}{1 - \frac{1}{\lambda}} \quad (2.2.29)$$

$$\lambda = \frac{L_M}{mG_M} \quad (2.2.30)$$

Sendo: m a constante de equilíbrio e λ , o denominado fator de absorção.

No caso de reação rápida na fase líquida, tem-se $y_A^* = 0$ e a expressão (2.2.29) passa a ser expressa pela equação (2.2.31):

$$N_{OG} = LN \left(\frac{y_{A1}}{y_{A2}} \right) \quad (2.2.31)$$

A expressão para a altura de unidade de transferência também pode ser simplificada através da consideração de sistema diluído, caso em que o $y_{B, LN}^*$ é muito próximo de um. Sendo assim tem-se a equação (2.2.32).

$$H_{OG} = \frac{G_M}{K_G a_e} \quad (2.2.32)$$

No caso da operação de dessorção (stripping) tem-se analogamente:

$$N_{OL} = \frac{1}{1-\lambda} \ln [(1-\lambda) \left(\frac{x_{A2}-y_{A1}/m}{x_{A1}-y_{A1}/m} \right) + \lambda] \quad (2.2.33)$$

O N_{OL} representa o número de unidades de transferência.

As expressões apresentadas para o cálculo do N_{OG} e N_{OL} nesta subdivisão referem-se a sistemas isotérmicos.

Nas práticas de projeto, embora menos rigoroso, pode-se utilizar o conceito de altura equivalente ao prato teórico AETP (*HETP*). O *HETP* é determinado experimentalmente em função do tipo e tamanho do recheio e vazões de gás e de líquido (DIAB e MADDOX,1982). Nas práticas de projeto o *HETP* é utilizado para expressar a eficiência de separação do recheio (MALONEY,2008).

A altura total de recheio da coluna é determinada em função do *HETP* e do número de estágios ou pratos teóricos calculados:

$$h = HETP * N_T \quad (2.2.34)$$

Onde N_T significa o número de estágios ou pratos teóricos.

Conforme (MALONEY, 2008), pode-se também correlacionar o *HETP* com o λ e o H_{OG} :

$$HETP = H_{OG} \left[\frac{\ln \lambda}{\lambda - 1} \right] \quad (2.2.35)$$

Os dados de transferência de massa para colunas recheadas são freqüentemente apresentadas na literaturana forma de correlações para AUT's.

Na tabela 5.24 do Perry's Chemical Engineer Handbook (MALONEY, 2008) são relacionadas por tipo de aplicação, correlações para o cálculo das alturas de unidade de transferência da fase gás, H_G , e da fase líquida, H_L e aos quais foram utilizadas para este estudo, representadas na próxima subdivisão , na seqüência.

2.3.3 Parâmetros de transferência de massa

Área efetiva específica de transferência de massa - a_e

Para recheio estruturado do tipo metal corrugado Mellapack 250Y, selecionado para este estudo, utilizou-se a correlação do American Institute of Chemical Engineers (ROCHELLE et al., 2011) para o cálculo da área efetiva, expressa pela equação (2.3.1).

$$\frac{a_e}{a_p} = 1,34 \left[\left(\frac{\rho_L}{\sigma} \right) g^{\frac{1}{3}} \left(\frac{Q}{L_p} \right)^{\frac{4}{3}} \right]^{0,116} \quad (2.3.1)$$

Sendo: a_e , área efetiva específica do recheio, $m^2 m^{-3}$; a_p , área da superfície do recheio por unidade de volume, $m^2 m^{-3}$; σ , tensão superficial, $N m^{-1}$; ρ_L , densidade do líquido, $kg m^{-3}$; g , aceleração da gravidade, $9,8 ms^{-2}$; Q , vazão volumétrica do líquido, $m^3 s^{-1}$; L_p , perímetro molhado da secção transversal do recheio, m.

O perímetro molhado da secção transversal do recheio é dado pela equação (2.3.2).

$$L_p = \frac{4S}{Bh} A \quad (2.3.2)$$

Sendo: S , lado da canaleta corrugada, mm; B , base da canaleta corrugada, mm; h , altura da canaleta corrugada, mm; A , área da secção transversal da coluna, m^2 .

Coeficiente de transferência de massa volumétrico da fase gás - $k_G a_e$

O coeficiente individual de transferência volumétrico da fase gás é calculado a partir da correlação de Bravo, Rocha e Fair (1990) para recheio estruturados com fluxos de líquido e gás em contra corrente, utilizada para o recheio Mellapack 250Y (MALONEY, 2008).

$$N_{Sh} = 0,00338 (N_{Re})^{0,8} (N_{Sc})^{0,333} \quad (2.3.3)$$

$$N_{Sh} = \frac{k_G d_h}{D_{CO_2/ar}}; \quad d_h = \frac{4}{a_p} \quad (2.3.4)$$

$$N_{Re} = \frac{\rho U_t d_h}{\mu_G \cos 45^\circ} \quad (2.3.5)$$

$$N_{Sc} = \frac{\mu_G}{\rho_G D_{CO_2-ar}} \quad (2.3.6)$$

O coeficiente de transferência de massa da fase gasosa em base molar é dado pela expressão (2.3.7).

$$k'_G = k_G a_e / RT \quad (2.3.7)$$

Coeficiente de transferência de massa volumétrico da fase líquida - $k_L a_e$

O coeficiente de transferência de massa volumétrico da fase líquida, para absorção química é representado pela equação (2.3.8).

$$k_L a_e = E k_L^0 a_e \quad (2.3.8)$$

Para reações rápidas como ocorrem entre o CO_2 e as soluções aquosas das alcanolaminas (MEA, MDEA/PZ), no caso de reação rápida, sendo a reação no filme líquido, o fator de aumento, E, é igual ao número de Hatta adimensional.

A expressão do número de Hatta obtida a partir da expressão (2.2.7) para uma reação de segunda ordem é expressa pela equação (2.3.9).

$$Ha = \frac{\sqrt{D_{A-B} k_{mn} C_B}}{k_L^0} \quad (2.3.9)$$

Substituindo-se a equação (2.3.9) na equação (2.3.8), tem-se:

$$k_L a_e = \sqrt{D_{A-B} k_{mn} C_B} a_e \quad (2.3.10)$$

2.3.4 Hidrodinâmicas (capacidade, eficiência) para as colunas de recheio e de pratos

2.3.4.1 Colunas de Recheio

As colunas recheadas são empregadas nas operações de absorção e destilação. O dimensionamento do ponto de vista hidrodinâmico da coluna recheada leva em consideração a ocorrência de fenômenos que causam instabilidades de operação importantes, a serem mitigados no projeto, que surgem com altas vazões de gás e de líquido como *chanelling*, carga (*loading*) e afogamento ou inundação (*flooding*). No *channeling* há um desequilíbrio nos fluxos de líquido e gás na coluna. Em determinados pontos preferenciais da coluna os fluxos de líquido e de gás tornam-se maiores causando instabilidades.

Na condição de *loading* o fluxo de líquido pode ser reduzido devido ao aumento de fluxo de gás. O líquido pode ser retido nos espaços vazios entre o enchimento.

Na condição de *flooding* o líquido descendente pode ser retido na coluna devido ao alto fluxo de gás em ascensão. A perda de carga pode crescer demasiadamente, com apenas um ligeiro acréscimo no fluxo de gás (TREYBAL, 1985). Do ponto de vista hidrodinâmico o *loading* e o *flooding* representam limites da capacidade da coluna recheada.

A Figura 7 mostra a variação da perda de carga do gás em função do seu fluxo, para o escoamento em contra corrente com o fluxo de líquido descendente pela ação da gravidade, extraídas do Manual de Engenharia Química, PERRY; CHILTON, 5ª Ed., (1980).

Figura 7 - Características de perda de carga nas colunas recheadas

Fonte: PERRY; CHILTON, 5ª Ed., (1980)

Quando o fluxo de líquido é muito pequeno, a seção aberta eficaz do recheio não é muito diferente da do recheio seco e a perda de carga é devida ao fluxo através de uma série de aberturas de dimensões e localizações distribuídas, ao acaso no leito. A perda de carga é aproximadamente proporcional ao quadrado da velocidade do gás, conforme mostrado na Figura 7, na região AB.

Nos fluxos mais elevados de líquido a seção transversal da coluna fica menor, em virtude da presença do líquido; parte da energia da corrente gasosa é usada para suportar uma quantidade crescente de líquido na coluna, na região AB.

A zona de carga (*loading zone*), indicada na figura, corresponde a uma excessiva retenção de líquido, com aumento na perda de carga. A perda de carga cresce muito com a vazão de gás. No limite- região C'C - tem-se o fenômeno do *flooding*. Nesta condição ocorre o arraste do líquido e/ou borbulhamento no líquido, conhecida como condição de inversão de fase. A perda de carga cresce rapidamente na inversão de fase.

A Figura 8 representa a eficiência da separação expressa como AEPT ou HETP – Altura Equivalente ao Prato Teórico, dada na unidade de comprimento (m, mm ou ft) em função da velocidade superficial de gás (m/s ou ft/s) para torres de recheio, utilizada nos projetos.

Figura 8 - Diagrama HETP x Velocidade do gás

Fonte: Adaptado de DOLAN e STRIGLE Jr, (1980)

Operando-se com baixas velocidades, à esquerda do ponto (A) a eficiência de separação é reduzida, expressa pelo aumento do HETP, decorrente da não uniformidade dos fluxos de líquido e de vapor no interior da coluna (má distribuição). Quando os fluxos de líquido e de vapor são simultaneamente aumentados, atinge-se a condição entre os pontos (A) e (B), denominada região operacional, caracterizada pela relativa constância do valor do HETP ou eficiência de separação. Portanto considera-se razoável que a coluna seja projetada para atender esta condição. Aumentando-se o fluxo de gás além do ponto (B) a eficiência de separação é aumentada traduzida por valor menor do HETP, devido o efeito da turbulência com aumento no contato entre as fases líquida e vapor. Além do ponto (C) ocorre arraste de uma quantidade de líquido no vapor que tem como consequência perda na eficiência e aumento no HETP. O ponto (C) ao qual a eficiência não poderá ser mais mantida denomina-se Capacidade Operacional Máxima ou *Maximum Operational Capacity* (MOC) (DOLAN e STRIGLE Jr, 1980). O MOC é definido como a vazão máxima vapor para a eficiência normal do tipo de recheio da coluna.

Para se estimar o diâmetro e a perda de carga para uma coluna de recheio para as operações de absorção e dessorção podem-se utilizar gráficos de correlações generalizadas de perda de carga, originados de dados empíricos para os diferentes tipos e tamanhos de recheio, como a correlação atual de Eckert e Strigle (MALONEY, 2008), ilustrado na Figura 9.

Figura 9 - Correlação generalizada de perda de carga

Fonte: PERRY's CHEMICAL ENGINEER HANDBOOK 8ª Ed., (MALONEY, 2008)

Na abscissa do gráfico, tem-se o fator adimensional F_{LG} , expresso por:

$$F_{LG} = \frac{L}{G} \sqrt{\frac{\rho_G}{\rho_L}} \quad (2.3.11)$$

L e G referem-se a vazões mássicas de líquido e de gás respectivamente.

Na ordenada do gráfico tem-se o fator de capacidade ou *capacity parameter* (CP), relacionado com o coeficiente de Souders –Brown (C_s) para coluna de pratos:

$$CP = C_s F_P^{0.5} v^{0.05} = U_s \left(\frac{\rho_G}{\rho_L - \rho_G} \right)^{0.5} F_P^{0.5} v^{0.05} \quad (2.3.12)$$

O fator de recheio, C_s , é considerado o melhor parâmetro de carga de gás para comparação de capacidades de sistemas de diferentes propriedades físicas. O C_s tem a mesma unidade da velocidade, relacionando o arraste de gotícula de líquido, definido pela expressão (2.3.13).

$$C_s = U_s * \sqrt{\rho_L / \rho_L - \rho_G} \quad (2.3.13)$$

O fator de recheio, F_P , é determinado experimentalmente em função do tipo e tamanho do recheio. A tabela 14-13, para recheios randômicos e tabela 14-14, para recheios estruturados, apresentadas por Maloney no Perry's Chemical Engineer Handbook 8thed. apresentam dados das características dos respectivos tipos. A perda de carga relacionada com o fator de recheio, expressa abaixo pela equação de Kister e Gill permite determinar a condição incipiente de *flooding*.

$$\Delta P = 0,12F_P^{0,7} \quad (2.3.14)$$

Sendo: ΔP , a perda de carga por altura de leito unitário de recheio, (in H_2O / ft de altura de recheio)

Com o conhecimento da velocidade superficial, vazão volumétrica do gás, determina-se o diâmetro da coluna. Na prática, sugere-se no projeto de colunas recheadas, do ponto de vista hidrodinâmico, uma velocidade superficial que corresponda de 40% a 85% da velocidade de *flooding*.

$$U_{corr.} = 0,6U_s \quad (2.3.15)$$

$$A_T = W_G / U_{corr} \quad (2.3.16)$$

$$d = \sqrt{\frac{4A_T}{\pi}} \quad (2.3.17)$$

Sendo: W_G , a vazão mássica do gás, kg/s; Q_G , vazão volumétrica do gás, m^3/s ; A , área da secção transversal da coluna, m^2 ; d , diâmetro da coluna, m; ρ_G , densidade do gás, kg/m^3 .

Para se prever a capacidade operacional máxima em colunas de recheio com precisão apurada, utiliza-se as correlações entre o parâmetro de fluxo, F_{LG} e o fator de capacidade, C_s , para cada tipo de recheio. Para o recheio estruturado Mellapak 250Y da Sulzer a capacidade máxima de operação corresponde ao ponto de

operação onde a perda de carga (ΔP) atinge 12 mbar/m (1,5 inH₂O/ft). Nesta condição, ainda é possível operar a coluna em condição estável.

Figura 10 - Correlação generalizada para queda de pressão em recheios estruturados

Fonte: PERRY's CHEMICAL ENGINEER HANDBOOK 8ª Ed. (MALONEY, 2008)

A rotina do ASPEN Plus indica como resultado o fator de máxima capacidade no ponto de inundação, C_{SB} . A partir do cálculo do parâmetro de fluxo pela equação (2.3.11) e do cálculo dos parâmetros de fluxos, CP pela equação (2.3.12) nas condições de inundação, com máximo ΔP . Do projeto da coluna resultante da simulação e utilizando-se o gráfico da correlação generalizada de Kister e Gill (Figura 10), pode-se calcular a fração de inundação pela equação (2.3.18) para o recheio estruturado.

$$\text{Fração de Inundação (Flooding)} = \frac{C_S^2 \sqrt{F_p}^{20} \sqrt{v}}{C_{SB}^2 \sqrt{F_p}^{20} \sqrt{v}} \quad (2.3.19)$$

2.3.4.2 Coluna de Pratos

Os parâmetros hidrodinâmicos, dentre tantos outros relevantes a serem considerados nos projetos para avaliação de capacidade de desempenho de colunas equipadas com pratos, aos quais julgamos de interesse descrever para este trabalho de simulação, são os que se seguem:

- Cs, fator de capacidade
- Parâmetro de fluxo
- Espaçamento entre pratos
- Regimes de escoamento
- Área total A_T ; Diâmetro, d ; Área livre, A_n ; Área ativa A_B , Área do dowcomer, A_{DB}
- Porcentagem de inundação (*flooding*) (*jet* e *dowcomer backup*)
- Fator de espuma

O fator- F (m/s) é um parâmetro definido pela equação (2.3.20).

$$F = U_s(\rho_G)^{1/2} \quad (2.3.20)$$

O espaçamento entre os sucessivos pratos que compõem a coluna pode contribuir para um aumento da capacidade, porem redundando no aumento da altura da coluna. Em colunas de diâmetros superiores a 1,5 m adota-se 600 mm. Para diâmetros acima de 6,0 m adota-se um espaçamento de 750 mm. Para diâmetros inferiores ou igual 1,5m, pode-se adotar 450 mm de espaçamento entre pratos. Deve ser levando em conta na especificação do espaçamento adotado a tendência de formação de espuma pelo sistema.

O comportamento hidrodinâmico do prato depende do regime de escoamento das fases e existem evidências que a eficiência do prato pode ser melhorada operando-se com o tipo de regime apropriado (LOCKETT, 1986). Os regimes de escoamento das fases encontrados nos pratos são classificados em regime *spray*, *froth*, emulsão e de bolha. O regime *spray* caracteriza-se pela fase continua de gás e o líquido é projetado acima pelo gás gerando gotículas. O regime *spray* em altas velocidades para o gás associado a baixas velocidades da fase líquida. O regime *froth* é o mais comum e eficiente na prática da destilação, é o inverso do regime *spray*. O regime *froth* é caracterizado pela dispersão normal vapor/líquido, com o gás na forma de jatos passando através da fase contínua de líquido gerando uma massa de bolhas. A massa de bolhas irá colapsar tão logo cesse a agitação. No regime de emulsão, pequenas bolhas de gás são “emulsificadas” no líquido e por fim o regime de bolhas de gás de baixa velocidade que se elevam sobem através da camada quiescente de líquido. (LOCKETT, 1986). A Figura 11 mostra os regimes em função da relação entre o parâmetro de fluxo e o fator de capacidade.

Figura 11 - Fator de capacidade x Parâmetro de fluxo. Fonte: LOCKETT (1986)

O diâmetro (d) a área total transversal (A_T) da coluna de pratos podem ser estimados preliminarmente a partir do fator de capacidade CF , corrigido pela tensão superficial obtido no diagrama da correlação de arraste de Fair e da velocidade máxima de vapor (CALDAS, 2007), como se segue.

Figura 12 - Fator de capacidade x Parâmetro de fluxo

Fonte: PERRY'S CHEMICAL ENGINEER HANDBOOK 8ª Ed. (MALONEY, 2008)

$$U_{sf} = C_{sbf} * \sqrt{(\rho_L - \rho_G) / \rho_G} \quad (2.3.21)$$

A velocidade máxima de vapor expressa pela equação (2.3.21) deve ser corrigida pelo fator de espuma do sistema. No caso das aminas, tem-se para pratos os seguintes fatores de espuma F_{sistema} (LOCKETT, 1986).

Tabela 1 - Fator de espuma do sistema para aminas-pratos

Componente	F_{sistema}
Absorvedor	0,75
Stripper	0,85

$$U_f = U_{sf} F_{\text{sistema}} \quad (2.3.22)$$

A área livre, A_f , é calculada considerando o fator de inundação, FF. Este fator utilizado nos cálculos está compreendido entre 0,40 a 0,85 (FRANK, 1977). Um fator de inundação elevado pode acarretar em arraste excessivo.

$$A_f = \frac{Q_G}{U_F * FF} \quad (2.3.23)$$

A área do dowcomer, A_d , que será acrescida à área para se estimar a área total, A_T , é dada pela equação :

$$A_d = \frac{TDC * Q_L}{TS * FF} \quad (2.3.24)$$

$$A_T = A_f + A_d \quad (2.3.25)$$

$$d = \sqrt{\frac{4A_T}{\pi}} \quad (2.3.26)$$

2.3.5 Desenvolvimento dos balanços de energia

Balanços de energia – Absorção

O balanço de energia para a fase líquida e para a fase gasosa que escoam internamente na coluna de absorção, assume que a energia liberada pela absorção química do CO_2 (soluto A) é transferida para a solução aquosa de alcanolamina (solvente reativo B), sendo ainda parte desta energia cedida para a fase gasosa, devido à diferença de temperaturas entre as fases.

O esquema da transferência de calor entre o gás e o líquido é mostrado na Figura 13, num elemento de volume (estágio) ΔV de altura ΔZ na coluna.

Para acoplar os dois balanços e obter-se um perfil de temperaturas na coluna condizente com a realidade de processo, optou-se por um método de resolução numérica discretizada ou seja dividindo-se a altura total da coluna em n elementos de altura ΔZ .

O eixo z considerado para o balanço líquido tem sua origem na entrada do líquido no topo da coluna. As variáveis aumentam de valor ao longo da coluna com exceção da concentração da alcanolamina reativa C_B . No balanço do gás é usada a convenção oposta. A origem do eixo é posicionada na alimentação do gás no fundo da coluna e o seu sentido acompanha o percurso.

Figura 13 - Perfil de temperaturas e fluxo de CO_2 na interface gás-líquido.

O balanço na coluna será resolvido a partir da extremidade superior da coluna até a inferior . Os índices seguem as ordens dos eixos convencionados no parágrafo anterior.

Para o líquido na entrada pelo topo, pela Figura 2.12 acima, faz-se a correspondência da temperatura $T_L=T_{Ln}$. Na saída do elemento faz-se a correspondência de $T_L+dT_L= T_{Ln-1}$; para o gás faz-se a correspondência de temperatura na entrada , $T_G=T_{Gn-1}$ e para temperatura de saída, $T_G+dT_G= T_{Gn}$.

Apresentam-se a seguir as equações referentes ao balanço de energia.

O balanço global de energia no elemento n é representado pela equação (2.3.27).

$$Q_R+Q_{CO_2} = Q_L + Q_G \quad (2.3.27)$$

Sendo: Q_R o calor de absorção (reação+ diluição) liberado no seio do líquido, devido à reação exotérmica, Q_{CO_2} , o calor da transferência do CO_2 do gás para o líquido, Q_L ,o calor sensível do líquido e Q_G , o calor de convecção transmitido do gás para o líquido.

O calor de absorção é calculado a partir das equações (2.3.28) e (2.3.29) .

$$Q_R = N_{CO_2}(-\Delta_r H)a_e Az \quad (2.3.28)$$

$$N_{CO_2,n} = K_G P (y_{A,saída} - y_A^*) \quad (2.3.29)$$

A expressão do calor devido à transferência do CO_2 de magnitude quase desprezível, é dada pela expressão (2.3.30).

$$Q_{CO_2}= N_{CO_2}C_{p,CO_2}(T_{Ln}-T_{Gn})a_e z \quad (2.3.30)$$

A equação do balanço energético do gás é dada pela equação (2.3.31).

$$Q_G=W_G C_{p,G}(T_{Gn}-T_{Gn-1})= U(T_{Ln}-T_{Gn}) a_e z \quad (2.3.31)$$

W_G representa a vazão mássica de gás e $C_{p,G}$ representa o seu calor específico, assumidos constantes ao longo da coluna. U representa o coeficiente de transporte de calor na fase gasosa. Seu valor foi estimado através da correlação da analogia entre os transportes de massa e de calor de Chilton-Colburn, na fase gasosa (TREYBAL, 1985).

$$\frac{S_h}{Re S_c^{1/3}} = \frac{Nu}{Re P_r^{1/3}} \quad (2.3.32)$$

Resolvendo-se para obter U , tem-se:

$$U = k_G \sqrt[3]{\rho_{ar} C_{p,ar}} \cdot \sqrt[3]{\left(\frac{k_{ar}}{D_{CO_2,ar}}\right)^2} \quad (2.3.33)$$

A expressão do balanço para o calor sensível do líquido é dada pela equação (2.3.34).

$$Q_L = W_L C_{p,L} (T_{Ln-1} - T_{Ln}) \quad (2.3.34)$$

W_L representa a vazão líquida de gás e $C_{p,L}$ o seu calor específico. Estes parâmetros foram considerados constantes ao longo da coluna.

Os resultados do desenvolvimento das equações (2.3.30) – (2.3.34), resolvendo-se para $T_{G,n-1}$ e T_{Ln-1} , são apresentados nas equações (2.3.35) e (2.3.36).

$$T_{G,n-1} = T_{G,n} + \frac{U \cdot a_e \cdot A \cdot Z}{W_G \cdot C_{p,G}} \cdot (T_{L,n} - T_{G,n}) \quad (2.3.35)$$

$$T_{Ln-1} = T_{Ln} + \frac{A \cdot a_e \cdot Z}{W_L \cdot C_{p,L}} (N_{CO_2,n-1} \cdot (-\Delta H_R) + N_{CO_2,n-1} \cdot C_{p,CO_2} \cdot (T_{L,n} - T_{G,n-1}) - U \cdot (T_{G,n} - T_{L,n})) \quad (2.3.36)$$

Balanços de massa - sistema de dessorção

O sistema de dessorção utilizado para a regeneração da solução aquosa de alcanolamina rica proveniente da absorção e recuperação de CO_2 na fase gasosa para diversas finalidades é composto de um conjunto de equipamentos de processo:

- coluna de dessorção (“stripper”)
- condensador
- reboiler (“reboiler”)

O esquema simplificado do sistema de dessorção está ilustrado na Figura 14.

Figura 14 - Esquema simplificado do sistema de dessorção

Fonte: Autor

O balanço de massa para a coluna de dessorção pode ser equacionado da seguinte forma:

$$W_L = W_D + W_{Bot} \quad (2.3.37)$$

Sendo: W_L , a vazão mássica na alimentação constituída de solução de amina não reagida, CO_2 em forma de carbamatos e bicarbonatos, W_B , produto de fundo constituído de amina regenerada e W_D , destilado de vapor de CO_2 .

Na estimativa da demanda energética do processo de dessorção deve-se otimizar o parâmetro da relação de refluxo líquido, R , definido como o número de moles do produto destilado reciclado para a coluna. O balanço de massa e de energia detalhados do Stripper não fizeram parte do escopo deste trabalho.

2.4 Processos de Absorção e Dessorção de CO₂

2.4.1 Principais solventes e suas características físico-químicas

Nas últimas décadas, em escala industrial, tem-se utilizado soluções aquosas de alcanolaminas nos sistemas de remoção de CO₂ de correntes de gases por meio da reação exotérmica com os grupos funcionais amínicos .

As aminas são classificadas como primária, secundária e terciária de acordo com os átomos de carbono diretamente ligados ao átomo de nitrogênio. As diferenças das suas estruturas químicas apresentam modelos reacionais com variações nos efeitos térmicos associados às reações químicas e no equilíbrio químico do processo ,com influencia na estabilidade do solvente e nos fatores de corrosão. A MEA pertence ao grupo da amina primária, a MDEA é uma amina terciária e a piperazina (PZ) é uma amina secundária.

Figura15 - Monoetanolamina (MEA),

Fonte: CAS No.141-43-5, Dow Product Safety Assessment, 2010)

Figura 16 - Metildietanolamina (MDEA)

Fonte: CAS No.105-59-9, Dow Product Safety Assessment, 2010

Figura 17– Piperazina (PZ)

Fonte : CAS No.110-85-0, Dow Product Safety Assessment,2010)

As aminas utilizadas nos sistemas de absorção para captura do CO₂, tem sido em larga escala o MEA, seguido do MDEA, ambos contendo grupo hidroxila (OH). O PZ é de aplicação mais recente. A MDEA e a PZ estão sendo consideradas alternativas válidas de aperfeiçoamento para substituição da MEA (ZHONG CHAO, 2014) .

No caso da reação do CO₂ com as aminas primárias e secundárias, o principal produto formado é o complexo denominado carbamato. O mecanismo de formação do carbamato denominado de “zwitterion” é representado pelas seguintes equações para o solvente a base de MEA (MOIOLI et al., 2012) :

Para a solução combinada com MDEA e PZ devida a presença da amina terciária tem-se também a formação do bicarbonato, segundo o modelo cinético descrito pelas equações abaixo (FRAILIE, 2014):

O emprego de MEA com CO₂ deve-se à sua alta capacidade de absorção quando comparada com as outras alcanolaminas, compensado em parte pelo valor elevado da sua entalpia de reação que favorece a cinética da reação e em tese diminuindo a altura da coluna de absorção (ABDULKADIR e ABU ZAHRA, 2013).

Como desvantagem, a MEA apresenta no processo a degradação do solvente na presença de oxigênio, emissões secundárias com contaminantes no ar devido a

sua alta volatilidade, além da demanda maior de energia na dessorção e corrosividade.

A reação de CO_2 com aminas terciárias, como o MDEA favorece a etapa de regeneração do solvente na dessorção, pela demanda menor de energia e da menor taxa de corrosão, em relação às aminas primárias e secundárias pelo CO_2 absorvido, operando como agente de corrosão no aço carbono, além da baixa tendência em se degradar.

A sua grande desvantagem reside em tese, aumentar a altura da coluna de absorção. Cabe salientar que as alcanolaminas no seu estado virgem não são corrosivas em relação ao aço carbono.

A escala de corrosão observada para as aminas em relação ao aço carbono é a que se segue, em ordem decrescente de corrosividade (RODRIGUEZ, 2011):

Aminas Primárias > Aminas Secundárias > Aminas Terciárias

As aminas terciárias como o MDEA, reagem com o CO_2 segundo um mecanismo distinto do mecanismo “zwitterion”, formando bicarbonato ao invés de carbamato.

As aminas terciárias reagem lentamente com o CO_2 quando comparada com as aminas primárias e secundárias exigindo altas taxas de circulação de solvente para a remoção do CO_2 (WONG e BIOLETTI, 2002), além do efeito da pressão ser elevada como na MDEA.

O desafio tecnológico atual é aperfeiçoar a melhor mistura de solventes que proporcione alta velocidade de absorção com baixa energia de dessorção ou regeneração do solvente. A piperazina, PZ, tem sido estudada nas misturas com outras aminas na remoção de CO_2 de gases. A adição de PZ aumenta a capacidade de absorção de CO_2 , em solventes com baixa capacidade de absorção, como a MDEA, com a manutenção das características positivas como baixa energia de regeneração e relativa baixa corrosividade para o aço carbono. Esta amina é considerada um dos promotores de velocidade de absorção de CO_2 mais efetivos com relação às aminas primárias e secundárias (RODRIGUEZ, 2011). A desvantagem do uso da PZ está no mecanismo da degradação térmica no processo de absorção de CO_2 , ainda pouco conhecido. A Tabela 2 e a Tabela 3 mostram comparativos entre o calor de absorção, a capacidade de absorção para o CO_2 das soluções aquosas de aminas, constante cinética, custos e aspectos de

corrosão e degradação das aminas, ressaltando os valores para a solução de MEA e da mistura MDEA/PZ, objeto deste estudo.

Tabela 2- Soluções aquosas de MEA,DEA,MDEA,PZ e misturas a 40°C

Amina	Concentração (mm)	Calor de absorção (kJ/ gmol-CO ₂)	Capacidade de absorção (<i>loading capacity</i>) (mol-CO ₂ /mol-Amina)
MEA	30%	87,8	0,51
MDEA	10%	56,76	0,63
AMP*	10%	70,25	0,72
PZ	20%	115,15	0,62
AMP/PZ	10%/20%	93,4	0,82
MDEA/PZ	10%/20%	79,75	0,78

(*) 2-amino-2 metil-1-propanol (Fonte: ABDULKADIR e ABU ZAHRA, 2013)

Tabela 3 - Características dos solventes usados em absorção

Amina	k ₂ @25°C (1/M.s)	Degradação	Corrosão
MEA	6000	ALTA	ALTA
MDEA	5	MODERADA	MODERADA
AMP	600	BAIXA	BAIXA
PZ	100000	MODERADA	MODERADA

Fonte: MOURE (2008)

2.4.2 Descrição simplificada de Processo

Na Figura 18 mostra-se o processo de absorção química de CO₂ com amina, contemplando o sistema convencional com uma coluna de absorção (absorvedor) e uma coluna de dessorção com refeedor (*stripper*). As colunas de absorção e de dessorção com refeedor comumente são do tipo recheadas.

Figura 18– Diagrama de processo simplificado de absorção química com amina.

Fonte: Autor

A corrente gasosa (ar/ CO_2) é alimentada no fundo do absorvedor e a solução aquosa de alcanolamina, denominada como amina pobre, é alimentada pelo topo. A corrente gasosa entra em contato em contra corrente com o solvente reativo que absorve o CO_2 convertido em carbamato e/ou bicarbonato. A reação química exotérmica no absorvedor ocorre entre 20°C a 60°C na pressão ligeiramente acima da pressão atmosférica de 1,3 bar (abs) (ARESTA, 2003). A corrente conhecida como amina rica em CO_2 , sai pelo fundo da coluna, onde será bombeada e aquecida numa temperatura de aproximadamente 49°C até no máximo de 103°C com a corrente de fundo de solução de amina pobre regenerada do stripper, numa temperatura ao redor de 124°C (abs.) num permutador de calor. O gás pobre em CO_2 é ventilado do topo do absorvedor para a atmosfera.

A corrente de amina rica aquecida proveniente do trocador entra no topo da coluna de dessorção que é aquecida com a corrente ascendente de vapor, gerado no refeedor de fundo da coluna, usado para esgotar o CO_2 do solvente, numa temperatura ligeiramente acima da temperatura de entrada de 103°C , na pressão de 2,2 bar (abs.). O CO_2 liberado, sai da coluna de dessorção (“stripper”) misturado com o vapor para entrar no condensador de topo, onde se dá a condensação do vapor e

a separação do CO₂ gasoso. O condensador pode utilizar água ou ar como fluido refrigerante. O condensado retorna para coluna de dessorção como corrente de refluxo líquido. O CO₂ liberado no topo do condensador pode ser comprimido e transportado para estocagem para uso final em processos industriais, estocagem subterrânea e extração de petróleo (*shale oil*).

No fundo da coluna a amina regenerada passa pelo refeedor que utiliza vapor como meio de aquecimento, que a seguir será reciclada para o absorvedor após ser resfriada nos trocadores de calor dispostos em série de 124°C até a temperatura na faixa de 25°C a 30°C, para uma boa eficiência de absorção, primeiramente com a amina pobre no trocador de calor e posteriormente num resfriador a água.

Por razões econômicas e de eficiência, o solvente deve ter grande capacidade para absorver o CO₂, isto é absorver um número máximo de moles de gás para cada mol de solvente utilizado associada a uma demanda energética baixa na sua regeneração. A capacidade para absorver o CO₂ influencia na taxa de circulação do solvente líquido.

2.5 Características de Colunas de Absorção e Dessorção.

2.5.1 Dispositivos de contato líquido/vapor

As colunas de absorção e dessorção majoritariamente são dotadas de dispositivos de contato para transferência de massa e de energia entre as fases líquidas e vapor de pratos ou recheios. Tanto um como o outro, dependendo da aplicação oferecem vantagens e desvantagens (CHEN, 1984).

Os dispositivos de contato vapor/líquido de prato, são do tipo prato valvulados, além do tradicional prato perfurado (*sieve*) e prato com borbulhadores (*bubble cap*). A aplicação de pratos perfurados em colunas de destilação é de baixo custo e proporciona uma boa eficiência, respeitando determinadas condições de projeto como perdas de cargas não inferiores a 2,5 mmHg, baixo *turndown ratio* no limite de 2:1 para operação em baixa pressão e vazão no vertedor superior a 2 gal/min. A eficiência geralmente adotada para se estimar o número de pratos reais está na ordem de 85% dentro da faixa de 40% a 85 % de *flooding* (FRANK, 1977).

Os dispositivos internos de contato das colunas entre o vapor ascendente e o líquido descendente em princípio não devem interferir na taxa de transferência de massa ou capacidade de absorção. A contra pressão provocada por estes dispositivos deve ser a menor possível. A maior diferença entre pratos e recheios reside na área de abertura porcentual de cada um destes dispositivos de contato em cada fase. No projeto do prato tem-se uma área de abertura variando de 8% a 15% área transversal da coluna, enquanto que a área de abertura projetada de um recheio, tipicamente está no patamar de 50% da área transversal da coluna. A fração do vazio (*void fraction*) da coluna de recheio está numa magnitude superior a 90% do volume da coluna (CHEN, 1984). Em razão da diferença acima apontada, faz-se uma comparação entre os internos de recheios e de pratos do ponto de vista de desempenho hidráulico, corrosão e custos (CHEN, 1984).

A Tabela 4 ilustra a comparação entre os dispositivos internos de contato de pratos, recheios e recheios estruturados, baseada na literatura técnica (CHEN, 1984).

Tabela 4 - Desempenho de dispositivos internos de contato

Características	Pratos	Recheio Estruturado
fator-F (pés)(lb./pé³)^{1/2}	0,25-2,0	0,1-3,6
Fator -C, pés/s	0,03-0,25	0,01-0,45
Perda de carga	Alta	Baixa
Custo	Baixo	Alto
Espuma	Limitado	Boa
Operação em alta pressão	Boa	Limitada
Operação c/altos fluxos líquidos	Boa	Ruim
Incrustação/Sólidos	Boa	Ruim
Sistemas Corrosivos	Ruim	Bom

Os fatores a serem considerados na escolha de recheio estruturado no projeto da coluna são os que se seguem (CHEN, 1984):

- I. Desengargalamento da coluna de absorção para o aumento da capacidade.
- II. Redução da demanda energética pela redução da perda de carga.

- III. Minimização do inventário da coluna, quando se processa um líquido ou solvente de alto valor agregado.
- IV. No processamento de produtos muito sensíveis a degradação térmica ou polimerização, reduzindo perdas.
- V. Processos de separação de alta complexidade requerendo um elevado número de estágios com limitações na perda de carga, na ordem de 0,8 mm de Hg por estágio teórico.

3. MATERIAIS E MÉTODOS

Neste trabalho de avaliação de desempenho energético e remoção de CO₂, pela comparação do sistema com a utilização de MEA e com a mistura MDEA/PZ, recorreu-se inicialmente ao modelo matemático, implementado em planilha eletrônica, para a coluna de absorção de recheio estruturado Mellapack 250 Y, operando com solução aquosa de MEA a 30% em massa. Este sistema serviu de referência para se conhecer os comportamentos esperados na transferência de massa e calor e dos perfis de temperaturas das fases gasosa e líquida, obtidos através deste modelo.

As simulações subseqüentes foram elaboradas através do simulador de processos ASPEN Plus, com o módulo *RadFrac* e o modo *Rated*. Na primeira etapa do trabalho de simulação com o Aspen Plus, tanto o sistema de absorção como o sistema de dessorção foram simulados individualmente.

A pesquisa para definir e selecionar os melhores parâmetros de processo e no dimensionamento preliminar das colunas de absorção e de dessorção foram desenvolvidas diretamente no módulo *Radfrac*. Para a operação de dessorção, adotou-se uma coluna do tipo *Reboiling Stripping*, com refeedor do tipo *KettleReboiler* e condensador parcial, comumente utilizada na remoção de componentes de baixo ponto de ebulição, sem a seção de retificação. Para as especificações para a processo de dessorção avaliaram-se algumas das opções disponíveis no programa, abrangendo combinações de balanço material pelo estabelecimento de *targets* de vazão de refluxo de topo, vazão de destilado no topo, vazão de fundo e razão de refluxo. Por fim optou-se pela combinação de razão de refluxo e vazão de destilado de topo para o propósito de melhor aferir e comparar a demanda energética requerida para cada alternativa de solvente de solução aquosa de amina, na melhor condição possível com eficiência de recuperação de CO₂, dentro da filosofia de menor custo, conforme ilustrado na Figura 19.

Nesta fase preliminar também foram testados a combinação de dispositivos de contato para as colunas de absorção e dessorção. Sendo consideradas a combinação de recheio estruturado em ambas e recheio estruturado na coluna de absorção e pratos perfurados na coluna de dessorção. Os diâmetros das colunas

foram estabelecidos, a partir de cálculos em cada caso simulado, respeitando-se as condições hidrodinâmicas de processo (p.e. critério de limite de *Jet flooding*).

Figura 19-Razão de Refluxo x Custo

Estudaram-se os efeitos de remoção de CO_2 de uma mistura gasosa com vazão de $15.000 \text{ m}^3/\text{h}$ a 25°C e pressão de 1atm , gerada hipoteticamente na combustão de metano ou de queima de combustível sólido de origem vegetal, composta de ar, CO_2 e traços de vapor d'água, pré-resfriada na temperatura ambiente, através da variação da razão de refluxo e da vazão de destilado vapor rico em CO_2 . Investigaram-se as influências das concentrações de aminas, carbamato e bicarbonato, combinadas com os tipos de dispositivos de contato internos às colunas. Desenvolveram-se as simulações de processo como um todo interligando-se os sistemas em ciclo aberto emulando o ciclo fechado com reciclo.

O modelo *rate base* dentro do *RadFrac*, ou *RateFrac*, é o modelo de não-equilíbrio utilizado para simular a maioria dos tipos de operações de fracionamento de vários estágios, como absorção e destilação reativas e com a presença de eletrólitos. Este modelo simula colunas de pratos e colunas de recheios, desconsiderando representações de estágio de equilíbrio ideal. O modelo *RateFrac* pressupõe que o equilíbrio termodinâmico é predominante apenas na interface de contato líquido-vapor. O modelo é independente de fatores empíricos, como a eficiência do prato e altura equivalente a um prato teórico (*HETP* ou *AETP*).

Foram feitas iterações preliminares, tendo como partida as soluções amínicas pobres virgens. A composição de fundo da coluna de dessorção ao final da primeira iteração foi a da alimentação da coluna de absorção da segunda iteração, com a influência de carbamatos e bicarbonatos gerados na reação, e assim sucessivamente até a obtenção de concentrações praticamente constantes.

Nesta etapa de estudo, foram também pesquisadas as melhores configurações de dimensionamento das colunas (diâmetro, número de pratos, altura de recheio) dentro da meta de eficiência de recuperação de CO_2 , igual ou acima de 90% em função da vazão de destilado vapor e razão de refluxo. Os resultados obtidos nestas iterações, serviram de base para as simulações definitivas e análise de sensibilidade variando-se as razões de refluxo, emulando-se o regime em ciclo fechado.

3.1. Dados e especificações para o modelo implementado em planilha eletrônica

O modelo matemático implementado em planilha eletrônica – Excel - para a coluna de absorção consistiu nos cálculos de transporte de massa de CO_2 da mistura gasosa para a solução aquosa de MEA, a 30% mm., com reação e transferência de energia simultâneas. Obtiveram-se, assim, os perfis de temperaturas ao longo da altura de recheio estruturado na coluna de absorção, considerando-se uma eficiência de absorção superior a 90%, a partir do teor de 10% mol de CO_2 na mistura gasosa de CO_2 /ar na entrada.

As propriedades físicas e variáveis especificadas para as condições de alimentação na coluna absorvedora de 25°C e 1 atm estão listadas na Tabela 5, 6 e 7, com base no trabalho desenvolvido por Rodriguez (2011).

Tabela 5-Alimentação do gás, na entrada de fundo da coluna de absorção.

Grandeza	Valor
Composição	N ₂ : 79% mol. O ₂ : 21% mol. CO ₂ : 10% mol
Fração molar de CO ₂ , y ₁	0,01 kgmol CO ₂ /kgmol gás
Temperatura (fundo), T _{Gn}	25°C
Pressão	1,0 atm (abs)
Vazão Mássica, W _G	6 785 kg/h
Vazão Volumétrica, Q _G	5 000 Nm ³ /h
Viscosidadecinemática do gás, μ_G :	2,03.10 ⁻⁵ kgm/s
Difusividade de massa do no ar, D _{GCO2-ar}	1,76.10 ⁻⁵ m ² /s
Massa Molecular do gás, M _G	30,5 kg / kgmol
Densidade do gás, ρ_G	1,243 kg/m ³
Calor específico, Cp _{CO2}	0,92 kJ/kg K
Calor específico, Cp _G	1,08 kJ/kg K
Condutividade do ar, k _{ar}	0,0363 W/m K

Tabela 6 - Alimentação do líquido, na entrada de topo da coluna de absorção.

Grandeza	Valor
Composição	MEA: 30% mm (10% mol) H ₂ O : 70% mm (90%mol)
Temperatura (topo), T _{L1}	25°C
Pressão, P	1,0 atm (abs)
Vazão Mássica , WL	27 140 kg/h
$\alpha_{CO2/MEA}$	0,1 mol CO ₂ /mol MEA
Viscosidadecinemática do líquido, μ_L	2,386 cSt
Massa Molecular, MEA, M _{MEA}	61 kg/kgmol
Massa Molecular sol., M _{Sol.}	26 kg/kgmol
Tensão Superficial, σ_L	0,0551 N/m
Densidade do líquido, ρ	1 010 kg/m ³
Concentração dosolvente, [MEA]	3,97 kmol MEA/m ³

Tabela 7 - Grandezas e parâmetros de projeto da coluna de absorção

Grandeza	Valor
Constante Universal do Gás, R	0,00814 kPa m ³ /(mol K)
Entalpia de Reação, -ΔH _R	19000 kJ/kmol CO ₂
Aceleração da gravidade, g,	9,81 m/s ²
Recuperação de CO ₂	≥ 90%
Perímetro molhado Mellapack 250Y,	
Lp	376 m
Fator de recheio, Fp	66m ⁻¹
Incremento de altura de leito, ΔZ	0,165 m
Parâmetro difusivo-cinético,	
$\frac{\sqrt{D_{CO_2-MEA} k_1}}{H}$	2,17*10 ⁻⁶ kgmol/kPa m ^{0,5}
a _e	214 m ² /m ³
área específica, a _e /a _p	0,856
Diametro, d	1,41 m
Área transversal, A _T	1,57 m ²

3.2 Simulações utilizando o simulador de processo Aspen para o processo de remoção de CO₂

O esquema de processo desenvolvido para as simulações do processo de absorção de CO₂ e dessorção no Aspen está ilustrado na Figura 21. Os resultados das simulações segundo este esquema, pressupõem uma aproximação do regime de ciclo fechado, com valores dos coeficientes de carga da corrente de alimentação do absorvedor α_{LEANIN} e corrente de fundo da coluna de dessorção α_{LEANOUT}, muito próximas, emulando-se um ciclo fechado real com reciclo, devido à esta aproximação.

Figura 20- Fluxograma de Processo –ASPEN Plus

O modelo ilustrado na Figura 21 é composto dos seguintes equipamentos de processo:

- Absorber : Coluna de Absorção
- Stripper : Coluna de Dessorção, com refeedor e condensador
- Pump : Bomba de Amina Rica
- Heater: Aquecedor de Amina Rica
- FDrum: Acumulador de Condensado
- Pump2: Bomba de fundo do Stripper
- HX1 : Trocador de Amina Rica/Amina Pobre Reciclada
- Cooler : Resfriador de Amina Pobre Reciclada

Nas simulações efetuadas com o programa ASPEN Plus V8.4 utilizou-se o modelo termodinâmico para destilação e absorção reativas com eletrólitos NRTL (MEA) e e-NRTL (MDEA/PZ), geralmente adotados em processos de remoção de gases ácidos, conforme recomendado pela literatura (HESSEN et al.,2010).

Como estratégia de simulação dentre as opções disponibilizadas pelo simulador de processos, para a coluna de dessorção variaram-se a razão de refluxo da coluna de dessorção e vazão de destilado, dentro de determinadas faixas, para se determinar composições, perfis de temperatura, balanços de massa e energia e

grau de pureza. Outras informações de dados de entrada de parâmetros hidrodinâmicos e de processo se fizeram necessários, como:

- Vazões iniciais
- Diâmetros das colunas
- Números de estágios, incluindo refeedor e condensador
- Tipo de condensador (parcial, total, somente vapor)
- Composições iniciais
- Temperaturas e pressões iniciais
- Altura limite do leito de recheio
- Dispositivos de contato : prato e recheio
- Número do estágio para as alimentações de entrada e posição “*On-stage*”
- Grau de sub-resfriamento e temperatura do refluxo líquido e do destilado líquido
- Espaçamento entre pratos
- Capacidade Fracional (Fractional Approach) em relação ao “*Flooding*”
- Área do downcomer
- Fatores de Correção (fudge factors) : fator de espuma e fator de *over-design*

3.2.1 Parâmetros de processo de entrada constantes nas simulações

A composição da mistura gasosa (*Flue gas*), utilizada como referência em ambas simulações com as soluções amínicas, baseou-se na composição típica de gases gerados em fornalhas de lenha, bagaço de cana ou queima de metano, admitindo-se combustão completa. As condições de processo utilizadas constam na Tabela 8.

Tabela 8-Condições de processo da corrente de alimentação *Fluegas* para a coluna de absorção

Parâmetro	Valor
Composição	N ₂ : 71% mol O ₂ : 18,9 % mol CO ₂ : 10% mol H ₂ O : 0,1% mol
Temperatura, T	25°C
Pressão, P	1,3 atm (abs)
Vazão Mássica, G _G	19.421 kg/h
Vazão Volumétrica, Q _G	15.638 m ³ /h

A corrente de alimentação de solução aquosa de MEA virgem na primeira iteração das simulações para o módulo de absorção, que antecipou as demais iterações, está indicada na Tabela 9.

Tabela 9 - Corrente de alimentação da coluna de absorção (Leanin) na primeira iteração-MEA.

Parâmetro	Valor
<i>Solução de MEA:</i>	
Composição	MEA: 30% mm (11% mol) H ₂ O : 70% mm (89% mol)
Temperatura, T	25°C
Pressão, P	1,3 atm (abs.)
Vazão Mássica ,WL	50 000 kg/h

As iterações subsequentes em ciclo aberto seguiram um procedimento cuja convergência foi verificada utilizando o coeficiente de carga de CO₂, calculado para as correntes de alimentação (α_{LEANIN}) do módulo de absorção (*LEANIN*) e a corrente de fundo ($\alpha_{LEANOUT}$) no módulo de dessorção (*LEANOUT*). O coeficiente de carga (*loading*) considera a relação molar entre todas as formas de CO₂ absorvido e de amina na corrente. O cálculo do coeficiente é feito utilizando-se a expressão (3.2.1):

$$\alpha = \frac{x_{CO_2} + x_{MEACOO^-} + x_{CO_3^{2-}} + x_{HCO_3^-}}{x_{MEA^+} + x_{MEACOO^-} + x_{MEA}} \quad (3.2.1)$$

A condição da corrente de entrada de solução de MEA da coluna de absorção, na iteração final, está apresentada na Tabela 10.

Tabela 10 - Alimentação de solução aquosa de MEA reciclada na coluna de absorção na iteração final

Parâmetro	Valor
<i>Solução de MEA:</i>	
Composição	MEA: 7,2 % mol
	H ₂ O : 87,7 % mol
	MEA ⁺ : 2,6 % mol
	MEACOO ⁻ : 2,4 % mol
Temperatura, T	25 °C
Pressão, P	1,4 atm (abs.)
Vazão Mássica, W _L	50.000 kg/h
α _{LEANIN} —alimentação da absorção	0,20
α _{LEANOUT} —saída de fundo da dessorção	0,21

O critério de verificação da convergência para as correntes *LEANIN* e *LEANOUT* satisfaz a condição explicitada na equação (3.2.2), para todas as simulações.

$$\left| \frac{\alpha_{LEANOUT} - \alpha_{LEANIN}}{\alpha_{LEANIN}} \right| \leq 0,05 \quad (3.2.2)$$

Para o caso da solução combinada de MDEA + PZ virgem, a condição de corrente alimentada para a primeira iteração na alimentação (*LEANIN*) da coluna de absorção está apresentada na Tabela 11.

Tabela 11--Corrente de alimentação da coluna de absorção (Leanin) na primeira iteração - MDEA+PZ.

Parâmetro	Valor
<i>Solução de MDEA + PZ:</i>	
Composição	MDEA: 20% mm
	PZ: 10%mm
	H ₂ O: 70% mm (90%mol)
Temperatura, T	25°C
Pressão, P	1,3 atm (abs.)
Vazão Mássica, WL	50.000 kg/h

Para a simulação contendo solução de MDEA + PZ, a verificação da convergência foi feita de maneira análoga à utilizada na solução de MEA. Nessa caso o coeficiente de carga (*loading*) considera a contribuição de PZCOO, PZ(COO⁻²) (carbamato), HCO₃⁻(bicarbonato), MDEAH⁺ e PZ⁺ (protonizados), que participam no modelo cinético da reação, contribuindo na regeneração de MDEA, PZ e recuperação de CO₂ no topo da coluna dessorção. O coeficiente de carga, para a solução de MDEA + PZ, é expresso em função das frações molares explicitado pela equação (3.2.3):

$$\alpha = \frac{x_{CO_2} + x_{HPZCOO^-} + x_{CO_3^{2-}} + x_{HCO_3^-} + x_{PZCOO^-} + x_{PZCOO^{2-}} + x_{HPZCOO^-}}{x_{MDEA^+} + x_{PZCOO^-} + x_{MDEA} + x_{PZ} + x_{HPZCOO^-} + x_{PZCOO^{2-}}} \quad (3.2.3)$$

como se segue, na condição ilustrada na Tabela 12:

Tabela 12- Alimentação de solução aquosa de MDEA/PZ pobre, na iteração final

Parâmetro	Valor
<i>Solução de MDEA+ PZ:</i>	
Composição (média)	MDEA: 4,00 % mol (19,9% mm) PZ: 2,60 % mol (9,5% mm) H ₂ O : 93% mol MDEAH ⁺ : 0,008 %mol PZCOO ⁻ : 0,06%mol PZ(COO ⁻) ₂ : 0,01%mol HCO ₃ : 0,05% mol PZH ⁺ : 0,001% mol
Temperatura, T	25°C
Pressão, P	1,3 atm (abs)
Vazão Mássica, W _L	50 000 kg/h
α_{LEANIN} – alimentação da absorção	0,029
$\alpha_{LEANOUT}$ – saída de fundo da dessorção	0,031

Nas iterações subsequentes, com as soluções de MEA e de MDEA combinada com PZ, considerou-se um pequeno valor arbitrário, na ordem de 0,01% de vazão mássica, de solução virgem de reposição (*make-up*) adicionada na corrente de reciclo para a coluna de absorção, para compensar as possíveis perdas por degradação térmica das aminas e vazamentos no processo, de mínima influência nos resultados das simulações.

3.2.2 Razão de refluxo, vazão de destilado e dimensionamento dos equipamentos de dessorção e absorção

As condições iniciais e parâmetros de dimensionamento dos equipamentos atenderam o limite inferior imposto de 90 % de recuperação de CO₂ no sistema.

3.2.3 Estudo dos dispositivos de contato das colunas

Estudaram-se diferentes combinações de dispositivos de contato para as colunas de absorção e dessorção (*stripper*). As simulações com o modelo Aspen para a comparação de eficiência de recuperação de CO₂ e dos custos de equipamentos foram realizadas para as combinações apresentadas na Tabela 13. Dentre as avaliadas selecionamos as combinações que demonstraram melhor eficiência para os parâmetros de processo deste trabalho.

Tabela 13 - Dispositivos de contato estudados no simulador de processos.

Coluna de Absorção (Absorvedor)	Coluna de Dessorção (<i>Stripper</i>)
Mellapak 250Y	Mellapak 250Y
Mellapak 250Y	Prato perfurado (<i>Sieve Tray</i>)

Os parâmetros de projetos de entrada utilizados nas simulações estão indicados na Tabela 14 para o caso da solução de MEA e na Tabela 15 para o caso da solução MDEA/PZ.

Tabela 14 – Parâmetros de projeto de entrada das colunas de absorção e stripper – solução de MEA

	Coluna de Absorção (Absorvedor)	Coluna de Dessorção (<i>Stripper</i>)
Nº de estágios teóricos	-	30
Altura do leito de recheio-250Y,m	4,5	13
Diâmetro Interno,m	1,8	1,3
Posição dos bocais	No estágio	No estágio

Tabela 15 – Parâmetros de projeto de entrada das colunas de absorção e stripper – solução de MDEA/PZ

	Coluna de Absorção (Absorvedor)	Coluna de Dessorção (<i>Stripper</i>)
Nº de estágios teóricos	-	15
Altura do leito de recheios - 250Y, m	4,5	13
Diâmetro Interno,m	2	1,3
Posição dos bocais	No estágio	No estágio

3.2.5 Geometria do Prato Perfurado e características dos recheios

A geometria adotada para as colunas com pratos seguem padrões consagrados de projeto e os principais parâmetros, segundo a Tabela 16.

Tabela 16 -Principais parâmetros da geometria das colunas de pratos

Parâmetro	Dimensões
Distância entre pratos	0,45 m
Percentual da área do dowcomer	10%
Altura dos Vertedores (h_w):	
Absorvedor :	90 mm;
Stripper:	80 mm
Espaçamento entre dowcomer e prato (h_{cl}):	67 mm

As principais características do recheio estruturado utilizados para as colunas são apresentados Tabela 17 (ARACHCHIGE e MELAAEN, 2012).

Tabela 17- Características do recheio estruturado.

Tipo de recheio	Área (m^2/m^3)	Porosidade $\xi(\%)$	Constante de Stichmair C_1	Constante de Stichmair C_2	Constante de Stichmair C_3
Mellapack	250	98	1	1	0,32

3.2.6 Fator de Espuma

Os fatores de espuma adotados para solução de amina nas simulações foram baseados nas comparações entre pratos, recheios randômicos e recheios estruturados descritos por Lockett (1986), sendo:

- pratos na absorção: 0,75
- pratos na dessorção: 0,85
- recheios randômicos e estruturados na absorção e dessorção: 1,0

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Inicialmente serão apresentados os resultados obtidos no modelo matemático calculados em planilha EXCEL, avaliando-se o comportamento da absorção com MEA como solvente de referência. Na sequência, apresentam-se os resultados obtidos a partir das simulações elaboradas no ASPEN Plus, empregando-se as soluções de MEA e MDEA/PZ. Avaliando-se, assim, as demandas energética relativas para os dois solventes, considerando-se a mesma recuperação de CO_2 no sistema de absorção e dessorção.

4.1. Modelo matemático em planilha eletrônica para o processo de absorção

Apresentam-se, na forma de fluxogramas de blocos ilustrados nas Figuras 21, 22, 23 e 24 os procedimentos de cálculo do modelo matemático para a determinação do diâmetro da coluna de absorção, cálculo dos perfis de temperaturas e concentrações das fases líquida e gás ao longo da altura da coluna e absorção, obtidos a partir dos balanços de massa e energia e das taxas de transferência de calor e massa.

A primeira etapa dos procedimentos consiste na determinação da área transversal e do diâmetro da coluna por meio das equações e diagramas hidrodinâmicos introduzidos na subdivisão 2.3, obedecendo à sequência descrita na Figura 22. Os resultados de saída são utilizados nas variáveis de entrada na segunda etapa - balanço de massa – utilizando-se as equações de transporte de massa relacionadas na subdivisão 2.3.5 e sequenciadas na Figura 23.

A segunda etapa tem como finalidade determinar o número de estágios necessários para o processo de absorção reativo de CO_2 com a meta de até 95% de eficiência e a altura total da coluna. Define-se, no presente trabalho, como estágio o elemento de altura considerado na discretização da altura da coluna.

A concentração de MEA é previamente imposta como dado de entrada no topo da coluna, assim como as frações molares de CO_2 nas correntes de saída, no topo da coluna e a de entrada, no fundo da coluna, considerando-se a eficiência de absorção definida pelos mecanismos de transferência de calor e massa. A sequência de cálculos se inicia pela determinação do fluxo molar de CO_2 transferido

da fase gasosa para a fase líquida de solução de MEA no que se entende como estágio de topo da coluna, n-1. A partir da velocidade de absorção e da estequiometria da reação de CO_2 com MEA na interface das fases, determina-se a nova concentração de MEA na corrente líquida de saída deste estágio n-1, deduzida da fração convertida em carbamato e a fração molar de entrada neste estágio n-1, determinada a partir dos dados da soma algébrica do fluxo molar de CO_2 da mistura gasosa transferido no estágio n-1 com o fluxo molar correspondente à saída de topo da coluna anteriormente calculado. A sequência de cálculo passa a ser repetida para o estágio n-2 inferior subjacente, com estas condições de fluxo molar de CO_2 na fase gás ascendente e a concentração de MEA descendente e assim sucessivamente até que através dos cálculos se determine a fração molar de CO_2 na corrente de ascendente corresponda a fração molar de entrada que satisfaça a condição de fração molar de CO_2 de 0,1 na mistura de gás tratada. Com esta condição satisfeita, no que se entende como o primeiro estágio de fundo da coluna, dá-se por concluída a segunda etapa. Esta etapa tem como resultados a altura total do leito de recheio estruturado, os fluxos molares de CO_2 transferido por reação nos estágios, concentrações de CO_2 e concentrações de MEA por estágio.

A terceira e última etapa consiste no balanço de energia que se utiliza das equações desenvolvidas (2.3.35) e (2.3.36) para o cálculo de temperatura da corrente de gás e da corrente de líquido em cada estágio. O procedimento se inicia admitindo-se uma temperatura tentativa de líquido na saída do primeiro estágio de fundo da coluna, considerando-se o balanço de energia e a temperatura de entrada da corrente de gás a ser tratada na coluna pré determinada em 25°C . A partir destas temperaturas dá-se o prosseguimento de cálculo para cada um dos estágios com condições já conhecidas pelo balanço de massa efetuado na segunda etapa, como ilustrado no fluxograma de blocos na Figura 24. O cálculo se encerra quando a condição próxima de 25°C no último estágio de topo definido for então satisfeita. A variação das propriedades e dos parâmetros cinéticos com a temperatura foram consideradas ao longo da altura, segundo dados obtidos de Rodriguez (2011).

Na Tabela 18 e na Figura 26 são apresentados, de forma sumarizada, os principais resultados obtidos pelo modelo matemático em Excel, para o processo de absorção com reação de CO_2 em solução de MEA a 30% em massa. No anexo A

são apresentados os resultados do balanço de massa e energia obtidas do cálculo pela planilha.

Figura 21 - Fluxograma de blocos –Dimensionamento hidráulico do Absorvedor

Figura 22- Fluxogramas de blocos-Balanco de Massa

Figura 23- Fluxogramas de blocos-Balanco de massa (continuação da Figura 22)

Figura 24 - Fluxograma de blocos-Balanço de Energia

Tabela 18 - Resultados sumarizados dos cálculos das temperaturas, concentrações de MEA, frações molares de CO₂ ao longo da altura do leito do Absorvedor.

Estágio	C _{MEA, entrada} kmol MEA/m ³	C _{MEA, Saída} kmol MEA/m ³	n _{CO2, n-1} kmol CO ₂ /s	Y _{CO2, entrada} (entrada Δh) kmol/kmol	Y _{CO2, saída} (saída Δh) kmol/kmol	T _{L, n} K	T _{G, n} K	z+ΔZ m
n, topo								0
1	3,97	3,931	0,00078	0,014	0,011	298,37	298,63	0,165
2	3,93	3,878	0,00098	0,017	0,014	298,51	298,83	0,330
3	3,88	3,811	0,00123	0,022	0,017	298,67	299,07	0,495
4	3,81	3,728	0,00154	0,027	0,022	298,87	299,37	0,660
5	3,73	3,625	0,00192	0,033	0,027	299,12	299,73	0,825
6	3,63	3,499	0,00239	0,041	0,033	299,44	300,18	0,990
7	3,50	3,345	0,00296	0,051	0,041	299,82	300,71	1,155
8	3,34	3,158	0,00366	0,062	0,051	300,29	301,35	1,320
9	3,16	2,934	0,00450	0,075	0,062	300,85	302,10	1,485
10	2,93	2,668	0,00549	0,090	0,075	301,52	302,97	1,650
11	2,67	2,359	0,00664	0,107	0,090	302,32	303,94	1,815
12	2,36	2,007	0,00796	0,125	0,107	303,23	304,97	1,980
13	2,01	1,615	0,00942	0,145	0,125	304,27	306,02	2,145
14	1,61	1,194	0,01099	0,165	0,145	305,40	306,92	2,310
15	1,19	0,763	0,01260	0,185	0,165	306,58	307,43	2,475
16	0,76	0,355	0,01412	0,203	0,185	307,71	307,01	2,640
17	0,36	0,026	0,01535	0,216	0,203	308,63	304,62	2,805
n-18 fundo						309,00	298,00

Figura 25- Perfis de temperaturas do gás e do líquido ao longo da coluna de absorção de MEA, calculadas por modelo implementado em planilha eletrônica.

Na resolução do balanço de massa o número de “estágios” necessários foi de 17 estágios, num total de 2,8 m de altura.

Satisfazendo-se a condição imposta da fração molar de 0,2 de CO_2 e ajustando-se a temperatura de fundo da fase líquida em 36°C de modo a se obter uma temperatura de líquido no todo de 25°C , obtiveram-se 17 estágios com altura elementar de 0,165 m, redundando na soma cumulativa de 2,8 m para altura total do leito de recheio estruturado Mellapak 250 Y. A recuperação de CO_2 foi de aproximadamente 95% no processo de absorção.

Nota-se que o comportamento da temperatura da fase gasosa tem a tendência de se elevar permanecendo próxima da temperatura da fase líquida decrescente até se atingir o estagio de topo do absorvedor.

Os comportamentos apresentados no modelo para as temperaturas foram muito próximos dos obtidos pelo simulador de processos, concluindo-se assim na confiabilidade do modelo e atendendo a um objetivo didático deste trabalho.

4.2 Resultados das simulações com o programa ASPEN Plus para as soluções de MEA e de MDEA/PZ

Conforme apresentado no capítulo 3, os estudos desenvolvidos em simulador de processos (Aspen Plus) consideraram dois solventes – soluções amínicas: MEA e MDEA combinada com PZ. Os resultados tiveram como objetivo principal comparar o efeito da demanda energética no processo de absorção e dessorção em ciclo fechado e implementado no simulador Aspen Plus e esquematizado na Figura 20, incluindo-se, além das coluna de absorção dessorção, os equipamentos periféricos e descritos no capítulo 3.2. Nas Tabelas 19 e 20 apresentam-se os principais parâmetros obtidos considerados e obtidos das simulações, comparando-se as duas soluções amínicas. Estão discriminados as principais condições e resultados para os casos com *stripper* contendo recheio estruturado e *stripper* com pratos perfurados. Essencialmente estão sumarizados os resultados de demanda energética no processo de absorção e dessorção, bem como as características hidrodinâmicas e de transferência de massa.

Tabela 19 - Resultados sumarizados dos cálculos do simulador para sistema de coluna de absorção (recheio estruturado) e stripper (pratos perfurados).

Especificações	Solução MEA	Solução MDEA/PZ
Entrada de gás, temperatura [°C]	25	25
Entrada de gás, pressão [atm]	1,3	1,3
Vazão de gás na entrada [kg/h]	19 428,0	19 428,0
Vazão de CO ₂ na entrada [kg/h]	2 816,6	2 816,6
CO ₂ no gás [vol-%]	10	10
Temperatura de amina virgem [°C]	25	25
Pressão de entrada da amina virgem [atm]	3,5	3,5
Vazão de amina virgem na entrada [t/h]	50	50
Pressão no topo do absorvedor [atm]	1,3	1,3
Dispositivo de contato do absorvedor	Recheio estruturado 250 Y	Recheio estruturado 250 Y
Número de estágios teóricosdo Absorvedor	5	4
Fator de <i>flooding</i> noabsorvedor [%]	50	38
Altura total do leito doabsorvedor [m]	4,05	3,37
Diâmetro do absorvedor [m]	1,8	2
Eficiência de absorção em CO ₂ [%]	91	94
Temperatura de amina rica [°C]	80	103
Pressão de topo no <i>Stripper</i> [atm]	1,7	2,2
Número de estágios do <i>Stripper</i>	28+Condensador+ refervedor	12+Condensador+ refervedor
Dispositivo de contato do <i>Stripper</i>	Prato Perfurado	Prato Perfurado
Diâmetro do <i>Stripper</i> [m]	1,3	1,3
Fator de <i>flooding</i> no <i>Stripper</i> [%]	77,3	63,0
Refluxo Líquido no <i>Stripper</i> [kg/h]	476	720,6
Temperatura de saturação do refluxo [°C]	60,3	83,4
Temperatura do <i>reboiler</i> [°C]	118,7	124,8
Carga térmica do <i>reboiler</i> [MJ/h]	13 973,4	11 782,64
Consumo de vaporde 3,0 kgf/cm ² no <i>reboiler</i> [kg/h]	6 546,0	5 520,0
Carga térmica no condensador [MJ/h]	-1 222,7	-1 734,8
Vazão de água de resfriamento no <i>Stripper</i> , ΔT=20°C [m ³ /h]	14,6	20,7
Espaçamento entre pratos no <i>Stripper</i> [m]	0,45	0,45
Número de pratos reais do <i>Stripper</i> (η=85%)	33	14
Razão de refluxo no <i>Stripper</i> [kg/kg]	0,17	0,24
Vazão de CO ₂ obtido no topo[kg/h]	2 652,7	2 643,3
Eficiência de recuperação deCO ₂ [%]	94,2	93,8
Fator de Consumo de energia no <i>Stripper</i> [MJ/kg CO ₂]	5,30	4,46
Carga térmica no resfriador de amina [MJ/h]	11 079,0	8 422,0
Consumode água de resfriamento no sist., ΔT=17°C [m ³ /h]	150,0	150,0

Tabela 20 - Resultados sumarizados dos cálculos do simulador para sistema de coluna de absorção (recheio estruturado) e stripper (recheio estruturado).

Especificações	Solução MEA	Solução MDEA/ PZ
Entrada de gás, temperatura [°C]	25	25
Entrada de gás, pressão [atm]	1,3	1,3
Vazão de gás na entrada [kg/h]	19 428,0	19 428,0
Vazão de CO ₂ na entrada [kg/h]	2 816,6	2 816,6
CO ₂ no gás [vol-%]	10	10
Temperatura de amina virgem [°C]	25	25
Pressão de entrada da amina virgem [atm]	3,5	3,5
Vazão de amina virgem na entrada [t/h]	50	50
Pressão no topo do absorvedor [atm]	1,3	1,3
Dispositivo de contato do absorvedor	Recheio estruturado 250 Y	Recheio estruturado 250 Y
Número de estágios teóricos do Absorvedor	5	4
Fator de <i>flooding</i> no absorvedor [%]	50	38
Altura total do leito do absorvedor [m]	4,05	3,37
Diâmetro do absorvedor [m]	1,8	2
Eficiência de absorção em CO ₂ [%]	91	94
Temperatura de amina rica [°C]	80	103
Pressão de topo no <i>Stripper</i> [atm]	1,7	2,2
Número de estágios do <i>Stripper</i>	28+condensador+ refervedor	12+condensador+ refervedor
Dispositivo de contato do <i>Stripper</i>	Recheio estruturado 250 Y	Recheio estruturado 250 Y
Diâmetro do <i>Stripper</i> [m]	1,3	1,3
Fator de <i>flooding</i> no <i>Stripper</i> [%]	42,0	43,0
Refluxo Líquido no <i>Stripper</i> [kg/h]	476	720,6
Temperatura de saturação do refluxo [°C]	60,3	83,4
Temperatura do <i>reboiler</i> [°C]	118,7	124,8
Carga térmica do <i>reboiler</i> [MJ/h]	13 973,4	11 782,64
Consumo de vapor de 3,0 kgf/cm ² no <i>reboiler</i> [kg/h]	6 546,0	5 520,0
Carga térmica no condensador [MJ/h]	-1 222,7	-1 734,8
Vazão de água de resfriamento no <i>Stripper</i> , ΔT=20°C [m ³ /h]	14,6	20,7
Altura calculada do leito de recheio <i>Stripper</i> , m	12,50	13,75
Razão de refluxo no <i>Stripper</i> [kg/kg]	0,17	0,24
Vazão de CO ₂ obtido no topo [kg/h]	2 652,7	2 643,3
Eficiência de recuperação de CO ₂ [%]	94,2	93,8
Fator de Consumo de energia no <i>Stripper</i> [MJ/kg CO ₂]	5,30	4,46
Carga térmica no resfriador de amina [MJ/h]	11 079,0	8 422,0
Consumo de água de resfriamento no sist., ΔT=17°C [m ³ /h]	150,0	150,0

Os dados apresentados, para uma recuperação de 94 % de CO₂ em ambas as alternativas, revelaram uma redução no fator de consumo energético no fervedor (*kettle reboiler*) para o caso da solução de amina contendo a solução de

MDEA + PZ. Elegeu-se a coluna de dessorção para evidenciar a comparação de energia entre os solventes utilizados. Essa redução foi de cerca de 15 % neste sistema de dessorção, alcançando o valor de 5,3 MJ/kg CO₂ para a solução de MEA e 4,5 MJ/kg CO₂ para solução de MDEA e PZ.

Do ponto de vista da hidrodinâmica na coluna de dessorção, os resultados das simulações apresentaram diferenças no *flooding* entre as colunas equipadas com pratos e as equipadas com recheios estruturados, indicando reduções nos percentuais a favor do recheio estruturado. Sendo idênticos os diâmetros das colunas de dessorção e os parâmetros de processo de entrada (razão de refluxo, vazão de alimentação, vazão de refluxo).

A coluna de dessorção equipada tanto com recheio estruturado como com pratos perfurados apresenta o mesmo grau de eficiência de separação e demanda energética em ambos dispositivos de contato. Isto decorre do procedimento no modo *rated* do Aspen Plus, que considera no seu algoritmo de cálculo o número de estágios teóricos atribuídos como dados de entrada nas simulações, seja no caso de pratos como no de recheios, para efetuar os cálculos de transferência de massa e de energia por estágio. O número de estágios é igual ao número de pratos teóricos. Na simulação com recheio estruturado o *HETP* calculado por estágio é resultante do quociente entre a altura total do leito de recheio e o número de estágios, também atribuído como dado de entrada associado ao mesmo estipulados para a simulação com pratos, de acordo com a equação (2.2.45). Os resultados detalhados de saída das simulações com o Aspen Plus encontram-se no Anexo B.

Nos sistemas considerados, em virtude de um melhor aproveitamento energético, o calor da corrente de fundo do *Stripper* é utilizada para pré-aquecer a corrente de alimentação oriunda da coluna de absorção, conforme realçado no volume de controle do processo de dessorção na Figura 26 .

Figura 26 -Fluxograma do volume de controle do processo de dessorção

Os dados sumarizados dos resultados de demanda energética para o refulvador e condensador da coluna de dessorção na recuperação de 94% de CO_2 são mostrados na Tabelas 21 e 22 para solução de MEA e solução de MDEA + PZ, respectivamente. Nota-se uma economia a favor desta última alternativa no consumo de vapor no refulvador e um pequeno acréscimo no consumo de água de resfriamento na condensação da corrente de vapor de topo, devido à temperatura do vapor de topo ser superior no caso da solução MDEA + PZ (83°C) em relação à solução de MEA (60°C). Os perfis de temperatura no *Stripper* estão apresentados na Figura 27, tanto para coluna de recheios como a coluna equipada com pratos.

Figura 27 - Perfis de Temperaturas – Fase Líquida e Fase Vapor no Stripper

Os perfis de temperaturas nas fases líquida e vapor obtidas para o Absorvedor nas simulações estão representados no gráfico da Figura 28 .

Figura 28 - Perfis de temperatura no Absorvedor

Tabela 21 - Demanda energética no reboiler do stripper (coluna de pratos e recheio).

Stripper	MEA	MDEA/PZ	Economia, ΔE (MJ/h)	Economia ΔE (%)
Eficiência em CO ₂ % no sistema	94	94		
Vazão de refluxo líquido, kg/h.	476,0	720,6		
Razão de refluxo	0,17	0,24		
Carga térmica- reboiler, MJ/h.	13 973,46	11 782,64	2191,82	15,6
Consumo de vapor saturado de 3,0 Kg/cm ² - man, t / h.	6,54	5,52	1,02	15,6

Tabela 22 - Demanda energética no condensador do Stripper - $\Delta t = 20$ °C

Stripper	MEA	MDEA/PZ	Economia, ΔE (MJ/h)	Economia ΔE (%)
Carga térmica- Condensador, MJ/h.	1 222,75	1 734,81	- 511,25	- 29,5
Consumo de água de resfriamento, m ³ /h.	14,61	20,73	- 6,12	- 29,5

4.3 Análise de sensibilidade da demanda energética no sistema

Realizou-se uma avaliação comparativa da demanda energética entre os sistemas de absorção e dessorção empregando-se solução de MEA e solução de MDEA/PZ. Tomando-se como base as simulações com recheio estruturado na coluna de absorção e prato perfurado na coluna de dessorção. Em uma primeira análise de sensibilidade comparou-se a demanda de energia no reboiler (*CARGA TÉRMICA, MJ/h*) da coluna de dessorção em função da vazão de CO₂ ventilado (retirado) no topo desta coluna, ilustrado na Figura 29. Na outra análise comparou-se o fator de consumo de energia na coluna de dessorção em função da eficiência de recuperação de CO₂ no sistema, ilustrado na Figura 30.

Figura 29 - Carga térmica em função de CO₂ recuperado no stripper

Figura 30 - Fator de energia (MJ/kg CO₂) em função da eficiência de recuperação de CO₂ (%).

Como se pode notar nas Figuras 29 e 30, na medida que a eficiência na recuperação de CO₂ ultrapassa o valor de 96%, que é equivalente à vazão de 2.700 kg/h de CO₂ recuperado, ocorre uma inflexão acentuada na demanda energética no refeedor bem como no fator de energia para a solução de MDEA e PZ, não havendo mais a vantagem energética desta solução em relação à solução de MEA, nas condições avaliadas deste modelo.

A redução de cerca de 15 % no sistema de dessorção, corresponde ao valor de fator de consumo de 5,3 MJ/kg CO₂ para a solução de MEA e 4,5 MJ/kg CO₂ de MDEA e PZ.

Os valores de fatores de energia calculados estão coerentes com os valores de fator de consumo reportados na literatura entre 0,97 MJ/kg de CO₂ e 4,2 MJ/kg de CO₂ recuperado (CLOSMANN et al; 2009; JENSEN, 2015 e OI, 2012), com soluções absorventes amínicas, a exemplo do MEA, em instalações de centrais termoelétricas, dependendo da escala de projetado sistema de absorção e dessorção.

4.4 Análise técnico-econômica do sistema de absorção e dessorção de CO₂

Realizou-se a análise técnica-econômica do investimento (*capital budgeting*) conforme metodologia usual cujo procedimento está esquematizado na Figura 32. Para o investimento considerou-se a unidade de absorção e dessorção de CO₂ e

foram comparados os cenários empregando-se a solução de MEA e a solução de MDEA+PZ.

Figura 31 - Fluxo de análise de decisão técnico-econômica de investimento

4.4.1 Custo de Investimento (CAPEX)

O Método Fatorial detalhado ou Método de Lang detalhado foi a metodologia utilizada neste trabalho para compor a estimativa de custo de investimento para as três alternativas avaliadas (SINNOT,1983). O custo de investimento do projeto tem como base o custo direto estimado dos equipamentos principais, sendo que os demais custos incorridos correspondem à fatores ou frações deste custo. Os fatores típicos adotados com base na literatura disponível são apresentados na Tabela 23.

Tabela 23 - Fatores típicos de custo de investimento baseados no custo de equipamentos paraprojetos com valores inferiores à US\$ 10 MM.

		Fator
A-Equipamentos Principais		1
B-Materiais	Tubulação	0,6
	Estruturas Metálicas	0,1
	Concreto	0,1
	Instrumentação e Controle	0,5
	Isolamento e Pintura	0,06
	Elétrica	0,3
	Fundações	0,1
C- Montagem Eletromecânica e Civil		1,3
D-Engenharia		0,9
E-Seguro ,Fretes		0,1
F-Contingências		0,2
G-Custo Total do Investimento		5,1
(G=A+B+C+D+E+F)		

O custo direto dos equipamentos principais foram compilados a partir de várias fontes, paraprojetos na fase conceitual, com a precisão estimada entre +50%/-30%, com base nas correlações propostas nas literatura (GUTHRIE, 1969; LUDWIG, 1998) e no artigo Process Equipment Cost Estimation elaborado pela National Energy Technology Center editado em 2002 pelo governo dos Estados Unidos, usando as correlações do programa Aspen Icarus.

Os custos foram atualizados do ano base de referência para dezembro de 2015, pela correlação de inflação (LUDWIG, 1998), conforme equação (4.4.1).

$$C_2 = C_1(I_2/I_1) \quad (4.4.1)$$

Sendo C_i o custo do equipamento estimado no ano base de referência e do ano atualizado pela relação dos índices de inflação editados pelo Chemical

Engineering Cost Index (CE). Os índices referenciados neste trabalho são os que se seguem:

$I_2 = 556,8$, em dezembro de 2015

$I_1 = 389,5$, em dezembro de 1998

Quando houve necessidade de se ajustar o custo do equipamento pelo seu tamanho empregou-se a correlação conhecida como a regra do seis décimos (LUDWIG,1998), expressa pela equação (4.4.2).

$$C_2 = C_1 (V_2/V_1)^i \quad (4.4.2)$$

Sendo V_i a capacidade do equipamento tido como referência e i é o expoente conhecido para o equipamento, normalmente com valor igual ou próximo de 0,6.

Os equipamentos principais como trocadores de calor, vasos de processo e bombas associados ao sistema de absorção e dessorção, além das colunas de absorção e dessorção foram dimensionados e especificados através das rotinas de cálculo dentro do Aspen Plus.

O material de construção adotado para os vasos de processo, colunas e trocadores de calor no caso de contato com as soluções de aminas foi o *clad* de aço inox com aço carbono. Esta premissa está baseada na taxa de corrosão aceitável entre 0,006 a 0,036 mm/ano, à 80°C, para todas as soluções de aminas com o aço inox 304 (UNASEKARAN, 2012). Portanto, inferiores ao valor mínimo aceitável de 0,25 mm./ano (SINNOT,1983).

As correlações de custo de equipamento normalmente se referem à aplicação de aço carbono como material de construção. Para o ajuste de outros aços mais nobres foram adotados os seguintes fatores de correção com base nas publicações no site *chemical projects.files.wordpress.com* de 2010 e no trabalho de Guthrie (1969).

- Aço Carbono, $F_m = 1$.
- Aço Inox 304, $F_m = 2$.
- Clad de aço inox 304 + aço carbono, $F_m = 1,5$

Sendo assim, levando-se em conta este fator de material na equação de correção da inflação (4.4.2), tem-se a equação (4.4.3):

$$C_2 = fm * C_1(I_2/I_1) \quad (4.4.3)$$

Não se fez necessário ajustar fatores de pressão e temperatura de projeto para custeio dos equipamentos visto serem especificados para pressões inferiores a 10,0 kgf/cm² e temperaturas abaixo de 300°C.

Os valores de custo de recheios estruturados de referência, mostrados na Tabela 24, foram obtidos a partir do trabalho de Brunazzi et al. (2002), inflacionados para 2015 em moeda norte americana. A coluna de pratos foi estimada através da correlação de LOH et al, 2012. O valor de recheio randômico foi obtido através de proposta técnico comercial do fabricante. Estimou-se o custo do prato perfurado para o diâmetro de 1.300 mm estimado ao redor de US\$ 1.000 por unidade em valor atualizado, em aço inox 304.

Tabela 24-Custos estimado dos recheios estruturados 250 Y

Material	Custo Unitário, US\$/m ³
Aço Inox 316	2 597
Polipropileno	1 000

Na Tabela 25 encontram-se tabulados os custos estimados em, US\$, dos equipamentos principais da unidade. Nas Tabelas 26 e 27 estão representados os investimentos para o sistema completo de absorção e dessorção de MDEA+PZ, nas duas combinações de dispositivos de contato avaliados.

As folhas de dados de referência dos equipamentos encontram-se no ANEXO C.

Tabela 25 - Custo estimado dos equipamentos principais – Sistema MDEA+PZ

ITEM	SERVIÇO	QTD	MATERIAL	TIPO	DIÂMETRO mm	HEAD m	ALTURA mm	USD
T-001-A	ABSORVEDORA DE MDEA+PZ MELLAPAK 250 Y	1	A.C	VASO DE PRESS Recheio estruturado PP-14, 1 m ³	2000		5800	\$68.870
T-002-A	STRIPPER DE MDEA+PZ MELLAPAK 250 Y	1	clad AC+SS304	VASO DE PRESS Recheio estruturado SS-316	1300		16000	\$157.414
T-002-B	STRIPPER DE MDEA+PZ SIEVE	1	clad AC+SS304	VASO DE PRESS Pratos=13 SS-304	1300		12 450	\$116.259
P-103	Bomba de MDEA +PZ Pobre	1	SS-304	Centrifuga 54 m ³ /h x30 m, 5 5,5 CV		30		\$10.000
P-104	Bomba de MDEA+PZ Rica	1	SS-304	Centrifuga 54 m ³ /h x30 m, 5 5,5 CV		30		\$10.000
E-001	MDEA +PZ Column REBOILER	1	Casco Clad AC+SS-304 Tubos :SS-304	KETTLE -BKU 206 m ²	DI F:838 DI C:1143		L:4650	\$360.400
E-002	MDEA+PZ Column CONDENSER	1	Casco:SS-304 Tubos :SS-304	BHM 35 m ²	305		L:6000	\$75.600
E-003	RICH MDEA x LEANOUT MDEA HEATER	1	Casco:SS-304 Tubos :SS-304	BEM 135 m ²	625		L:6000	\$189.000
E-004	LEAN MDEA+PZ COOLER	1	Casco:SS-304 Tubos :SS-304	BEM 294 m ²	820		L:6000	\$226.800
V-003	VASO KNOCK OUT CO2/CONDENSADO	1	clad AC+SS304	VASO DE PRESS 1 m ³	731		2194	\$10.000

Tabela 26 - Custo estimado do investimento total (COPEX) na combinação de recheios estruturados para o sistema de MDEA+PZ.

Itens	US\$
A-Equipamentos Principais	767 684
B-Materiais	
Tubulação	444 449
Estruturas Metálicas	40 404
Concreto	40 404
Instrumentação e Controle	404 044
Elétrica	230 305
Isolamento e Pintura	40 404
Fundações	38 384
Sub Total: Materiais	1 315 164
C - Montagem Eletromecânica e Civil	1 010 111
D - Engenharia	727280
E - Seguro ,Fretes	80 809
F - Contingências	115 153
G - Custo Total do Investimento (G=A+B+C+D+E+F)	3 901 048

Tabela 27 - Custo estimado do investimento total na combinação de recheio estruturado e pratos para o sistema de MDEA+PZ .

Itens	US\$
A-Equipamentos Principais	726 529
B-Materiais	
Tubulação	420 622
Estruturas Metálicas	38 238
Concreto	38 238
Instrumentação e Controle	382 384
Elétrica	217 959
Isolamento e Pintura	38 238
Fundações	36 326
Sub Total : Materiais	1 244 659
C - Montagem Eletromecânica e Civil	955 959
D - Engenharia	688 291
E - Seguro ,Fretes	76 477
F - Contingências	108 979
G - Custo Total do Investimento	3 800 894
(G=A+B+C+D+E+F)	

O custo do investimento direto para a configuração de recheio estruturado como dispositivo de contato na coluna de absorção e pratos perfurados na coluna de dessorção é muito próximo do custo da configuração de recheios estruturados em ambas as colunas.

O custo do investimento para o sistema operando com a solução de MEA não foi levantado para esta análise por se considerar próximo aos valores estimados para o sistema operando com MDEA e PZ. O foco principal na análise econômica é o **ganho na redução do custo de energia** constatado nesta opção.

4.4.2 Custos Operacionais e economia em dólar americano

As premissas para as valorações dos custos operacionais foram elaboradas a partir das seguintes bases e fontes:

- Matéria-primas: Sigma Aldrich e www.molbase.com

- Combustíveis: Anuário Estatístico Brasileiro do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, 2016
- Eletricidade: Eletropaulo), através de consultas à fabricantes em seus respectivos sites da internet.
- Manutenção anual equivalente à 2% do custo direto de equipamentos e materiais (LUDWIG,1988).

Face à importância do custo do vapor, elaborou-se um estudo mais detalhado para avaliação do impacto desta utilidade no custo operacional. Admitiu-se a obtenção do vapor por duas possibilidades, a partir do gás natural e do óleo combustível 1A.

O consumo específico, B (kg combustível/1000 kg de vapor), para cada um dos combustíveis (gás e óleo) foi calculado pela equação (4.4.4) (PERA, 1966). Os parâmetros da equação e características da combustão estão apresentados na Tabela 28, assim como os custos específicos do vapor. Os custos referem-se ao ano base de 2015 e com cotação de 1,00 US\$ = R\$3,87.

$$B = \frac{D(h_v - h_a)}{pci * \eta} \quad (4.4.4)$$

Tabela 28 - Cálculo do custo de vapor a partir do gás natural e do óleo combustível.

Variável	Especificação
Pressão do vapor saturado:	3 kgf/cm ² -man
Temperatura da água de caldeira:	143 °C
Poder calorífico do gás natural, PCI:	47675 kJ/kg
Poder calorífico do óleo 1A, PCI:	40 821 kJ/kg
Entalpia do vapor, h_v :	2737 kJ/kg
Entalpia da água, h_a :	584 kJ/kg
Custounitário do gás natural:	R\$ 0,68 /kg ou US\$0,18/kg
Custounitário óleo combustível 1A:	R\$1,53/kg ou US\$0,39/kg
Rendimento do gerador, η :	92%
Produção de vapor, D:	1000kg
Consumo de gás natural, B:	49 kg de GN/tvapor
Custo da tonelada de vapor para gás natural	R\$33,22 (US\$ 8,67)
Consumo de óleo combustível 1A, B:	59 kg de óleo/tvapor
Custo da tonelada de vapor para óleo 1A	R\$ 90,36 (US\$ 23,35)

Ainda na avaliação de cenários, a Figura 33 ilustra a significativa variação dos preços do óleo combustível tipo 1 A e gás natural no decorrer de série de nove anos consecutivos no Brasil. A Figura 34 ilustra o impacto destes preços no custo do vapor gerado em ambos os cenários.

Observa-se que neste período houve vantagem econômica significativa no uso de gás natural para a geração de vapor, justificando a sua escolha na formação dos custos operacionais entre as duas alternativas.

Figura 32 - Evolução dos preços de óleo combustível 1A e gás natural .

Fonte: Anuário estatístico brasileiro do petróleo (2016).

Figura 33-Evolução do custo do vapor saturado a 143°C.

O custo da água de resfriamento, C_w (em US\$/m³), foi estimado pela equação simplificada (4.4.5)(ULRICH e VASUDEVAN, 2006).

$$C_w = 0,000073 * (CE \text{ Plant Index}) + 0,003 * (\$/GJ) \text{ em US\$/m}^3 \quad (4.4.5)$$

Sendo: CE Plant Index = 556 ,para dezembro de 2015 e US\$/GJ=8,86

A Tabela 29 apresenta os valores de custos unitários dos insumos que compuseram os custos operacionais.

Tabela 29 - Custos Unitários das matérias primas e utilidades.

PREMISSAS DE CUSTOS UNITÁRIOS DOS INSUMOS		
MEA	1,387	US\$/kg
MDEA	1,9	US\$/kg
PZ	2,419	US\$/kg
Vapor sat.143°C, 3,0 kgf/cm ² ,apartir de GN	8,67	US\$/ton
Água desmineralizada	0,120	US\$/m ³
Eletricidade	0,080	US\$/kwh

As Tabelas 30 e 31 apresentam os custos operacionais (OPEX) para os sistemas de absorção e dessorção de CO₂ com solução de MEA e de MDEA+PZ. Para o vapor, considerou-se um custo de US\$ 8,67/ton de vapor. Dentro do custo operacional estimado de cada alternativa foi incluído um consumo atribuído as reposição das respectivas soluções devida a perdas por degradação, vazamentos e esgotamentodas soluções nos sistemas. A diferença de custos entre as duas alternativas foi utilizada na análise econômica elaborada e detalhada no item 4.4.4.

Tabela 30 - Custos operacionais (OPEX) – solução de MEA. Ano de ref: 2015.

CUSTO OPERACIONAL ANUAL - SISTEMA DE MEA - Vapor gerado com gás natural					
Matéria Prima:					
Consumo estimado de Sol. MEA : 0,01% de makeup de amina virgem					
Bases :	Vazão		\$/Unidade	\$/h	\$/ano
MEA Est. Make-up :	2 kg/h		\$1,39	\$2,77	\$23.301,60
Demi water	3 kg/h		\$0,12	\$0,36	\$3.024,00
Utilidades					
	Vazão/consumo		\$/Unidade	\$/h	\$/ano
Custo do Vapor:	6,5 t/h		\$8,67	\$56,70	\$476.295,12
Custo da água de resfriamento	165 m ³ /h		\$0,12	\$19,75	\$165.916,80
Custo da Eletricidade:	12,2 kw		\$0,08	0,970	\$8.151,07
Custo de manutenção:					\$106.000,00
CUSTO OPERACIONAL ANUAL - SISTEMA DE MEA					\$782.689

Tabela 31 - Custos operacionais (OPEX) – solução de MDEA +PZ. Ano de ref: 2015.

CUSTO OPERACIONAL ANUAL - SISTEMA DE MDEA + PZ- Vapor gerado com gás natural				
Matéria Prima:				
Consumo estimado de Sol. De MDEA + PZ : 0,01% de makeup de amina virgem				
Bases :	Vazão	\$/Unidade	\$/h	\$/ano
MDEA. Make-up :	0,5 kg/h	\$1,90	\$0,95	\$7.980,00
PZ Make up	1 kg/h	\$2,42	\$2,42	\$20.319,60
Demi water Make up	3,5 kg/h	\$0,12	\$0,42	\$3.528,00
Utilidades				
	Vazão	\$/Unidade	\$/h	\$/ano
Custo do Vapor:	5,5 t/h	\$8,67	\$47,86	\$402.010,56
Custo da água de resfriamento	178 m ³ /h	\$0,12	\$21,36	\$179.424,00
Custo da Eletricidade:	12 kw	\$0,08	\$0,95	\$8.017,45
Custo de manutenção:				\$106.000,00
CUSTO OPERACIONAL ANUAL - SISTEMA DE MDEA + PZ				\$727.279,61

Na Tabela 32 e Tabela 33 são apresentados os créditos anuais, para cada configuração de dispositivos de contato, gerados pelas diferenças dos custos operacionais estimados comparando-se o cenário com a solução de MEA e o cenários com a solução de MDEA +PZ. São apresentados os valores em função do preço do gás natural em três anos. Estes valores de créditos entraram como receitas ou fluxos de valores monetários positivos na análise econômica do investimento para implantação do sistema de recuperação de CO₂ com solução amínica de MDEA +PZ, segundo a equação (4.4.6) aplicada para a classificação de cenário de “Redução de Custo” na nomenclatura corporativa.

$$\text{Crédito(Receita)} = \Delta \text{Custos} = \text{Custo Oper. Total MEA} - \text{Custo Oper. Total MDEA + PZ} \quad (4.4.6)$$

Tabela 32 - Custos operacionais(OPEX) em base anual (US\$) – Diferenças entre cenários: MEA e MDEA+PZ

Ano	Custo do GN,\$/MM Btu	Custo do Vapor,\$/ton	Δ Crédito- Custo do Vapor, US\$/ano
2008	8,39	18,57	159.124
2012	5,85	12,95	91.959
2015	3,92	8,67	74.285

Tabela 33 - Custos operacionais (OPEX) em base anual (US\$) – Diferenças entre cenários: MEA e MDEA+PZ

Ano	OPEX-MEA,\$/ano	OPEX-MDEA+PZ,US\$/ano	Δ Crédito- OPEX, US\$/ano
2008	\$1.326.512	\$1.186.408	\$140 104
2012	\$1.017.815	\$925.856	\$91 959
2015	\$782.689	\$727.280	\$55 409

4.4.3 Análise Econômica do Investimento para a instalação de absorção e dessorção de CO₂ com solução de MDEA+PZ.

Neste item desenvolve-se uma análise econômica pelo método do Valor Presente para o Projeto de Investimento” (WARSCHAUER, 1996). Este método pode ser aplicado quando o custo de capital para a instalação de equipamentos e os custos operacionais envolvendo utilidades e matérias primas são conhecidos. Neste caso uma avaliação da viabilidade do processo como um todo (investimento de projeto e operação), levando-se em conta a vida útil da instalação no tempo, pode ser feita.

Define-se como Projeto de Financiamento a captação de capital no mercado visando o seu pagamento em uma ou mais parcelas futuras.

O método do Valor Presente transporta todas as receitas brutas (+) e todos os custos (-) para a data zero ou ano de referência. Este transporte é feito com a “Taxa do Mercado” (a taxa de juro mínima de atratividade com que pode ser aplicada ao capital caso o montante não for aplicado no Projeto de Investimento - custo do capital).

No caso presente foi considerada receita, o crédito advindo da diferença dos custos operacionais ilustrados na Tabela 33, pela escolha da solução de MDEA +PZ ante a solução de MDEA. Os componentes negativos seriam os impostos sobre as receitas brutas e custos de depreciação, além dos valores do investimento para cada uma das três alternativas de dispositivo de contato avaliadas com a solução de MDEA + PZ, parcelado em dois períodos.

O fluxo de caixa corresponde aos fundos gerados pelo projeto de investimento durante a vida útil estimada para o funcionamento deste projeto, segundo a equação (4.4.7) (HORWITZ, 1980).

$$C_n = P_n + DP \quad (4.4.7)$$

Sendo: C_n = fluxo de caixa, P_n = lucro líquido após taxas e DP = depreciação.

O fluxo de caixa C_n pode resultar positivo ou negativo. A depreciação considerada em valor monetário segue o modelo linear, no qual o investimento direto do projeto é dividido pelo número total de anos do ciclo de vida útil com resíduo de 30% do valor do capital investido, conforme expresso pela equação (4.4.8).

$$DP = \frac{(I - I \times 0,3)}{n} \quad (4.4.8)$$

Sendo: DP = depreciação anual em US\$; I = investimento de capital em US\$
 n = número de anos de vida útil do projeto.

O fator de desconto, que é o recíproco do juro composto, é calculado pela equação (4.4.9).

$$Fator\ de\ Desconto = \frac{1}{(1+i)^n} \quad (4.4.9)$$

Sendo: i = taxa de juro mínima de atratividade e n = ano em que o fator de desconto é aplicado.

O fluxo descontado avalia o fluxo anual numa mesma base de referencia por meio do valor presente através da taxa ou fator de desconto. O montante determinado pela soma dos valores presentes dos fluxos caixa durante o ciclo de vida do projeto considerado “NPV” ou VPL pode ser obtido pela equação (4.4.10). O valor total do investimento direto de capital foi parcelado no ano “0” e no ano “1” nesta análise como 60%/40%, respectivamente, no intuito de melhorar o fluxo de caixa, visto que no ano “1” já foi decorrido meio ano de crédito pela operação do sistema.

$$VPL = C_0 + \frac{C_1}{(1+i)} + \frac{C_2}{(1+i)^2} + \dots + \frac{C_n}{(1+i)^n} \quad (4.4.10)$$

Adicionalmente uma prática na análise econômica é avaliar e comparar os investimentos pela Taxa Interna de Retorno ou Rendimento (TIR). Calcula-se a taxa de juros que torna nulo o VPL. O Projeto de investimento é considerado vantajoso quando esta taxa é maior que a taxa de juros de aplicações financeiras no mercado. Havendo várias alternativas avaliadas como no presente trabalho, o melhor é considerado aquele que porventura apresentar a maior taxa de rendimento (WARSCHAUER, 1996).

Na Tabela 34 encontram-se resumidas as premissas adotadas para a análise econômica para comparação das alternativas estudadas de investimento para a implantação do sistema de absorção e dessorção de CO₂ com MDEA + PZ. Na Tabela 35 estão especificados os valores de investimento direto parcelados em períodos da vida útil, em US\$, para a alternativa de recheio estruturado combinado com pratos.

Tabela 34 - Premissas da análise econômica para investimentos.

PREMISSAS ECONÔMICAS		
Vida útil do projeto de investimento	30	anos
Período de construção	18	meses
Tempo operacional anual	8400	h/ano
Taxa de juros de atratividade de mercado ou Taxa de desconto	5	% a.a.
Taxa de imposto de renda	30	% a.a.
Valor residual do investimento (30 anos)	30	%
Depreciação do investimento		linear

Nota: 18 meses de construção e 29,5 anos de operação contínua.

Tabela 35 - Valores de Investimento Direto parcelados em períodos da vida útil , em US\$, para a alternativa de recheio estruturado combinado com pratos.

Ano	Recheio estruturado e pratos
Ano 0	\$1.520.358
Ano 1	\$2.280.536

No primeiro ano de operação estima-se um valor de US\$ 8.472, dentro do investimento, relativo à despesa pré-operacional pela aquisição de matéria-prima, numa quantidade de 12 ton de solução de solução de MDEA e PZ, para suprir o inventário.

Em sequência as Figura 34 e Figura 35, ilustram os gráficos com curvas do Valor Presente Acumulado (VPL) durante a vida útil de trinta anos do projeto ,levando-se em conta o efeito da inclusão e da exclusão da contribuição do investimento direto e da sua respectiva depreciação anual numa hipotética implantação do projeto, deduzindo-se o imposto de renda, em ambas hipóteses.

Figura 34 - Valor Presente Acumulado com investimento direto em função da Taxa de juros, para custo de tonelada de vapor de US\$8,67.

Figura 35 - Receita Operacional Líquida Acumulada (VPL) na taxa de desconto de 5 % a.a. para os seguintes custos de tonelada de vapor: US\$18,57; US\$12,95 e US\$8,67.

Ao se examinar os resultados do valor presente acumulado com as parcelas do investimento direto na Figura 34, contata-se que não houve convergência para o valor equivalente a zero para o valor presente acumulado nos trinta anos de vida útil do projeto. Ou seja não houve robustez na recuperação do capital investido no projeto pelo prisma da taxa de retorno interna. Na prática, trata-se de um investimento na instalação de um sistema para atender um quesito de meio ambiente, sem exigência financeira de retorno de investimento direto. A instalação de processo de captura e recuperação de CO₂ é visto como parte integrante de um sistema de geração de exergia. O fato de se utilizar a solução combinada de MDEA e PZ redundaria tão somente no crédito pela economia energética, comparado com a solução de MEA, sem conferir amortização do investimento. O capital exigido para o investimento da instalação independe da solução amínica optada.

Os resultados das receitas líquidas acumuladas com a exclusão do investimento, ilustrados na Figura 35 para a solução de MDEA combinada com PZ, variando-se os custos operacionais, segundo os resultados anualizados em 2008, 2012 e 2015 calculados na Tabela 33, mostraram-se vantajosas, por acarretar ganhos econômicos na redução da demanda energética, nesta alternativa. Na escala deste trabalho, os ganhos econômicos estão na ordem de US\$ 500.000,00 a

US\$ 1 500.000,00 ao longo de trinta anos, são muito influenciados pela volatilidade do custo do combustível para geração de vapor, na taxa de juros de mercado de 5% a.a. (equivalente à remuneração do título pago pelo tesouro americano, em média).

No caso real, o capital exigido para o investimento de tratamento de gás pós combustão é parte integrante de um sistema de geração de energia, como ilustrado na Figura 36 ou está dentro do investimento da unidade de processamento petroquímico, sendo compulsório e independe da solução amínica optada.

Figura 36 - Sistema de captura/tratamento de CO₂ do gás da pós combustão da caldeira de 650 MW, NGR Energy, Houston. Fonte: Adaptado da Power Magazine (2017)

O CO₂ recuperado poderá ser comprimido e armazenado no sub-solo ou mesmo industrializado, com a possibilidade de se obter crédito de carbono (*Certified Emission Reductions, CERs*) pela redução das emissões de CO₂ para atmosfera, como ocorre em centrais termoelétricas de grande porte.

5. CONCLUSÕES

A análise deste trabalho esteve focada na comparação do desempenho das soluções de amina a base de MEA e de MDEA/PZ, para a recuperação de CO_2 , a partir de uma mistura com ar, pelo processo de absorção e dessorção de CO_2 .

Numa primeira etapa estudou-se a modelagem de uma coluna de absorção equipada com recheio estruturado Mellapak 250Y no intuito de conhecer o comportamento energético na absorção reacional do CO_2 com a solução de MEA a 30% (em massa) para uma eficiência de absorção de CO_2 igual ou acima de 90 %. A partir dos cálculos de balanço de energia e de transferência de massa foram obtidos os perfis de temperatura e de concentração ao longo da altura da coluna, calculados por planilha eletrônica.

A segunda parte do trabalho foi dedicada às simulações de processo, por meio do programa Aspen Plus, para uma instalação típica constituída de colunas de absorção e dessorção e seus equipamentos periféricos. Foram analisados dois casos empregando-se as diferentes soluções amínicas. Compararam-se os desempenhos energéticos de uma solução aquosa inicial de MEA de 30% (em massa) com uma solução aquosa composta de MDEA e PZ, na proporção de 20% / 10% (em massa). Como escopo considerou-se o tratamento de 19 t / h de uma mistura de ar e vapor, com 10% em volume de CO_2 , a 25 °C, na pressão ligeiramente superior à atmosférica e uma eficiência de recuperação de CO_2 de 94 %.

As simulações foram realizadas inicialmente em ciclo aberto, com as concentrações iniciais de aminas e, em seguida, em ciclo fechado, com a corrente de fundo da coluna de dessorção reciclada para a alimentação da coluna de absorção, com coeficientes de carga praticamente iguais, emulando-se, assim o ciclo fechado. Os resultados apresentados, para uma recuperação de 94 % de CO_2 , em ambas as alternativas, revelaram uma redução no fator de consumo energético no refeedor para o caso da solução de MDEA/PZ. Essa redução foi de cerca de 15 % no sistema de dessorção. Os fatores energéticos foram de 5,3 MJ/kg CO_2 para a solução de MEA e 4,5 MJ/kg CO_2 de MDEA e PZ.

O dimensionamento das colunas de absorção e dessorção (diâmetro, nº de estágios teóricos, altura de leito de recheio) foram consolidados nas simulações em

Aspen atendendo aos parâmetros hidráulicos e de eficiência de 94% de recuperação de CO₂, tendo como base a relação mássica gás/líquido de 1:4 na absorção. Na dessorção a estratégia adotada para se alcançar a eficiência desejada foi variar a razão de refluxo de topo.

Na terceira parte do trabalho desenvolveu-se a análise econômica de uma possível implantação do projeto do sistema de recuperação de CO₂, na escala dos dados de entrada simulados no Aspen, operando com solução combinada de MDEA e PZ. Realizou-se a estimativa do investimento direto pelo Método de Lang fatorial, recomendado em estudos preliminares de análise econômica. Os custos de utilidades e matérias-primas foram obtidos a partir de consulta direta a fornecedores e literatura técnica.

O crédito obtido pela diferença no custo operacional anual na escala deste trabalho, entre as duas alternativas avaliadas, variou entre US\$ 50.000,00/ano e US\$ 140.000,00/ano e, em função da volatilidade do preço do insumo energético para geração de vapor. O investimento direto da instalação de absorção/dessorção de CO₂ foi estimado em US\$ 3,8 MM.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABDULKADIR,A;ABU ZAHRA,M. MASDAR INSTITUTE. **Measurement of reaction enthalpies for aqueous solution for post combustion carbon capture applications.**2nd.PCCC,17-20 September,2013, Bergen Norway. Disponível em:

http://www.ieaghg.org/docs/General_Docs/PCCC2/Secured%20pdfs/5b_3_Abdurahi_m%20Abdulkadir-PCCC2%20Confernece.pdf

ARACHCHIGE, U,S, P. R.; MELAAEN,M,C. TELEMAR UNIVERSITY COLLEGE. Selection of Packing Material for Gas Absorption.**European Journal of Scientific Research.**2012,p120.

ARESTA,M. **CO₂ Separation Technologies** . Carbon Dioxide Recovery and Utilization. p.53-118.Dordrecht ,The Netherlands :Kluwer Academic Publishers,2003.

AROONWILAS,A;TONTIWACHWTHOKUL,P.**High efficiency structured packing for CO₂ separation using 2-amino-2 methyl-1-propaniol(AMP).**Separation and Purification Technology, Amsterdam,v.12,n 1,p67-79,Sep.,1997.

ASTARITA,G;SAVAGE,D.W;BISIO,A. **Gas treating with chemical solvents**, p98-128, John Wiley and Sons .New York, USA, 1983.

BRUNAZZI,G;NARDINI,G;Paglianti.**An Economical Criterion for Packed Absorption Column Design.**Chem.Biochem.Eng,p.199-206,September,2002.

Disponível em:

http://www.pierre.fkit.hr/hdki/cabeg/pdf/16_4_2002/Cabeg_2002-04_1.pdf

CALDAS,J,N;LACERDA,A,I;VELOSO,E;PASCHOAL,L,C,M. **Internos de Torres - pratos e recheios**,p.73-111. 2^a Edição.Editora Interciência,2007.

CHEN K.G. **Packed column internals.**Chemical Engineering, March 5,1984, p.40-51.

COULSON J.M;RICHARDSON J.F;SINNOT R.K. **Costing and Project Evaluation** .Chemical Engineering.Volume 6, 1st,p 181-193.Ed,Pergamon Press,1983.

DANCKWERTS,P.V. **The reaction of CO₂ with ethanolamines.**Chemical Engineering Science, London,v.34,n.4,p.443-446,April,1979.

DANCKWERTS,P.V.**Gas-liquid reactions.**McGraw Hill,1970.

DANG,H.;ROCHELLE, G.T. **CO₂ Absorption Rate and Solubility in Monoethanolamine/Piperazine/Water.**Separation Science and Technology, New York,v.38, n.2,p 337-357, January,2003.

DIAB,S;MADDOX, R,N. **Absorption.**Chemical Engineering, McGraw-Hill, December 27,1982,p.38-56.

DE MELLO, L.F.;MOURE,G.T. **Alternativas Tecnológicas para captura de CO₂. 2º Curso Básico “Compreendendo a Captura e o Armazenamento de Carbono**.PUC-RS.12-13 de agosto de 2013, Disponível em:

http://www.pucrs.br/cepac/download/ccsbasico/03.Alternativas_Tecnologicas_Captura_CO2.pdf

DERKS, P. W. J.; KLEINGELD, T.; van AKEN, C.; HOGENDOORN, J.A.; VERSTEEG, G. F. **Kinetics of absorption of carbon dioxide in aqueous piperazine solutions**. Chemical Engineering Science,London,v 61 ,October, 2006, n .20 ,p. 6837-6854.

DOLAN,M,J;STRIGLEJr ,R,F. **Advances in Distillation Column Design**. Chemical Engineering Progress, November, 1980,p.78-83.

FRAILIE,P,T. **Modeling of Carbon Dioxide Absorption/Stripping by Aqueous Methyldiethanolamine/Piperazine**.Thesis for degree of Doctor of Philosophie, The University of Texas at Austin,2014. Disponível em:

<https://repositories.lib.utexas.edu/bitstream/handle/2152/25019/frailie-dissertation-2014.pdf?sequence=1>

FRANK O. **Shortcuts for Distillation Design**.Chemical Engineering Magazine,March,1977,p.110-128.

GLASSCOCK,D.A.; CRITCHFIELD, J. E.; ROCHELLE, G. T. **CO₂ absorption – desorption in mixtures of methyldiethanolamine with monoethanolamine and diethanolamine**.Chemical Engineering Science,London,v.46,n.11,p.2829-2845, Jan., 1991.

GUNASEKARAN,P. **Corrosion Evaluation for Absorption – based CO₂ capture process using single and blended amines**. Thesis for the Degree of Master of Applied Science In Process Systems Engineering,University of Regina,Saskatchewan,Canada,September ,2012,,p.116-143.

Disponível em:

<http://ourspace.uregina.ca/handle/10294/3753>

GUTHRIE, K.M .**Capital Cost Estimating**.Chemical Engineering,March 29,1969,p.114-142.

HORWITZ,BENJAMIN.**The mathematics of discounted cash flow analyses**.Chemical Engineering,May 19,1980,p.169-174.

KERN,D,Q. **Reboiler Duty for a Multicomponent Mixture**.Process Heat Transfer.,p.50-51 ed. Tokio: McGraw-Hill Kogakusha,LTD.1950

JENSEN,M. J.**Energy Processes Enabled by Cryogenic Carbon Capture**Thesis for degree of Philosophie, Brigham Young University, p. 9-10 , February ,2015.Díspõnível em:

<http://scholarsarchive.byu.edu/cgi/viewcontent.cgi?article=6710&context=etd>

KOHL,A;RIESENFELD,F. **Alkanolamines for hydrogen sulfide and carbon dioxide removal. Gas Purification**. Gulf Publishing ,4 ed. Houston, 1985,p.29-109.

LOCKETT.M.J. **Some General Classification**. Distillation tray fundamentals . 1 ed.London:Cambridge University Press,1986,p1-53.

LOTH,H.P;LYONS JENNIFER;WHITE III,CHARLES.**Process Equipment Cost Estimation Final Report**.NETL,U.S Department of Energy,January,2002.

Disponível em:

<https://www.osti.gov/scitech/servlets/purl/797810/>

LUDWIG, ERNEST E. **Economics in Financial Studies and Project Evaluation**. Applied Project Engineering and Management.2nd ed.Gulf Publishing, Company1988,p157-p467.

MADEIRA,A,C,F.ESCOLA DE QUÍMICA,UFRJ,2008.**Avaliação da tecnologia de adsorção “PSA”para remoção de nitrogênio de gás natural**.Dissertação (Mestrado).Disponível em:

<http://tpqb.eq.ufrj.br/download/remocao-de-nitrogenio-do-gas-natural.pdf>

MADDOX,R;HINES,A. **Convective Mass Transfer** . MassTransfer,fundamentals and Applications.Englewood Cliffs,New York:Prentice Hall,1985

MEDEIROS,J,L;PINTO,D,D,D;ARAUJO,O,Q,F.**Escolha da tecnologia de separação .Curso de Membranas.Módulo I: Conceitos Básicos**.Apostila H₂CIN,2009.Disponível em:

[file:///C:/Users/user/Downloads/h2cin-apostila-de-membranas%20\(5\).pdf](file:///C:/Users/user/Downloads/h2cin-apostila-de-membranas%20(5).pdf)

MOIOLI,S;PELLEGRINI,L.A.;GAMBA,S. **Simulation of CO₂ capture by MEA scrubbing with a rate-based model**.Elsevier,2012. Disponível em:

<https://www.sciencedirect.com/science/.../S1877705812029657>

PATEL, S. **Capture carbon seizing innovation: Petra Nova Power’s plant of the year**. Power magazine, agosto de 2018,p.21

OL,L.E,**Removal of CO₂ from exhaust gas**.Thesis for degree of Philosophie, Telemark University College,2012.:

<https://brage.bibsys.no/xmlui/bitstream/handle/.../PhDThesis.pdf>

PERA, H. **Geradores de Vapor de Água (Caldeira)** . Editora Epusp,1966,p95

PERRY, J. H.Section 14.**Chemical Engineers’s Handbook**. 8thed.New York:McGraw-Hil,2008.

REID,R.C.; PRAUSNITZ, J.M; SHERWOOD, T,K.R;Viscosity. **The properties of gas and liquids**. 3th Ed. McGraw-Hill,1988, p.447-474.

RING, TERRY A. **Equipment Costing**. Chapter 22 (p598-697). Utah University, 2015. Disponível em:

www.che.utah.edu/~ring/...Ppts/7-L2-Equipment%20Costing.ppt

RODRIGUEZ- FLORES , H.; ESCOLA POLITÉCNICA, UNIVERSIDADE SÃO PAULO, 2011. **Absorção de dióxido de carbono em soluções aquosas de aminas em uma coluna de parede molhada com promotor de película**. Dissertação de Mestrado.

RODRIGUEZ- FLORES , H.; ESCOLA POLITÉCNICA, UNIVERSIDADE SÃO PAULO, 2015. **Estudo do processo de absorção e dessorção de CO₂ na solução aquosa de metildietanolamina e piperazina**. Dissertação de Doutorado.

SHERWOOD, T.; PIGFORD, R. **Transfer of Material between Phases**. In _____ Absorption and Extraction. New York: McGraw-Hill, 1975, p.51-114.

SIMONS, K.; UNIVERSITY OF TWENTE, 2010. **Membrane technologies for CO₂ capture**. Tese (Mestrado). Disponível em:

https://www.utwente.nl/tnw/mtg/publications/mstpublications/pdf/2010_Simons.pdf

SELEGHIM JR, P. **Biorrefinarias : Máquinas de Produção de Energia e Armazenamento Geológico de CO₂**. IFSC/USP, 2013 .

STICHLMAIR, J.; BRAVO, J. L.; FAIR, J. R. **General model for prediction of pressure drop and capacity of countercurrent gas/liquid packed columns**. Gas Separation & Purification, vol 3 , 1989.

TREYBAL, R. E. **Mass transfer coefficients**. Mass Transfer Operations. 3th ed, New York: McGraw-Hill, 1981, p.50-88.

TSAI, R. E.; SEIBERT, F.; ELDRIGE, R. B.; ROCHELLE, G. T. UNIVERSITY OF TEXAS. **A dimensionless model for predicting the mass transfer area of structured packing**. Wiley on line library. August 30, 2010. Disponível em:

http://www.che.utexas.edu/rochelle_group/Pubs/Third_quarterly_report_2010.pdf

VATAVUK, W. M., Updating. The CE Plant Cost Index. Chemical Engineering, p.62-70. January, 2002.

WONG, S.; BIOLETTI, R. **Carbon Dioxide Separation Technologies , Carbon & Energy Management Council Alberta Research Council**, 2002, Edmonton, Alberta, Canada. Disponível em:

<http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.452.2491&rep=rep1&type=pdf>

WARSCHAUER , CLAUD LEON. **Métodos (Corretos) para Avaliação de Projetos. Engenharia Econômica Decisões entre Alternativas**. Curso de Extensão em Administração Industrial, 1996. Fundação Vanzolini.

ANEXO A: Modelo matemático da Coluna de Absorção

Balanco de Massa

								vazao de CO2 na entrada do prato n-1	fração de CO2 na entrada do		Vazão de MEA na saída em cada prato	Concentração de MEA na saída
	(kmol MEA/m ³)	mol/mol	1/((E _{kL} a _e)/H)	kmol/(kPa·m ³ ·s)	kmol CO2/(m ³ ·s)	kmol CO2/(m ² ·s)	kmol CO2/s	kmol CO2/s	mol/mol	kmol MEA/s	kmol MEA/s	(kmol MEA/m ³)
Prato	C _B , entrada	Y _{CO2} , saída		K _G a _e	N _{V-CO2} , transf	N _{CO2} , transf	n _{CO2} , transf	n _{CO2} , n-1	Y _A , n-1	n _{MEA} , RXN	n _{MEA} , n-1	C _B , n-1, Saída
n-1	3,97	0,010989	1080,327704	0,000551485	6,129E-04	2,863E-06	1,596E-04	0,000777493	0,013787225	3,19E-04	2,934E-02	3,93
n-2	3,93	0,013787	1085,670785	0,000549865	7,667E-04	3,581E-06	1,996E-04	0,000977083	0,017265439	3,99E-04	2,894E-02	3,88
n-3	3,88	0,017265	1093,131932	0,000547618	9,562E-04	4,466E-06	2,489E-04	0,001226004	0,021569106	4,98E-04	2,845E-02	3,81
n-4	3,81	0,021569	1102,65638	0,000544777	1,188E-03	5,551E-06	3,094E-04	0,00153536	0,026865381	6,19E-04	2,783E-02	3,73
n-5	3,73	0,026865	1114,847594	0,000541183	1,470E-03	6,868E-06	3,828E-04	0,001918135	0,033339791	7,66E-04	2,706E-02	3,63
n-6	3,63	0,03334	1130,507121	0,000536635	1,809E-03	8,451E-06	4,710E-04	0,002389164	0,041189705	9,42E-04	2,612E-02	3,50
n-7	3,50	0,04119	1150,714269	0,000530878	2,211E-03	1,033E-05	5,757E-04	0,002964856	0,050612426	1,15E-03	2,497E-02	3,34
n-8	3,34	0,050612	1176,948133	0,000523586	2,680E-03	1,252E-05	6,977E-04	0,003662529	0,061786387	1,40E-03	2,357E-02	3,16
n-9	3,16	0,061786	1211,282055	0,00051434	3,214E-03	1,501E-05	8,367E-04	0,00449919	0,074844372	1,67E-03	2,190E-02	2,93
n-10	2,93	0,074844	1256,708455	0,000502597	3,804E-03	1,777E-05	9,903E-04	0,005489533	0,08983876	1,98E-03	1,992E-02	2,67
n-11	2,67	0,089839	1317,71255	0,000487646	4,430E-03	2,069E-05	1,153E-03	0,006642919	0,106700409	2,31E-03	1,761E-02	2,36
n-12	2,36	0,1067	1401,356702	0,000468535	5,056E-03	2,362E-05	1,316E-03	0,007959096	0,1251945	2,63E-03	1,498E-02	2,01
n-13	2,01	0,125195	1519,511165	0,000443957	5,621E-03	2,626E-05	1,463E-03	0,009422396	0,14487713	2,93E-03	1,205E-02	1,61
n-14	1,61	0,144877	1693,982367	0,000412042	6,037E-03	2,820E-05	1,572E-03	0,010994015	0,165053571	3,14E-03	8,909E-03	1,19
n-15	1,19	0,165054	1970,279905	0,000369927	6,175E-03	2,884E-05	1,607E-03	0,012601502	0,184728723	3,21E-03	5,694E-03	0,76
n-16	0,76	0,184729	2464,517432	0,000312747	5,843E-03	2,729E-05	1,521E-03	0,014122518	0,202510332	3,04E-03	2,652E-03	0,36
n-17	0,36	0,20251	3611,211808	0,000230194	4,714E-03	2,202E-05	1,227E-03	0,015349808	0,216302438	2,45E-03	1,975E-04	0,03

Balanco de Energia

							$J/(m^2 \cdot s)$					
							$N_{CO2} * (-\Delta H_-)$	$U * (T_{L,1} - T_{G,o})$	$T_{L,n} (K)$	$(U * a_e * A * Z) / (G * C_p * G)$	$T_{G,n} (K)$	$z + \Delta Z$
estagio	$T_{G,i} (K)$	$T_{L,i} (K)$	$\rho_{gr} (kg/m^3)$	$U (J/(m^2 \cdot s \cdot K))$	$N_{CO2,1} (kmol CO_2/(m^2 \cdot s))$	$(a_e * A * Z) / (L * C_p * L)$			309			0
1	298	309	1,153	22,038	2,20E-05	2,13E-03	418,39	242,42	308,63	0,601412514	304,62	0,165
2	304,62	308,63	1,127	21,878	2,73E-05	2,13E-03	518,53	87,74	307,71	0,597026852	307,01	0,33
3	307,01	307,71	1,119	21,821	2,88E-05	2,13E-03	548,01	15,28	306,58	0,595470753	307,43	0,495
4	307,43	306,58	1,117	21,811	2,82E-05	2,13E-03	535,78	-18,52	305,40	0,595201338	306,92	0,66
5	306,92	305,40	1,119	21,823	2,63E-05	2,13E-03	498,85	-33,21	304,27	0,595527803	306,02	0,825
6	306,02	304,27	1,122	21,844	2,36E-05	2,13E-03	448,70	-38,15	303,23	0,596115131	304,97	0,99
7	304,97	303,23	1,126	21,869	2,07E-05	2,13E-03	393,20	-38,06	302,32	0,596792682	303,94	1,155
8	303,94	302,32	1,130	21,894	1,78E-05	2,13E-03	337,62	-35,43	301,52	0,597471642	302,97	1,32
9	302,97	301,52	1,134	21,917	1,50E-05	2,13E-03	285,22	-31,66	300,85	0,598106555	302,10	1,485
10	302,10	300,85	1,137	21,938	1,25E-05	2,13E-03	237,84	-27,51	300,29	0,598676108	301,35	1,65
11	301,35	300,29	1,140	21,956	1,03E-05	2,13E-03	196,26	-23,43	299,82	0,599172846	300,71	1,815
12	300,71	299,82	1,142	21,972	8,45E-06	2,13E-03	160,58	-19,66	299,44	0,599597272	300,18	1,98
13	300,18	299,44	1,144	21,985	6,87E-06	2,13E-03	130,49	-16,30	299,12	0,599954271	299,73	2,145
14	299,73	299,12	1,146	21,996	5,55E-06	2,13E-03	105,46	-13,39	298,87	0,60025089	299,37	2,31
15	299,37	298,87	1,147	22,005	4,47E-06	2,13E-03	84,86	-10,91	298,67	0,600494944	299,07	2,475
16	299,07	298,67	1,148	22,012	3,58E-06	2,13E-03	68,04	-8,84	298,51	0,600694183	298,83	2,64
17	298,83	298,51	1,149	22,018	2,86E-06	2,13E-03	54,39	-7,13	298,37	0,600855815	298,63	2,805

ANEXO B : Dados de Saída das Simulações de MDEA +PZ e MEA. Iteração Final.

Aspen Plus.

Resultados da Simulação com solvente MDEA +PZ- Última Iteração

	Units	CO2OUT1	CO2OUT2	CONDLIQ	CWR	CWS	FLUEGAS	GASOUT	LEANIN	LEANOUT	LEANOUT1	LEANOUT2	PUMPOUT	REACHIN	RICHOUT	RICHOUT1
From		STRIPPER	DRUM	DRUM	LEANCOOL			ABSORBER		STRIPPER	HX1	LEANCOOL	BPUMP	HX1	ABSORBER	PUMP
To		DRUM		STRIPPER		LEANCOOL	ABSORBER		ABSORBER	BPUMP	LEANCOOL		HX1	STRIPPER	PUMP	HX1
Substream: MIXED																
Phase:		Vapor	Vapor	Liquid	Liquid	Liquid	Vapor	Vapor	Liquid	Liquid	Liquid	Liquid	Liquid	Mixed	Liquid	Liquid
Component Mole Fraction																
MDEA		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,0465576	0,046875	0,047027	0,0470992	0,04693	0,0350387	0,033134	0,0337654
PZ		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2,70E-02	2,87E-02	0,0279	0,0273347	0,028705	0,0054906	0,00219	0,0023588
H2O		0,25	0,03	1,00	1,00	1,00	1,00	0,00	9,22E-01	0,9198909	0,920403	0,9207352	0,919826	0,9087767	0,915336	0,9135124
CO2		0,75	0,97	0,00	0,00	0,00	0,00	0,10	1,09E-09	2,43E-08	1,15E-07	1,09E-09	7,86E-06	3,76E-04	1,66E-05	1,64E-05
H2S		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00E+00	0,00E+00	0	0	0	0	0	0
H3O+		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	6,95E-11	3,74E-12	1,77E-13	1,77E-13	6,81E-11	8,19E-10	7,18E-11	7,02E-11
OH-		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,23E-05	8,49E-06	1,21E-05	1,23E-05	6,80E-06	7,34E-07	4,36E-07	4,20E-07
HCO3-		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	8,68E-05	0,00105085	4,84E-04	8,74E-05	0,001113	0,018398	0,005416	0,0071764
CO3-2		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,25E-04	8,49E-06	5,98E-05	1,24E-04	6,22E-06	6,24E-05	0,000258	0,0003221
HS-		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00E+00	0	0	0	0	0	0	0
S-2		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0	0	0	0	0	0	0	0
MDEA+		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,000101473	0,000325457	0,000173	0,000101268	0,00027	0,0120954	0,014017	0,0133856
PZH+		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00234675	0,00185682	0,00214	0,00236468	0,001915	0,00906704	0,008491	0,00946
PZH+2		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00E+00	0	0	0	0	0	0	0
HPZCOO		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2,57E-05	0,000190257	1,15E-04	2,57E-05	0,000175	0,0111917	0,010413	0,0101397
PZCOO-		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2,09E-03	1,04E-03	0,001676	0,00211254	0,001036	0,00289633	0,004852	0,0046733
PZCOO-2		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3,14E-06	3,27E-05	1,04E-05	3,11E-06	8,77E-06	0,00315035	0,005862	0,0051757
N2		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,71	0,76	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	9,13E-06	9,13E-06	9,13E-06
O2		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,19	0,20	0,00E+00	1,02E-17	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	4,53E-06	4,53E-06
CO		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00E+00	0	0	0	0	0	0	0
H2		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0	0	0	0	0	0	0
Mole Flow	KMOL/HR	79,83	62,05	17,78	8326,27	8326,27	640,00	600,87	2001,456	1978,496	1978,496	1978,496	1978,512	1981,281	1980,568	1980,567
Mass Flow	KG/HR	3000,00	2679,47	320,53	150000,00	150000,00	19428,00	17162,04	50000	49585,56	49585,56	49585,56	49585,56	52265,88	52265,88	52265,88
Volume Flow	L/MIN	17516,06	25166,18	5,36	2516,75	2506,24	200442,00	194799,00	809,9302	857,4135	823,266	803,0663	859,6199	851,0671	812,6101	813,0464
Temperature	K	356,53	298,15	298,15	310,61	297,15	298,00	308,39	298	398,02	344,6529	298,15	400,916	376,15	318,6819	318,4279
Pressure	ATM	2,20	1,00	1,00	3,00	3,00	1,30	1,30	1,7	2,205056	3	3	3	3	1,309869	3
Vapor Fraction		1,00	1,00	0,00	0,00	0,00	1,00	1,00	0,00E+00	0	0	0,00E+00	0	1,32E-05	0	0
Liquid Fraction		0,00	0,00	1,00	1,00	1,00	0,00	0,00	1	1	1	1	1	0,9999868	1	1
Solid Fraction		0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0	0	0	0	0	0	0	0
Molar Enthalpy	CAL/MOL	-84514,37	-92812,46	-68286,01	-68045,01	-68286,92	-9460,71	-2624,51	-68903,45	-66628,01	-67887,49	-68905,54	-66626,69	-70604,97	-71891	-71889,44
Mass Enthalpy	CAL/GM	-2248,87	-2149,32	-3787,32	-3777,07	-3790,50	-311,66	-91,89	-2758,145	-2658,501	-2708,755	-2749,376	-2658,469	-2676,474	-2724,25	-2724,184
Enthalpy Flow	CAL/SEC	-1874100,00	-1599700,00	-337210,00	-157380000,00	-157940000,00	-1681900,00	-438050,00	-38308000	-36618000	-37310000	-37869000	-36617000	-38858000	-4E+07	-39551000
Molar Entropy	CAL/MOL-K	-1,03	0,60	-38,97	-38,25	-39,05	1,10	0,69	-5,06E+01	-44,29353	-47,55258	-50,76839	-44,13679	-43,14861	-47,0543	-47,21785
Mass Entropy	CAL/GM-K	-0,03	0,01	-2,16	-2,12	-2,17	0,04	0,02	-2,027021	-1,767341	-1,897379	-2,025692	-1,7611	-1,635598	-1,78308	-1,789277
Molar Density	MOL/CC	0,00	0,00	0,06	0,06	0,06	0,00	0,00	0,0411857	0,0384586	0,040054	0,0410612	0,03836	0,0387999	0,040622	0,0405997
Mass Density	GM/CC	0,00	0,00	1,00	1,028895	0,99	1,00	0,00	1,028895	0,9638594	1,003838	1,029088	0,961385	1,023536	1,071975	1,0714
Average Molecular Weight		37,58	43,18	18,03	18,02	18,02	30,36	28,56	24,98181	25,06225	25,06225	25,06225	25,06205	26,37984	26,38934	26,38935
Phase: All																
Phase: Liquid																

MDEA +PZ -STRIPPER OUTPUTS

CO2 EMISSIONS			THERMAL RESULTS -STRIPPER				
Feed stream name	Flow	CO2e					
	kg/hr	kg/hr					
LEANIN	50000	9,57E-05	Name	Value	Units	Value	Units
FLUEGAS	19428	2816,61892	Temperature	83,380683	C	83,380683	C
			Subcooled temperature				
			Heat duty	-1734,810555	MJ/hr	-1734,810555	MJ/hr
			Subcooled duty				
Product stream name	Flow	CO2e	Distillate rate	3000	kg/hr	3000	kg/hr
	kg/hr	kg/hr	Reflux rate	720,611064	kg/hr	720,611064	kg/hr
GASOUT	17162,0415	173,954285	Reflux ratio	0,240203688		0,240203688	
CO2OUT2	2679,46592	2643,35865	Free water distillate rate				
LEANOUT1	49585,5638	0,00996487	Free water reflux ratio				
			Distillate to feed ratio				
			Name	Value	Units	Value	Units
			Temperature	124,870024	C	124,870024	C
			Heat duty	11782,64232	MJ/hr	11782,64232	MJ/hr
			Bottoms rate	49586,3931	kg/hr	49586,3931	kg/hr
			Boilup rate	5347,71406	kg/hr	5347,71406	kg/hr
			Boilup ratio	0,107846401		0,107846401	

STRIPPER PACKED COLUMN			STRIPPER TRAY COLUMN		
Section starting stage	2		TRAY RATING SUMMARY		
Section ending stage	13		Section starting stage	2	
Column diameter	1,3 meter		Section ending stage	13	
Maximum fractional capacity	0,044638589		Column diameter	1,3 meter	
Maximum capacity factor	0,032251381 m/sec		Maximum flooding factor	0,627656773	
Section pressure drop	0,004863609 atm		Stage	13	
Average pressure drop / Height	3,35014267 mm-water/m		Panel		
Maximum stage liquid holdup	111,439608 l		Section pressure drop	0,105744599 atm	
Max liquid superficial velocity	0,011952588 m/sec		Dowcomer results		
Surface area	2,56 sqcm/cc		Maximum backup / Tray spacing	0,479983593	
Void fraction	0,987		Stage	3	
1st Stichlmair constant	1		Location		
2nd Stichlmair constant	1		Backup	0,219448499 meter	
3rd Stichlmair constant	0,32		Maximum velocity / Design velocity		
			Stage	13	
			Location		
			Velocity	0,088379722 m/sec	

Hidrodinâmica-Recheios

Stage	Packed height	Fractional capacity	HETP	Pressure drop	Pres-drop / Heig	Liquid holdup	Liquid velocity
	meter		meter	atm	mm-water/m	l	m/sec
2	0	0,024199458	0,196505361	0,000205557	1,69909975	111,439608	0,010890289
3	1,25	0,025642303	0,206455359	0,000231508	1,91360353	110,45043	0,010955504
4	2,5	0,028524048	0,210448814	0,000252466	2,0868356	108,309733	0,011096997
5	3,75	0,032667244	0,222833711	0,000294345	2,43300081	105,444049	0,011309426
6	5	0,036701109	0,244296074	0,000356449	2,94634166	103,068312	0,011521156
7	6,25	0,039622713	0,266176666	0,000420026	3,47185704	101,744533	0,011676087
8	7,5	0,041441563	0,282072714	0,000468169	3,8698027	101,168639	0,011773782
9	8,75	0,042555781	0,292109865	0,000498989	4,12455499	100,933851	0,011834608
10	10	0,04328079	0,298636648	0,000518159	4,28300676	100,825609	0,011874859
11	11,25	0,043800557	0,303596024	0,000530749	4,3870714	100,758193	0,011904163
12	12,5	0,044223187	0,308763267	0,00053985	4,46230257	100,696698	0,011928434
13	13,75	0,044638589	0,320355853	0,000547343	4,52423528	100,605679	0,011952588

Hidrodinâmica-Pratos

Stage	Floodingfactor	Downcomervelocity	Downcomer backup	Backup / Trayspace	Pressuredrop	Downcomer res. time
		m/sec	meter		atm	hr
2	0,359709258	0,108878296	0,226729627	0,495909069	0,009207284	0,00116644
3	0,37978304	0,109530296	0,226183587	0,494714758	0,009107333	0,001159497
4	0,398698573	0,110944914	0,226425854	0,495244649	0,009012553	0,001144712
5	0,43570965	0,113068719	0,226876375	0,496230041	0,008872702	0,001123211
6	0,486964616	0,115185541	0,227578107	0,497764888	0,00875357	0,001102569
7	0,535683096	0,116734507	0,228449769	0,499671412	0,008697663	0,001087939
8	0,570695854	0,11771123	0,22923494	0,501388757	0,008682225	0,001078912
9	0,592656099	0,11831936	0,229820584	0,502669694	0,008680099	0,001073366
10	0,606323869	0,118721775	0,230240595	0,503588353	0,008680833	0,001069728
11	0,615392818	0,119014743	0,230558512	0,50428371	0,008681974	0,001067095
12	0,622054074	0,119257404	0,230828944	0,504875206	0,008683234	0,001064923
13	0,627656773	0,119498889	0,231110428	0,505490874	0,008685131	0,001062771

Perfis de Temperaturas

Stage	Temperature liquid from	Temperature vapor to
	C	C
1	83,380683	104,27878
2	104,655482	105,565851
3	106,432962	108,41733
4	109,769476	113,055394
5	114,261951	117,517557
6	118,260607	120,510855
7	120,903619	122,203281
8	122,414524	123,146807
9	123,271423	123,710512
10	123,79201	124,079838
11	124,141583	124,358366
12	124,406063	124,573633
13	124,640058	124,870024
14	124,870024	124,870024

MDEA +PZ -ABSORBER OUTPUTS

ABSORBER		
Section starting stage	1	
Section ending stage	4	
Column diameter	2	meter
Maximum fractional capacity	0,512417904	
Maximum capacity factor	0,045357944	m/sec
Section pressure drop	0,002554257	atm
Average pressure drop / Height	5,86472944	mm-water/m
Maximum stage liquid holdup	216,927161	l
Max liquid superficial velocity	0,004462529	m/sec
Surface area	2,5	sqcm/cc
Void fraction	0,96	
1st Stichlmair constant	5	
2nd Stichlmair constant	3	
3rd Stichlmair constant	0,45	

Hidrodinâmica e HETP

ABSORBER							
Stage	Packed height	Fractional capacity	HETP	Pressure drop	Pres-drop / Height	Liquid holdup	Liquid velocity
	meter		meter	atm	mm-water/m	l	m/sec
1	0	0,450448172	0,321171765	0,000531288	4,87947829	216,927161	0,00438897
2	1,125	0,485583237	0,324812126	0,000621835	5,71108294	205,332838	0,004462529
3	2,25	0,512417904	0,337926177	0,000698007	6,41066844	201,817854	0,00444147
4	3,375	0,512369857	0,355508501	0,000703127	6,45768807	214,014633	0,004311031

Perfis de Temperatura

PROFILES			
Stage	Liquid temperature	Vapor temperature	Pressure
	C	C	atm
1	38,980902	35,2448	1,3
2	52,105265	50,911618	1,30328974
3	55,358347	56,415069	1,30657949
4	45,531891	52,12885	1,30986923

Trocadores de Calor

HX-1 MDEA+PZ CROSS HEAT EXCHANGER		
Calculated heat duty	10440,18381	MJ/hr
Required exchanger area	134,722588	sqm
Actual exchanger area	134,722588	sqm
Percent over (under) design	0	
Average U (Dirty)	730,8684432	kcal/hr-sqm-K
Average U (Clean)		
UA	98464,48812	kcal/hr-K
LMTD (Corrected)	25,3248162	DELTA-C
LMTD correction factor	1	
Thermal effectiveness		
Number of transfer units		
Number of shells in series	1	
Number of shells in parallel		

MDEA+PZ STRIPPER REBOILER OUPUT		
Calculated heat duty	11832,49825	MJ/hr
Required exchanger area	206,393312	sqm
Actual exchanger area	206,393312	sqm
Percent over (under) design	0	
Average U (Dirty)	730,8704628	kcal/hr-sqm-K
Average U (Clean)		
UA	150846,7756	kcal/hr-K
LMTD (Corrected)	18,7351943	DELTA-C
LMTD correction factor	1	
Thermal effectiveness		
Number of transfer units		
Number of shells in series	1	
Number of shells in parallel

MDEA+PZ STRIPPER CONDENSER			
Calculated heat duty	1316,156	MJ/hr	
Required exchanger area	30,89703	sqm	
Actual exchanger area	35	sqm	
Percent over (under) design	13,27951		
Average U (Dirty)	730,8684	kcal/hr-sqm-C	
Average U (Clean)			
UA	22581,66	kcal/hr-K	
LMTD (Corrected)	13,92096	DELTA-C	
LMTD correction factor	1		
Thermal effectiveness			
Number of transfer units			
Number of shells in series	1		
Number of shells in parallel

Resultados da Simulação com solvente MEA- Última Iteração

From To Substream: MIXED Phase:	CO2OUT1 FDRUM STRIPPER VAPOR	CO2OUT2 FDRUM VAPOR	CONDLIQ STRIPPER FDRUM LIQUID	FLUEGAS ABSORBER VAPOR	GASOUT ABSORBER VAPOR	LEANIN ABSORBER LIQUID	LEANOUT HX1 STRIPPER LIQUID	LEANOUT1 HX1 LIQUID	REACHIN STRIPPER HX1 LIQUID	RICHOUT PUMP ABSORBER LIQUID	RICHOUT1 HX1 PUMP LIQUID
Substream: MIXED											
Mole Frac											
MEA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,07	0,08	0,08	0,02	0,02	0,02
H2O	0,12	0,03	1,00	0,00	0,04	0,88	0,88	0,88	0,87	0,88	0,87
CO2	0,88	0,97	0,00	0,10	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
H3O+	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
OH-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
HCO3-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CO3-2	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
MEA ⁺ H	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03	0,02	0,02	0,05	0,05	0,05
MEACOO-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,02	0,02	0,02	0,05	0,05	0,05
N2	0,00	0,00	0,00	0,71	0,75	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
O2	0,00	0,00	0,00	0,19	0,20	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Total Flow kmol/hr	68,44	62,27	6,17	640,00	603,44	2055,63	2032,16	2032,15	2034,15	2034,14	2034,13
Total Flow kg/hr	2800,00	2688,79	111,21	19428,06	17261,04	50000,00	49478,45	49478,45	52167,02	52167,02	52167,02
Total Flow l/min	18226,69	25258,84	1,86	260625,00	194396,00	784,97	831,33	812,00	807,70	792,51	789,54
Temperature K	333,43	298,15	298,15	298,00	306,48	298,00	391,83	362,96	353,15	322,41	322,53
Pressure atm	1,70	1,00	1,00	1,00	1,30	1,40	1,70	1,70	3,50	1,30	3,50
Vapor Frac	1,00	1,00	0,00	1,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Liquid Frac	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
Solid Frac	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Enthalpy cal/mol	-89352,98	-92822,51	-68286,57	-9459,77	-2990,16	-70801,85	-68817,77	-69408,99	-73046,28	-73639,02	-73637,28
Enthalpy cal/gm	-2183,95	-2149,66	-3787,28	-311,62	-104,54	-2910,84	-2826,46	-2850,72	-2848,30	-2871,39	-2871,32
Enthalpy cal/sec	-1698600,00	-1605500,00	-117000,00	-1681700,00	-501220,00	-40428000,00	-38847000,00	-39180000,00	-41274000,00	-41609000,00	-41608000,00
Entropy cal/mol-K	0,00	0,60	-38,97	1,63	0,68	-49,20	-43,94	-45,34	-47,41	-49,16	-49,16
Entropy cal/gm-K	0,00	0,01	-2,16	0,05	0,02	-2,02	-1,80	-1,86	-1,85	-1,92	-1,92
Density mol/cc	0,00	0,00	0,06	0,00	0,00	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04
Density gm/cc	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	1,06	0,99	1,02	1,08	1,10	1,10
Average MW	40,91	43,18	18,03	30,36	28,60	24,32	24,35	24,35	25,65	25,65	25,65
Liq Vol 60F l/min	56,27	54,41		570,90	525,56						

MEA –STRIPPER OUTPUTS

STRIPPER THERMAL RESULTS			CO2 EMISSIONS		
Name	Value	Units	Feed stream name	Flow	CO2e
Temperature	60,28244	C		kg/hr	kg/hr
Subcooled temperature			LEANIN	50000,001	0,000264826
Heat duty	-1222,759163	MJ/hr	FLUEGAS	19428,057	2816,6272
Subcooled duty					
Distillate rate	2800	kg/hr	Product stream name	Flow	CO2e
Reflux rate	476	kg/hr		kg/hr	kg/hr
Reflux ratio	0,17		GASOUT	17261,036	261,72472
Free water distillate rate			CO2OUT2	2688,7872	2652,68906
Free water reflux ratio			LEANOUT1	49478,455	0,059503297
Distillate to feed ratio					
Name	Value	Units			
Temperature	391,830882	K			
Heat duty	13973,46287	MJ/hr			
Bottoms rate	49478,2345	kg/hr			
Boilup rate	6217,07813	kg/hr			
Boilup ratio	0,125652788				
Bottoms to feed ratio					

STRIPPER TRAY COLUMN			STRIPPER PACKING COLUMN		
Section starting stage	2		Section starting stage	2	
Section ending stage	29		Section ending stage	29	
Column diameter	1,3	meter	Column diameter	1,3	meter
Maximum flooding factor	0,77315545		Maximum fractional capacity	0,571277	
Stage	29		Maximum capacity factor	0,041455	m/sec
Panel			Section pressure drop	0,005029	atm
Maximum backup / Tray spacing	0,40901875		Average pressure drop / Height	3,997343	mm-water/m
Stage	29		Maximum stage liquid holdup	37,7718	l
Location			Max liquid superficial velocity	0,011757	m/sec
Backup	0,18700337	meter	Surface area	2,56	sqcm/cc
Maximum velocity / Design velocity			Void fraction	0,987	
Stage	29		1st Stichlmair constant	1	
Location			2nd Stichlmair constant	1	
Velocity	0,11754708	m/sec	2nd Stichlmair constant	1	
			3rd Stichlmair constant	0,32	

Hidrodinâmica HETP – Recheio estruturado

Stage	Packed height	Fractional capacity	HETP	Pressure drop	Pres-drop / Height	Liquid holdup	Liquid velocity
	meter		meter	atm	mm-water/m	l	m/sec
2	0	0,278307378	0,464285714	6,03E-05	1,34097184	37,7718032	0,010297577
3	0,464285714	0,314688228	0,464285714	7,95E-05	1,76935821	37,4740635	0,010331435
4	0,928571429	0,334326537	0,464285714	9,11E-05	2,02805336	37,3321302	0,010367558
5	1,39285714	0,345794288	0,464285714	9,81E-05	2,18276313	37,2416878	0,010408661
6	1,85714286	0,354858287	0,464285714	1,03E-04	2,30282403	37,1590449	0,010460508
7	2,32142857	0,364586992	0,464285714	1,09E-04	2,43077287	37,0679101	0,010527424
8	2,78571429	0,376390888	0,464285714	1,16E-04	2,5887426	36,966161	0,010610679
9	3,25	0,390640753	0,464285714	1,25E-04	2,78579194	36,8600745	0,010707687
10	3,71428571	0,406916458	0,464285714	1,36E-04	3,02019412	36,7595771	0,010812354
11	4,17857143	0,424226105	0,464285714	1,47E-04	3,28068199	36,6731554	0,010917086
12	4,64285714	0,441381449	0,464285714	1,60E-04	3,55016041	36,6045857	0,011015408
13	5,10714286	0,457395413	0,464285714	1,71E-04	3,8115726	36,5530215	0,01110351
14	5,57142857	0,471700196	0,464285714	1,82E-04	4,05272427	36,5151492	0,011180224
15	6,03571429	0,484135468	0,464285714	1,92E-04	4,26779811	36,4872465	0,011246137
16	6,5	0,494811514	0,464285714	2,00E-04	4,45611679	36,4662171	0,011302671
17	6,96428571	0,503966417	0,464285714	2,07E-04	4,61286914	36,4494797	0,01135147
18	7,42857143	0,511870493	0,464285714	2,13E-04	4,74953881	36,4358624	0,01139409
19	7,89285714	0,518778367	0,464285714	2,19E-04	4,86992571	36,4243305	0,011431893
20	8,35714286	0,52491185	0,464285714	2,24E-04	4,97741383	36,414171	0,011466029
21	8,82142857	0,530458607	0,464285714	2,28E-04	5,07498908	36,4048769	0,011497473
22	9,28571429	0,535577595	0,464285714	2,32E-04	5,16525198	36,3960572	0,011527068
23	9,75	0,54040671	0,464285714	2,36E-04	5,25051368	36,3873227	0,011555533
24	10,2142857	0,545061537	0,464285714	2,40E-04	5,332632	36,378471	0,011583696
25	10,6785714	0,549691944	0,464285714	2,43E-04	5,41431644	36,3691195	0,011612325
26	11,1428571	0,554422967	0,464285714	2,47E-04	5,49761307	36,35883	0,011642367
27	11,6071429	0,559421723	0,464285714	2,51E-04	5,58534062	36,3469902	0,011675086
28	12,0714286	0,564919857	0,464285714	2,56E-04	5,69729196	36,333348	0,011712369
29	12,5357143	0,571277233	0,464285714	2,62E-04	5,82938013	36,3155086	0,011757363

Hidrodinâmica – Pratos

Stage	Flooding factor	Downcomer velocity	Downcomer back	Backup / Tray space	Pressure drop	Downcomer res. time
		m/sec	meter		atm	hr
2	0,341414888	0,102952517	0,174494432	0,381658863	0,00752706	0,001233578
3	0,385925625	0,103291016	0,173236495	0,378907469	0,007425704	0,001229536
4	0,411078404	0,103652168	0,173026948	0,378449144	0,007395275	0,001225252
5	0,426439167	0,104063101	0,173136283	0,378688284	0,007378784	0,001220413
6	0,439152179	0,104581459	0,173395627	0,379255528	0,007362608	0,001214364
7	0,45319656	0,105250463	0,173785746	0,380108806	0,007344372	0,001206646
8	0,470482008	0,106082827	0,174319126	0,381275429	0,007325418	0,001197178
9	0,491557717	0,107052694	0,175003019	0,382771258	0,007309094	0,001186332
10	0,515859309	0,108099126	0,175822249	0,384563098	0,007299236	0,001174848
11	0,541965032	0,109146209	0,176735613	0,386560833	0,007298268	0,001163577
12	0,568101659	0,110129205	0,177685682	0,388638849	0,007306019	0,001153191
13	0,592735164	0,111010029	0,178616357	0,390674447	0,007320219	0,001144041
14	0,614930128	0,111776994	0,17948706	0,392578872	0,007337935	0,001136191
15	0,634367706	0,112435974	0,180277149	0,394306975	0,007356744	0,001129532
16	0,651158275	0,113001188	0,180982361	0,395849434	0,007375119	0,001123882
17	0,665628415	0,113489063	0,181608544	0,397219037	0,00739231	0,001119051
18	0,678171276	0,113915171	0,182166301	0,398438978	0,007408074	0,001114865
19	0,689167663	0,114293114	0,182667643	0,399535526	0,007422449	0,001111178
20	0,698955144	0,114634402	0,183124309	0,400534359	0,007435601	0,00110787
21	0,707822862	0,114948765	0,183547159	0,401459229	0,007447746	0,00110484
22	0,716017986	0,115244647	0,183946173	0,402331962	0,007459112	0,001102003
23	0,723756663	0,115529233	0,184330449	0,40317246	0,007469925	0,001099289
24	0,731221762	0,115810804	0,184709277	0,404001043	0,007480363	0,001096616
25	0,738646636	0,116097027	0,185093741	0,404841953	0,007490771	0,001093913
26	0,746229953	0,116397375	0,18549521	0,405720056	0,00750135	0,00109109
27	0,754234342	0,116724498	0,185929405	0,406669741	0,007512409	0,001088032
28	0,763021919	0,117097241	0,186419449	0,407741577	0,007524359	0,001084569
29	0,773155453	0,11754708	0,187003372	0,409018748	0,007537799	0,001080418

Perfis de Temperaturas

PROFILES			
Stage	Liquid temperature	Vapor temperature	Pressure
	C	C	atm
1	64,508078	64,508078	1,7
2	87,006196	88,869146	1,70014072
3	90,514363	91,398515	1,70028143
4	92,224431	92,791967	1,70042215
5	93,245777	93,782269	1,70056287
6	94,140009	94,779218	1,70070359
7	95,186784	95,99244	1,7008443
8	96,530913	97,518691	1,70098502
9	98,229854	99,367981	1,70112574
10	100,251433	101,465191	1,70126646
11	102,471411	103,66523	1,70140717
12	104,707392	105,798147	1,70154789
13	106,785263	107,725861	1,70168861
14	108,595056	109,376115	1,70182933
15	110,103308	110,740012	1,70197004
16	111,330691	111,848128	1,70211076
17	112,322337	112,746133	1,70225148
18	113,127307	113,47959	1,7023922
19	113,789005	114,087522	1,70253291
20	114,342523	114,601101	1,70267363
21	114,815136	115,044541	1,70281435
22	115,227819	115,436639	1,70295507
23	115,596835	115,792304	1,70309578
24	115,935343	116,123979	1,7032365
25	116,253742	116,442997	1,70337722
26	116,562159	116,761669	1,70351794
27	116,870068	117,096283	1,70365865
28	117,188019	117,474283	1,70379937
29	117,52904	117,950946	1,70394009
30	118,650205	118,650205	1,70408081

MEA -ABSORBER OUTPUTS

ABSORBER		
PACKING		
Section starting stage	1	
Section ending stage	10	
Column diameter	1,8	meter
Maximum fractional capacity	0,789119278	
Maximum capacity factor	0,057712459	m/sec
Section pressure drop	0,005384046	atm
Average pressure drop / Height	12,3620989	mm-water/m
Maximum stage liquid holdup	69,236278	l
Max liquid superficial velocity	0,005423064	m/sec
Surface area	2,5	sqcm/cc
Void fraction	0,98	
1st Stichlmair constant	5	
2nd Stichlmair constant	3	
3rd Stichlmair constant	0,45	

Hidrodinâmica HETP – Recheio estruturado

Stage	Packed height	Fractional capacity	HETP	Pressure drop	Pres-drop / Height	Liquid holdup	Liquid velocity
	meter		meter	atm	mm-water/m	l	m/sec
1	0	0,69653375	0,387491773	0,000421906	9,68722973	69,236278	0,005173475
2	0,45	0,7095839	0,386756332	0,000446407	10,249768	66,6808987	0,005223854
3	0,9	0,728335012	0,386324169	0,000481511	11,0557884	63,9286575	0,005291192
4	1,35	0,751307116	0,386768407	0,000525712	12,0706569	61,5524308	0,005360571
5	1,8	0,772998491	0,388179618	0,000570631	13,1020363	59,9162354	0,005409161
6	2,25	0,786713787	0,389956024	0,00060335	13,8532785	59,0048983	0,005423064
7	2,7	0,789119278	0,391572266	0,000615151	14,1242313	58,6414279	0,005402458
8	3,15	0,780673064	0,393054107	0,000605613	13,9052331	58,7076293	0,005354014
9	3,6	0,763068729	0,394858555	0,000578359	13,2794829	59,2386603	0,005283595
10	4,05	0,737138049	0,397758121	0,000535408	12,2932835	60,521151	0,005190615

Perfis de Temperaturas

PROFILES			
Stage	Liquid temperature	Vapor temperature	Pressure
	C	C	atm
1	29,353152	33,328163	1,3
2	35,818911	40,308575	1,30042191
3	43,872222	47,989018	1,30086831
4	51,964472	54,814487	1,30134982
5	58,206941	59,405536	1,30187554
6	61,656031	61,26194	1,30244617
7	62,373083	60,491405	1,30304952
8	60,675183	57,180035	1,30366467
9	56,558084	50,970369	1,30427028
10	49,255602	40,811949	1,30484864

Trocadores de Calor

HX1 MEA RICH IN X MEA LEANOUT			STRIPPER CONDENSER		
Calculated heat duty	5026,672879	MJ/hr	Calculated heat duty	1128,89	MJ/hr
Required exchanger area	41,5376325	sqm	Required exchanger area	23,529	sqm
Actual exchanger area	41,5376325	sqm	Actual exchanger area	35	sqm
Percent over (under) design	0		Percent over (under) design	48,75	
Average U (Dirty)	730,8684432	kcal/hr-sqm-C	Average U (Dirty)	730,87	kcal/hr-sqm-C
Average U (Clean)			Average U (Clean)		
UA	30358,54483	kcal/hr-K	UA	17196,48	kcal/hr-K
LMTD (Corrected)	39,5473563	C	LMTD (Corrected)	15,68	C
LMTD correction factor	1		LMTD correction factor	1	
Thermal effectiveness			Thermal effectiveness		
Number of transfer units			Number of transfer units		
Number of shells in series	1		Number of shells in series		
Number of shells in parallel			Number of shells in series	1	

Condensador de Topo, Perfis de Temperaturas na troca térmica

STRIPPERREBOILER		
Calculatedheatduty	15795,82158	MJ/hr
Requiredexchangerarea	184,773744	sqm
Actualexchangerarea	184,773744	sqm
Percent over (under) design	0	
Average U (Dirty)	730,8684432	kcal/hr-sqm-C
Average U (Clean)		
UA	135045,2984	kcal/hr-K
LMTD (Corrected)	27,9370494	DELTA-C
LMTD correctionfactor	1	
Thermaleffectiveness		
Numberoftransferunits		
Number of shells in series	1	
Number of shells in parallel		

**ANEXO C :Folha de Dados das Colunas de
Absorção e Dessorção (Stripper) e Trocadores de
Calor-(MDEA+PZ)**

FOLHA DE DADOS DE VASO DE PRESSÃO COLUNA DE ABSORÇÃO

Fl.1 de 1

1					ITEM	T-001
2	SERVIÇO: COLUNA DE ABSORÇÃO DE MDEA +PZ				No.	
3						
4						
5	DIMENSÕES		CALOTAS DE FUNDO E TOPO			
6	DIÂMETRO:	mm	2000 (T8.)	TIPO	TORISFÉRICO 6%	
7	ALTURA VERTICAL:	mm	5800			
8						
9	CONDIÇÕES DE OPERAÇÃO			CONDIÇÕES DE PROJETO		
10		TOPO	FUNDO			
11	TEMPERATURA °C	40	60	100		
12	PRESSÃO: kgf/cm ² g	0,3	0,3	1		
13						
14						
15	CODIGO: ASME SEC.VIII					
16						
17	ESPECIFICAÇÃO DE MATERIAL (CORPO E CALOTAS): Aço Carbono					
18	ESPESSURA DE CORROÇÃO,mm: 1,58 mil					
19	ISOLAMENTO: não					
20	BOCAIS					
21	ITEM	Na.	DIÂMETRO	SERVIÇO		
22	No.	REQ.	POL.			
23	1	1	4	ALIMENTAÇÃO DE MDEA+PZ		
24	2	1	10	SAÍDA DE GAS DE TOPO		
25	3	1	24	BOCA DE VISITA		
26	4	1	4	SAÍDA SOLÍQUIDO DE FUNDO		
27	5	1	10	ENTRADA DE GAS (Ar +CO2)		
28						
29						
30						
31	DISPOSITIVOS DE CONTATO E INTERNOS					
32	10	Recheio Estruturado Mellapac-250 Y				
33	11	Material :PP				
34	12	Volume :14,13 m ³				
35	13	Aspersor de Líquido na alimentação,1 unidade				
36	14	Coletor de Líquido na alimentação,1 unidade				
37	15	Suporte de leito de recheio,1 unidade				
38	16					
39	17					
40	18					
41	19					
42	20					
43	21					
44	22					
45	23					
46	24					
47	25					
48	26					
49	27					
50	28					
51	29					
52	30					
53	31					
54	32					
55	33					
56	34					
57	35					
58	36					
59	37					
60	38					
61	39					
62	40					
63	41					
64	42					
65	43					
66	44					
67	45					
68	46					
69	47					
70	48					
71	49					
72	50					
73	51	NOTAS : 1-Folha de Dados simplificada para o propósito de				
74	52	estimativa de custo				

CUSTO : ,USD : P*CE =P* excluding packing inPP

\$68.870,40

FOLHA DE DADOS DE VASO DE PRESSÃO COLUNA DE DESSORÇÃO

Fl. 1 de 1

1					ITEM	T-002
2	SERVIÇO: COLUNA DE DESSORÇÃO DE MDEA-PZ-Recheio Estruturado 250Y				No.	
3						
4						
5	DIMENSÕES		CALOTAS DE FUNDO E TOPO			
6	DIAMETRO:	mm	1300 (36,4")	TIPO	TORISFÉRICO 6%	
7	ALTURA VERTICAL:	mm	16000			
8						
9	CONDIÇÕES DE OPERAÇÃO			CONDIÇÕES DE PROJETO		
10		TOPO	FUNDO			
11	TEMPERATURA °C	106	108	150		
12	PRESSÃO: kgf/cm ² g	0,2	0,2	1		
13						
14						
15	CODIGO: ASME SEC.VIII					
16						
17	ESPECIFICAÇÃO DE MATERIAL (CORPO E CALOTAS): CLAD Aço Inox -304					
18	ESPESSURA DE CORROSAO,mm:					
19	ISOLAMENTO: sim					
20	BOCAIS					
21	ITEM	Na.	DIAMETRO	SERVIÇO		
22	No.	REQ.	POL.			
23	1	1	4	ALIMENTAÇÃO DE MEA		
24	2	1	6	SAÍDA DE GAS DE TOPO		
25	3	1	2	REFLUXO LÍQUIDO		
26	4	1	6	SAÍDA LÍQUIDO DE FUNDO		
27	5	1	6	BOILUP		
28	6	1	24	BOCA DE VISITA		
29						
30						
31	DISPOSITIVOS DE CONTATO E INTERNOS					
32	10	Recheio Estruturado 250 Y				
33	11	Material :Aço Inox 316				
34	12	Volume : 18,8 m ³				
35	13	Aspersor de Líquido na alimentação,1 unidade				
36	14	Coletor de Líquido na alimentação,1 unidade				
37	15	Suporte de leito de recheio,1 unidade				
38	16	Material :Aço Inox 316				
39	17					
40	18					
41	19					
42	20					
43	21					
44	22					
45	23					
46	24					
47	25					
48	26					
49	27					
50	28					
51	29					
52	30					
53	31					
54	32					
55	33					
56	34					
57	35					
58	36					
59	37					
60	38					
61	39					
62	40					
63	41					
64	42					
65	43					
66	44					
67	45					
68	46					
69	47					
70	48					
71	49					
72	50					
73	51	NOTAS : 1-Folha de Dados simplificada para o propósito de				
74	52	estimativa de custo				

CUSTO : ,USD : P*CE*Fm =P*1,5(clad , excluding packing in SS

\$157.414,23

FOLHA DE DADOS DE VASO DE PRESSÃO
COLUNA DE DESSORÇÃO DE PRATOS PERFORADOS

Fl.1 de 1

1		SERVIÇO: COLUNA DE DESSORÇÃO DE MDEA +PZ		ITEM	T-002
2				No.	
3					
4					
5		DIMENSÕES		CALOTAS DE FUNDO E TOPO	
6		DIAMETRO:	mm	1300 (51,2")	TIPO
7		ALTURA VERTICAL:	mm	12 450	TORISFÉRICO 6%
8					
9		CONDIÇÕES DE OPERAÇÃO		CONDIÇÕES DE PROJETO	
10		TOPO	FUNDO		
11		TEMPERATURA °C	85	125	150
12		PRESSÃO: kgf/cm²g	1,2	1,2	2
13					
14					
15		CODIGO: ASME SEC.VIII			
16					
17		ESPECIFICAÇÃO DE MATERIAL (CORPO E CALOTAS):		Aço Carbono+ Clad SS304	
18		ESPESSURA DE CORROÇÃO,mm:		NA	
19		ISOLAMENTO: sim			
20		BOCAIS			
21		ITEM	Na.	DIAMETRO	SERVIÇO
22		No.	REQ.	POL.	
23		1	1	4	ALIMENTAÇÃO DE MDEA+PZ RICA
24		2	1	6	SAÍDA DE GAS DE TOPO
25		3	1	2	REFLUXO LÍQUIDO
26		4	1	6	SAÍDA LÍQUIDO DE FUNDO,MDEA+PZ POBRE
27		5	1	4	BOILUP
28					
29					
30					
31		DISPOSITIVOS DE CONTATO E INTERNOS			
32		10		Pratos tipo " Sieve Tray ",14 unidades	
33		11		Material : SS-304	
34		12			
35		13			
36		14			
37		15			
38		16			
39		17			
40		18			
41		19			
42		20			
43		21			
44		22			
45		23			
46		24			
47		25			
48		26			
49		27			
50		28			
51		29			
52		30			
53		31			
54		32			
55		33			
56		34			
57		35			
58		36			
59		37			
60		38			
61		39			
62		40			
63		41			
64		42			
65		43			
66		44			
67		45			
68		46			
69		47			
70		48			
71		49			
72		50			
73		51	NOTAS : 1-Folha de Dados simplificada para o propósito de		CUSTO : ,USD : P*CE*Fm =P*1,5
74		52	estimativa de custo		\$116.259,00

CASCO & TUBO
PERMUTADORES

PERMUTADORES

SISTEMA :

ABSORÇÃO E DESSORÇÃO DE CO2 EM COLUNAS DE MDEA+PZ

1. Item No.	Nos	E-001	E-002	E-003	E-004
2. Service		MDEA +PZ Col.REBOILER	MDEA+PZColumn CONDENSER	RICH MDEA, PZ x LEANOUT MDEA, PZ	LEAN MDEA/PZ COOLER
3. TEMA Type / Design Code		KETTLE -BKU	BHM	BEM	BEM
Heat Exchanged	: - kcal/hr	2 826 143	313 321,0	249 351	2 012 746
4. Surface Area / LMTD orrected	: m2 / deg.C	206	35	135	294
5. Shell I.D. / Kettle I.D.	: mm	838 33 in	305 (12 in)	625 (25 in)	890 (35 in)
6. Tube : No.		740	100	376	820
O.D. / Thk	: mm	19,05	19,05	19,05	35
Pitch / Length	: mm	23,81	23,81	23,81	23,81
7. Fluid Name		Shell Side	Shell Side	Shell Side	Shell Side
8. Fluid Flow Rate	: kg/hr	54 934	3720	50 000	50000
8. Operating Temp. in/out	: deg.C	124,8	83	124,8	71,5
9. Design Temp.	: deg.C	200	200	200	200
10. Operating Press.	: Kg/cm2G	1,2	1,2	1,2	1,2
11. Design Press.	: Kg/cm2G	4,0	4	4	4
12. Corr. Allowance	: mm				1,58
13. Mat'l : Shell / Channel		SS-304	SS-304	SS-304	SS-304
Tube / Tube Sheet		SS-304	SS-304	SS-304	CS
14 :Average U (dirty) : kcal/hr-sqm-degC		730	730	731	731
15. Weight : Equip. Proper	: Ton				
16: Equipment Costf.)					
Surface Area -ft2		2217,4	376,7	1453,1	3164,6
Cost : Proper / Unit Proce(ref.)	: USD				
Design Type Factor		1,3	1	1	1
CE index yearly correction factor(2015 /2004)		1,26	1,26	1,26	1,26
Adjusted Equipment Cost,2015	: USD	360 400,00	75 600,00	189 000,00	226 800 ,00
Ref.https://chemicalprojects.wordpress.com/		-	-	-	-
Overdesign-%			13