

Uso da modelagem e simulação à análise de plantas de captura de CO₂: dimensionamento e economia do processo

Using modeling and simulation to analyze CO₂ capture plants: process sizing and economics

Arthur Felipe Pereira de Jesus ^{1*}

afpj@academico.ufpb.br

Lucas Lucena de Moraes Pereira¹

mrlucaslucena@gmail.com

Arioston Araújo de Moraes Júnior¹

aamj@ct.ufpb.br

**Autor correspondente*

¹ Centro de Tecnologia – Universidade Federal da
Paraíba – UFPB, Paraíba, PB.

Como citar esse artigo:

JESUS, A.F.P.; PEREIRA, M.L.L.; JÚNIOR, A,
A, M;

Uso Da Modelagem E Simulação À Análise
De Plantas De Captura De Co₂:
Dimensionamento E Economia Do Processo.
Revista Científica do ITPAC V.15, n2, pub.1,
agosto de 2022.

DOI: 10.29327/231587.15.2-8

EDITOR CHEFE: Daniele Gomes Carvalho

EDITORAÇÃO: Josias Pimentel de Abreu,

Luis Henrique Sousa Rodrigues e Rubia
Karla de Araújo.

RCITPAC, V.15, n2, pub.1, agosto de 2022

ISSN: 1983-6708

Resumo

Uma proporção significativa da geração de energia provém de processos de combustão de carvão e, portanto, representa uma das maiores fontes pontuais de emissões de CO₂ em todo o mundo. Uma das melhores opções para utilizar a infraestrutura existente é adicionando um processo de separação ao gás de combustão, uma prática conhecida como captura pós-combustão (Post-Combustion Capture – PCC). Este trabalho efetuou uma análise de plantas de captura de CO₂ de pós-combustão por meio da modelagem e da simulação, realizando o dimensionamento dos principais equipamentos das unidades e avaliando a economia do processo. Os resultados foram obtidos através do software Aspen Plus® realizando simulações de três configurações de uma PCC já existente, obtendo o dimensionamento dos equipamentos principais para os três casos, assim como uma avaliação econômica de cada uma das plantas também foi obtida. Foi possível observar que a coluna stripper é responsável por aproximadamente 30-50% do custo total de equipamentos e a carga térmica responsável por aproximadamente 40% dos custos gerados pela planta. Por fim, o desempenho das porcentagens de composição presentes na saída do condensador foi próximo para os três casos, sendo, assim, necessário uma obtenção de melhores estimativas para apurar-se os custos categóricos envolvidos nesse dimensionamento.

Palavras-chave: Captura de Carbono. Absorção Química. Pós-Combustão. Modelagem e Simulação. Aspen Plus®.

Abstract:

A significant proportion of power generation comes from coal combustion processes and therefore represents one of the largest point sources of CO₂ emissions worldwide. One of the best options for utilizing existing infrastructure is by adding a separation process to the flue gas, a practice known as Post-Combustion Capture (PCC). This work performed an analysis of post-combustion CO₂ capture plants through modeling and simulation, performing the sizing of the main equipment of the units and evaluating the economics of the process. The results were obtained through the Aspen Plus® software, performing simulations of three configurations of an existing PCC, obtaining the dimensioning of the main equipments for the three cases, as well as an economic evaluation of each plant was also obtained. It was possible to observe that the stripper column is responsible for approximately 30-50% of the total equipment cost and the thermal load is responsible for approximately 40% of the costs generated by the plant. Finally, the performance of the composition percentages present at the condenser outlet was close for the three cases, thus being necessary to obtain better estimates to determine the categorical costs involved in this sizing.

Keywords: Carbon Capture. Chemical Absorption. Post-Combustion. Modeling and Simulation. Aspen Plus®.

1. INTRODUÇÃO

O acúmulo de gases de efeito estufa, principalmente o CO₂, está causando um aquecimento desenfreado muitas partes do mundo, fazendo-se então ser necessário controlar ou até mesmo zerar as emissões de CO₂. O consenso da opinião científica está cada vez mais preocupado com o constante acúmulo mundial de níveis de CO₂ na atmosfera, e algumas importantes iniciativas políticas refletem isso. O acúmulo de CO₂ está ocorrendo à medida que os combustíveis fósseis à base de carbono do mundo estão sendo queimados e rapidamente convertidos em CO₂ atmosférico, por exemplo, em veículos automotores, fornos domésticos e industriais e geração de energia elétrica. O desmatamento progressivo das florestas do mundo também contribui para o efeito estufa, reduzindo a remoção de CO₂ atmosférico pela fotossíntese. Esses fatos estão alinhados com as evidências de que a Terra está aquecendo.

A tecnologia de captura e armazenamento de carbono (CCS) é considerada a tecnologia mais eficaz para reduzir as emissões de gases de efeito estufa no futuro. Por outro lado, a aplicação da tecnologia CCS é limitada pelo alto consumo de energia e alto custo do processo de captura.

Todas essas plantas de captura de CO₂ com processos baseados em absorção química usam um solvente à base de monoetanolamina (MEA). MEA é um produto químico orgânico pertencente à família de compostos conhecidos como aminas (Rubin et al., 2014). O seu uso está relacionado principalmente ao fato de ser utilizado como solução aquosa, descartando a necessidade de uso de solvente puro, e também por apresentar uma alta taxa de captura, relatada em estudos prévios. É necessário levar em consideração algumas desvantagens do seu uso, como o alto poder corrosivo e a necessidade energética elevada para sua recuperação, que acontece no *stripper*.

2. OBJETIVOS DO TRABALHO

2.1. Objetivo geral

Efetuar a análise de plantas de captura de CO₂ de pós-combustão (PCC) por meio da modelagem e da simulação, realizando o dimensionamento dos principais equipamentos das unidades e avaliando a economia do processo.

2.2 Objetivos específicos

1. Efetuar a modelagem e simulação de uma PCC de dimensão industrial, caso base (objeto de estudo);
2. Propor diferentes configurações (sínteses), trazendo melhorias para o processo, comparando-as com a planta objeto de estudo;
3. Realizar o projeto base para as configurações de PCC propostas, que incluem: número de estágios teóricos e análise das principais variáveis do processo (taxa de captura de carbono, vazão de solvente recuperado (lean solvent), temperatura do refeedor da torre de desabsorção,

temperatura do trocador de calor de integração energética e composição do CO₂ do condensador do *stripper*);

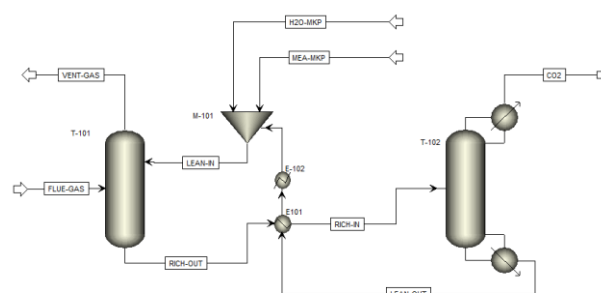
4. Propor uma metodologia para realizar o dimensionamento dos principais equipamentos das plantas (coluna de absorção e de *stripper*);
5. Efetuar a análise econômica para os casos propostos;
6. Comparar o desempenho às diferentes configurações simuladas.

3. METODOLOGIA

3.1. Descrição do processo

Um processo industrial de captura de CO₂ mostrado na Fig. 1 foi simulado. Foi utilizada uma solução de 30wt% de MEA como solvente. Os parâmetros usados correspondem a uma planta encontrada em Nittaya et al. (2014), usada como base para a modelagem dos resultados (ver Tab. 1). Segundo Lin et al. (2011), a pressão da *stripping* é projetada ligeiramente acima da pressão atmosférica para reduzir a necessidade de energia e evitar a degradação da amina.

Figura 1: Fluxograma do processo de captura de CO₂ com monoetanolamina



Fonte: O Autor, 2022.

Tabela 1: Interno das colunas.

Descrição	Absorvedor	Stripping
Pressão de operação [kPa]	101,3	159,5
Número de estágios	20	20
Queda de pressão da coluna [kPa]	2,8	3,3

Fonte: O Autor, 2022.

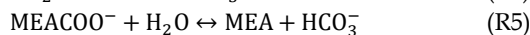
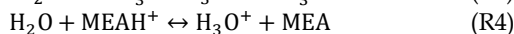
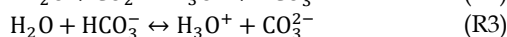
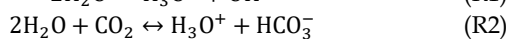
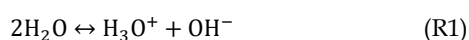
A simulação de processos é uma ferramenta muito utilizada hoje em dia por engenheiros na indústria química tanto para estudar operações de cada área, como até mesmo para estudar uma planta inteira. Simulações de processos são utilizadas tanto para simulação de estado estacionário como para o dinâmico (Bezzo et al., 2004).

A escolha do simulador foi realizada com base em diversos estudos existentes, mas também levando em consideração as características do sistema em questão, pois a mistura de estudo é caracterizada por ser uma solução eletrolítica, ou seja, ela dissocia-se parcialmente onde os íons coexistem em equilíbrio.

As simulações em estado estacionário do processo foram obtidas usando o *Aspen Plus*®. As propriedades termodinâmicas e de fenômenos de transporte essenciais que descrevem o sistema CO₂-MEA-H₂O foram ajustadas usando o electrolyte-NRTL model (Chen et al. 1982).

Um estudo preliminar sobre a determinação do número mínimo de estágios necessários para alcançar o equilíbrio revelou que vinte estágios tanto para o absorvedor quanto para simular a *stripping* eram bastante adequados. Aumentar o número de estágios não resultou em uma descrição mais apurada do processo de absorção ou regeneração do solvente.

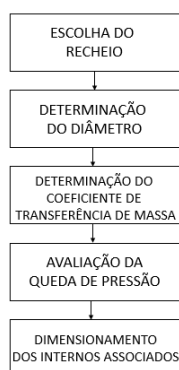
Abu-Zahra et al. (2007) evidencia que a absorção reativa do sistema CO₂-MEA-H₂O é complexa devido a múltiplas reações cinéticas e de equilíbrio reversíveis. Para descrever o fenômeno de absorção, as seguintes reações de equilíbrio foram incluídas no modelo.



A circulação do solvente MEA regenerado entre a *stripping* e o absorvedor constitui a corrente de reciclo, rigorosamente mantida a uma temperatura de 40°C. O aumento da temperatura não favorece o processo, por isso foi utilizado nas simulações um controle de temperatura do fluxo de *lean solvent*, para evitar a vaporização e degradação da MEA.

Para o cálculo do diâmetro foi utilizado o método do *flood point* e para o cálculo da altura foi utilizado o da transferência de massa. Para o dimensionamento de colunas de recheio, o projeto preliminar apresentado encontra-se na Figura 2.

Figura 2. Projeto preliminar do dimensionamento de torres de recheio.

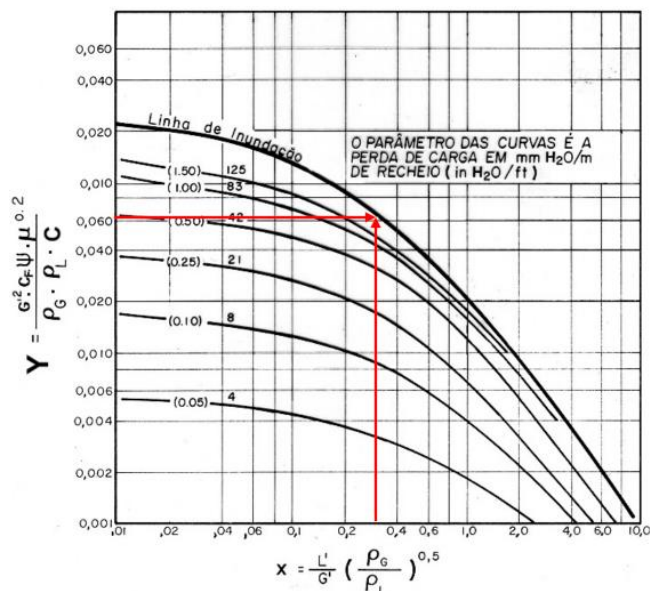


Fonte: O Autor, 2022.

Valores hipotéticos para os diâmetros das torres de absorção e *stripping* são necessários para o design do processo no *Aspen Plus*® como dados de entrada. Os diâmetros das

colunas podem ser estimados pelo *flood point* e por uma queda de pressão recomendada. Assim, foram feitas aproximações para os cálculos dos diâmetros apoiadas em ambas metodologias.

Figura 3. Queda de pressão generalizada.



Fonte: Towler & Simnot, 2008.

Neste estudo, assim como no trabalho de Luo & Wang (2017), uma figura (Fig. 3) de correlação de queda de pressão generalizada (GPDC) foi usada para estimar o ponto máximo de operação das colunas. A abscissa e a ordenada são apresentadas nas Eq. 1 e Eq. 2, respectivamente.

$$F_{LV} = \frac{L}{G} \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L}} \quad (1)$$

$$K_4 = \frac{13,1 G^2 F_p \left(\frac{\mu_L}{\rho_L} \right)^{0.1}}{\rho_V (\rho_L - \rho_V)} \quad (2)$$

Da Eq. 2, a taxa de fluxo mássico de vapor por unidade de área transversal (G) pode ser calculada; em seguida, a área da seção transversal pode ser obtida considerando a vazão do gás de combustão. Nesta equação, K₄ é um parâmetro de carga obtido da Fig. 3, de acordo com o valor de FLV e a queda de pressão especificada; FP é um fator de empacotamento.

Uma torre recheada com determinado recheio é irrigada por uma velocidade superficial da fase líquida, possui um limite superior para a vazão do gás. A velocidade do gás correspondente a este limite é chamada velocidade de inundação. Esta velocidade pode ser encontrada pela observação da perda de carga apresentada pelo recheio em função da velocidade do gás, e pela observação da retenção de líquido na coluna de recheio (Caldas et al. 2007).

Uma torre recheada com determinado recheio é irrigada por uma velocidade superficial da fase líquida, possui um limite superior para a vazão do gás. A velocidade do gás correspondente a este limite é chamada velocidade de inundação. Esta velocidade pode ser encontrada pela observação da perda de carga apresentada pelo recheio em função da velocidade do gás, e pela observação da retenção de líquido na coluna de recheio (Caldas et al. 2007).

Em algumas situações, podemos utilizar o fator de velocidade do vapor, que tem seus valores tabelados, podendo ser encontrados em literaturas disponíveis com em GPSA (1987). Para o presente trabalho utilizaremos a Eq. 3 para tal representação, onde ela será associada ao gráfico da Figura 3:

$$v = C_s \cdot \left(\frac{\rho_G}{\rho_L - \rho_G} \right)^{-0,5} \quad (3)$$

$$C_s = \frac{K_4}{F_P^{0,5} \cdot \left(\frac{L}{\rho} \right)^{0,05}} \quad (4)$$

$$v_0 = v \cdot (40 \sim 80)\% \quad (5)$$

Usualmente, para projetos de absorvedores e retificadores, adota-se, em função das características do sistema, uma vazão de gás entre 40 e 80% da vazão da inundação. As torres assim projetadas usualmente apresentarão queda de pressão entre 200 e 400 Pa/m de recheio, operando próximo ao limite inferior da região de retenção dinâmica do líquido (Caldas et al., 2007).

$$A_{T,COL} = \frac{G}{v_0 \cdot \rho_g} \quad (6)$$

$$D = \sqrt{\left(\frac{4}{\pi} \right) \cdot A_{T,COL}} \quad (7)$$

É notável que a coluna deve atender a operacionalidade de entrada do líquido na sua base e saída do vapor em seu topo, assim como a alimentação deve ser feita buscando a metade do seu nível, e muitas vezes, a depender de qual nível de líquido queremos, é necessária uma válvula de controle na saída da corrente líquida.

Como se pode concluir da metodologia apresentada é necessário conhecer a velocidade mássica do gás para calcular o diâmetro da coluna. É de salientar que a queda de pressão aumenta com esta velocidade, para um caudal de líquido constante e aumenta com o caudal de líquido para uma velocidade mássica do gás constante. O ponto de inundação é específico para cada caudal de líquido e quando este aumenta o ponto de inundação ocorre para menores quedas de pressão (Treybal, 1980).

3.2. Cálculo da altura de colunas recheadas

A abordagem do projeto da coluna baseada na altura foi formulada por meio de uma metodologia encontrada em Abu-Zahra et al. (2007) e Khan et al. (2011), usando dados fornecidos pela simulação do processo em estado estacionário no Aspen Plus® para cada estágio de equilíbrio. O cálculo das

taxas de absorção exige valores para as propriedades físicas e mecânicas das fases gasosa e líquida, bem como a solubilidade do gás e a difusividade na fase líquida. Para cada estágio de equilíbrio, o coeficiente global de transferência de massa precisa ser estimado, descrito como:

$$K_{OV} = \frac{1}{\left(\frac{1}{K_G} \right) + \left(\frac{1}{mE K_L} \right)} \quad (3)$$

Onde K_G e K_L são os coeficientes de transferência de massa na fase gasosa e líquida, respectivamente; m é a solubilidade do CO_2 ; E é o enhancement factor.

Segundo Abu-Zahra et al. (2007), os dois parâmetros mais importantes para o dimensionamento da coluna são o diâmetro e o volume da coluna. Para calcular a altura de cada estágio e, em seguida, a altura total da coluna, primeiro o fluxo de transferência de massa precisa ser calculado e a quantidade de CO_2 absorvido. Então, a área de recheio pode ser determinada a partir de:

$$A_P = \frac{\Phi_{CO_2}}{J}, \quad J = K_{OV} \cdot \Delta C \left(\frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \right) \quad (4)$$

A partir da área do recheio que é necessária e em combinação com a área específica do recheio, o volume do recheio foi calculado em cada etapa. O volume de recheio para cada estágio foi somado resultando em um volume total de recheio. A altura pode ser calculada usando o diâmetro estimado da coluna e, em seguida, um fator de segurança (1,25) foi aplicado para a altura da coluna calculada para fornecer a altura total da coluna.

Para cada estágio de equilíbrio, a transferência de massa total coeficiente precisa ser estimado. A transferência de massa total coeficiente pode ser escrito como:

$$K_{OV} = \frac{1}{\left(\frac{1}{K_G} \right) + \left(\frac{1}{m \cdot E \cdot K_L} \right)} \quad (5)$$

O fator de melhoramento E , é a razão entre o fluxo da absorção química e o fluxo da absorção física na mesma força motriz. Isto é dado como uma função de dois parâmetros, o número de Hatta (Ha) e o fator de potencialização de uma reação infinitamente rápida (E_∞). O fator de melhoramento pode ser considerado como sendo uma correção do coeficiente de transferência de massa do lado do líquido devido a reação química que ocorre na camada limite de concentração. O número de Hatta, indicativo da taxa de difusão transporte vs. reação química, é dado por:

$$Ha = \sqrt{\frac{D_{CO_2,am} k_2 C_{MEA}}{K_L}} \quad (6)$$

$$Ha = \sqrt{\frac{D_{CO_2,am} k_2 C_{MEA}}{K_L}}$$

O fator de melhoramento para uma reação infinitamente rápida depende da escolha do modelo de transferência de massa. No caso de o modelo do filme pode ser escrito como:

$$E_{\infty} = \left[1 + \frac{D_{MEA,am} C_{MEA}}{\gamma D_{CO_2,am} C_{CO_2,i}} \right] \quad (7)$$

Para calcular o valor do fator de melhoramento é realizada uma solução iterativa para a equação abaixo, que é descrita em Westerterp et al. (1984) foi usado:

$$E = \frac{Ha \cdot \sqrt{\frac{(E_{\infty} - E)}{(E_{\infty} - 1)}}}{\tan \left[Ha \cdot \sqrt{\frac{(E_{\infty} - E)}{(E_{\infty} - 1)}} \right]} \quad (8)$$

O valor de E foi determinado para cada estágio de equilíbrio em um ponto onde a média logarítmica da força motriz era igual a força motriz local, como sugerido em Kohl & Nielsen (1997). A análise assume que a reação entre CO₂ e MEA é simples e de segunda ordem, como mostrado em Versteeg et al. (1996). A velocidade de reação é dada por:

$$k_2 = 4,4 \times 10^8 \cdot e^{-\frac{5400}{T}} \quad (9)$$

A reação acima é válida para temperaturas de até 40°C, mas foi assumido que esta relação também é aplicável na faixa de temperaturas do absorvedor (<55°C). A constante de reação reversível na coluna de *stripper* foi estimada usando a correlação abaixo desenvolvida por Jamal et al. (2004), que é válida para temperaturas até as condições do *stripper*:

$$K_{-1} = 3,95 \times 10^{10} \cdot e^{-\frac{6863,8}{T}} \quad (10)$$

O coeficiente físico de transferência de massa foi estimado usando as correlações de Bravo e Fair. A metodologia acima utilizada, está descrita em Abu-Zhara et al. (2007) e Kister (1992).

O custo de um item específico no processo (equipamento) depende de alguns fatores, dentre os quais se destacam: (a) tamanho do equipamento; (b) materiais de construção; (c) pressão e (d) temperatura de projeto.

Diante algumas observações e análises, podemos entender o que seria o TAC (*Total Annual Cost*) ou custo total

anual. Para Peters et al. (2003) e Sinnott et al. (2005), o TAC é dado pela soma do capital anual e os custos operacionais:

$$TAC = \frac{CC}{PP} + OC \quad (11)$$

Em particular, o primeiro termo refere-se aos custos de compra do equipamento (Custos Adquiridos) e a parcela do equipamento (Custos Instalados). Por outro lado, os custos operacionais correspondem aos custos das concessionárias, ou seja, vapor, água de refrigeração, eletricidade. Para os cálculos econômicos, o Aspen Plus® pode ser vinculado ao *Aspen Process Economic Analyzer*® (APEA), que é o *software* da AspenTech dedicado à estimativa de custos. Algumas informações devem ser destacadas:

1. O custo capital de cada equipamento varia dependendo do material usado para a sua construção. Os materiais podem ser escolhidos de acordo com o relatório do Banco Asiático de Desenvolvimento (ADB) publicado no site oficial do Instituto Global CCS.
2. Duas saídas devem ser fornecidas pela APEA para o custo capital: os custos adquiridos e os custos instalados. O primeiro item representa os custos para a compra do equipamento, enquanto este último representa a soma dos custos de instalação do equipamento.
3. O custo capital pode sofrer uma amortização quando assumido curtos períodos de retorno (*payback*). Para indústrias químicas esse tempo é média 10 anos.

O custo real que pode ser obtido relacionando o custo adquirido com a aquisição de equipamento é dada pela equação abaixo:

$$I_{Ei} = I_{Ei} \left(\frac{Q_i}{Q_{bi}} \right)^{M_i} f_M f_P f_T \quad (12)$$

Todos os elementos da equação acima estão descritos na lista de nomenclatura e simbologia.

A estimativa mais precisa do custo de compra dos principais equipamentos é fornecida pela cotação atual do fornecedor apropriado (fornecedor do equipamento). A próxima melhor alternativa é usar os dados de custo do mesmo tipo de equipamento adquirido anteriormente. Outra técnica, suficientemente precisa para estudo e estimativas preliminares de custos, que utiliza gráficos resumidos disponíveis para vários tipos de equipamentos comuns. Quaisquer dados de custo devem ser ajustados para qualquer diferença na capacidade da unidade e também para qualquer tempo decorrido desde que os dados de custo foram gerados.

A relação mais simples e comum entre o custo adquirido e um atributo do equipamento relacionado às unidades de capacidade é dada pela Eq. 13:

$$C = C_i \left(\frac{A}{A_i} \right)^n f_M f_P f_T \quad (13)$$

onde C é o custo adquirido, A é o custo de atributo do equipamento, n é o coeficiente exponencial, f_M é o fator de correção para materiais de construção, f_P é o fator de correção

para pressão de projeto e f_T é o fator de correção para temperatura de projeto.

O custo de atributo do equipamento é o parâmetro da unidade usado para correlacionar os custos de capital e está mais frequentemente relacionado à capacidade da unidade; enquanto o termo capacidade é comumente usado para descrever e identificar esse atributo. Quando se depende de registros passados ou correlações publicadas para informações de preços, é essencial ser capaz de atualizar esses custos para levar em consideração as mudanças nas condições econômicas (inflação). Isso pode ser feito usando a seguinte expressão (Turton et al. 2018):

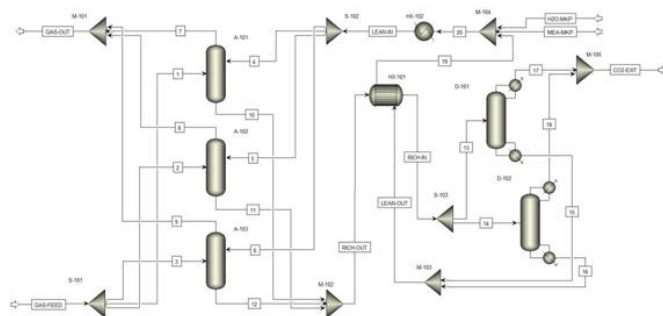
$$C = C_i \left(\frac{B}{B_i} \right) \quad (14)$$

onde C é o custo adquirido e B é o índice de custo; existem vários índices de custo usados pela indústria química para se ajustar aos efeitos da inflação.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A abordagem típica para o projeto dos processos de remoção de CO_2 (Fig. 5) por absorção reativa envolve uma série de análises de sensibilidade, pelas quais as dimensões da coluna e a parâmetros operacionais são variadas em uma certa faixa de valores para obter o desempenho final desejado. Neste tipo de análise os perfis de coluna são geralmente negligenciados. Devido a isso, pode ocorrer que as colunas não funcionem corretamente, embora sejam respeitados os resultados em seus extremos, ou seja, pureza do produto, porcentagem de remoção, etc.

Figura 4. Fluxograma do processo no Aspen Plus®.



Fonte: O Autor, 2022.

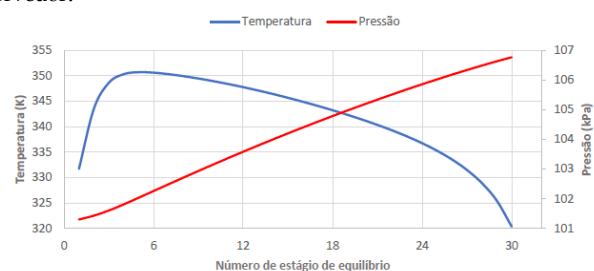
A planta é dividida em duas seções interligadas, ou seja, a absorção, onde o CO_2 é transferido da fase gasosa para a líquida, e o *stripping*, onde o agente de separação (MEA) é recuperado. Na absorção, o gás de combustão (*Flue Gas*) rico em CO_2 é alimentado no fundo do absorvedor, onde flui em um arranjo em contracorrente com o solvente líquido pobre (*Lean Amine*). O gás de escape (*Vent Gas*) é liberado pelo topo da coluna de absorção e o solvente líquido rico (*Rich Amine*) deixa o absorvedor como produto de fundo.

A planta é dividida em duas seções interligadas, ou seja, a absorção, onde o CO_2 é transferido da fase gasosa para

a líquida, e o *stripping*, onde o agente de separação (MEA) é recuperado. Na absorção, o gás de combustão (*Flue Gas*) rico em CO_2 é alimentado no fundo do absorvedor, onde flui em um arranjo em contracorrente com o solvente líquido pobre (*Lean Amine*). O gás de escape (*Vent Gas*) é liberado pelo topo da coluna de absorção e o solvente líquido rico (*Rich Amine*) deixa o absorvedor como produto de fundo.

Para o desenvolvimento do projeto, foi empregado o *software Aspen Plus® v10.0*, sendo utilizado o tipo *RadFrac* às colunas de absorção e de *stripping*, empregando o *rate-based model* e o paradigma de equilíbrio para soluções eletrolíticas (e-NRTL).

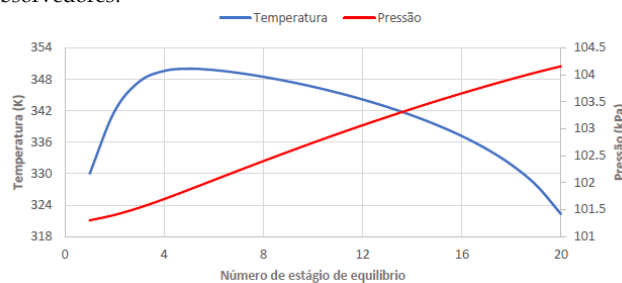
Figura 5. Perfis de temperatura e pressão do processo com um absorvedor.



Fonte: O Autor, 2022.

Todos os dados essenciais para simular a planta industrial aqui descrita podem ser encontrados em Nittaya et al. (2014).

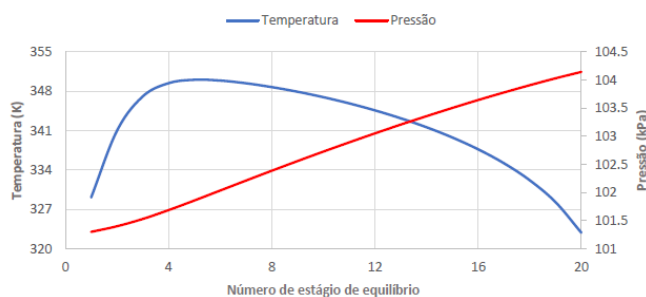
Figura 6. Perfis de temperatura e pressão do processo com dois absorvedores.



Fonte: O Autor, 2022.

Como proposta do trabalho, foram feitas simulações variando o número de absorvedores e *strippings*. Em um caso são considerados 1 absorvedor e 2 *strippings*, e 3 absorvedores e 2 *strippings*. Os comportamentos das colunas de absorção são mostrados nas Fig. 5, Fig. 6 e Fig. 7. A maior queda de pressão foi encontrada para o caso com um único absorvedor, aproximadamente 5,5 kPa, enquanto que para os outros dois processos a queda de pressão foi em torno de 2,8 kPa. O comportamento da temperatura foi similar em todos os processos.

Figura 7. Perfis de temperatura e pressão do processo com três absorvedores.



Fonte: O Autor, 2022.

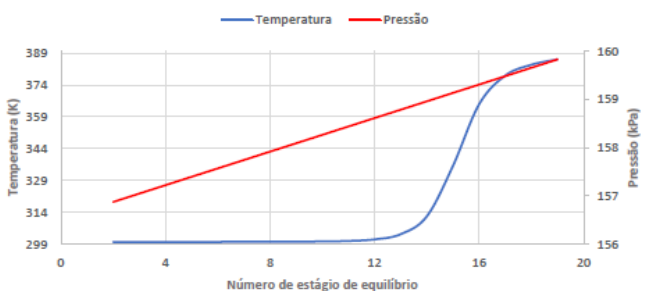
Tabela 2. Interno das colunas.

Descrição	Valor
Vazão flue gas [kmol/s]	20,1
Fração molar	N ₂ : 0,793; CO ₂ : 0,163; H ₂ O: 0,025; O ₂ : 0,019
Temperatura flue gas [K]	319,7
Teor de MEA no solvent [wt%]	30
Nível de captura [%]	90
Percentual de inundação [%]	70
Pressão de operação [atm]	1,0/1,58

Fonte: O Autor, 2022.

Com o número de strippings fixados no caso 2 e 3, os comportamentos de pressão e temperatura foram análogos em ambas as colunas nos três processos. Outro aspecto importante, o condensador foi otimizado para operar a 300 K, possibilitando uma corrente de saída de CO₂ acima de 98% de pureza molar (99% de pureza mássica).

Figura 8. Perfis de temperatura e pressão da stripping.



Fonte: O Autor, 2022.

Como resultado dessa otimização, a coluna se dividiu em duas secções: uma secção mais fria e de temperatura constante nos primeiros treze estágios de equilíbrio e uma secção mais quente, situada ali na base da coluna, perto do refeedor. Isso coloca o ponto de operação no topo da coluna próximo do ponto de inundação, - mas ainda sim dentro do limite permitido - já que a temperatura influencia diretamente propriedades termodinâmicas como a viscosidade e a massa específica do gás, apontando a necessidade do controle, principalmente dessas variáveis de operação desses estágios de equilíbrio iniciais.

Figura 9. Velocidade superficial do gás dentro da stripping.



Fonte: O Autor, 2022.

Os valores estimados para os diâmetros das colunas são planejados para um sistema com uma específica queda de pressão recomendada, e como também, para o tipo de recheio IMTP#50 (2 in). De acordo com a metodologia intrínseca, utilizou-se a Fig. 2 para chegar aos indicadores que permitissem o cálculo do fluxo de gás pelo valor da ordenada correspondente ao parâmetro de fluxo do estudo para obter o critério de capacidade máxima.

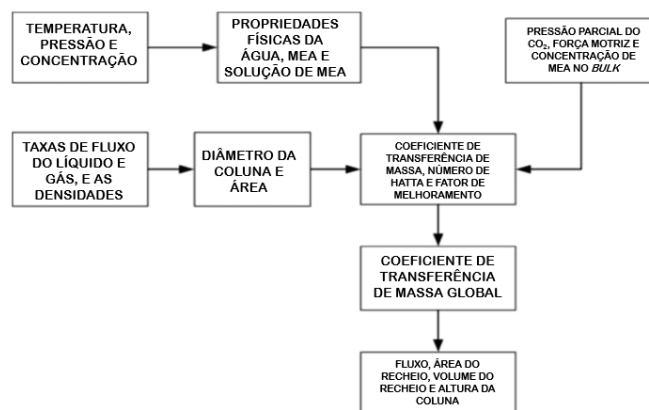
Tabela 3. Interno das colunas

Case Number	Absorvedor		Stripping	
	Flood Point	Maximum Pressure Drop	Flood Point	Maximum Pressure Drop
1ABS-1STR	20,98	15,17	12,16	9,72
1ABS-2STR	14,74	10,68	12,53	10,07
3ABS-2STR	11,82	8,72	12,64	10,18

Fonte: O Autor, 2022.

De acordo com Luo & Wang (2017), para obter uma boa distribuição de líquidos e gases e evitar a inundação dentro da coluna, recomenda-se uma queda de pressão de 15 - 50 mmH₂O/m para o absorvedor e a stripping. Por isso, foi utilizado uma queda de pressão máxima por unidade de altura de recheio de 21 mmH₂O, considerando a formação do solvente MEA. Deve-se notar que o projeto dos componentes internos da coluna, tais como distribuidores de gás e líquido, e redistribuidores, é crucial para assegurar uma boa distribuição de gás e líquido dentro das colunas.

Figura 10. Diagrama de bloco do modelo de cálculo da altura das colunas.



Fonte: Adaptado de Abu-Zahra et al., 2007.

O absorvedor irá tratar grandes volumes de gases de combustão e, portanto, é o maior equipamento de uma planta de captura. Como tal, espera-se que tenha um grande custo de capital associado a ele. Dada a sua importância em termos de investimento, assim como no trabalho de Abu-Zahra et al. (2007), foi construído um modelo de projeto para a coluna do absorvente com base nos primeiros princípios, usando os dados do modelo do estágio de equilíbrio. A partir do coeficiente global de transferência de massa e da força motriz, foi calculado o fluxo de transferência de massa, o qual foi utilizado para estimar a área necessária de recheio. A estrutura do modelo do absorvedor que foi usado pode ser vista no diagrama de blocos na Fig. 10 e os métodos utilizados podem ser encontrados em mais detalhes na metodologia. Um procedimento idêntico também foi seguido para o regenerador.

Tabela 4. Estimativas das alturas das colunas, em metros.

Case Number	Absorvedor		Stripping	
	HETP	Column Height	HETP	Column Height
1ABS-1STR	0,89	17,85	0,93	18,52
1ABS-2STR	1,17	35,20	0,80	16,00
3ABS-2STR	0,82	16,50	0,80	16,00

Fonte: O Autor, 2022.

Os custos capitais das colunas foram calculados para os três processos, considerando o peso da coluna vazia e o volume de recheio. Como esperado, o maior custo capital encontrado foi para o processo com um único absorvedor, quando consideramos que para esse processo necessitamos de mais de 12 mil metros cúbicos de recheio para a planta produzir a mesma quantidade de CO₂ com a mesma pureza molar produzida nos outros dois processos.

Tabela 5. Validações e resultados do caso simulado.

Descrição	1ABS-1STR	1ABS-2STR	3ABS-2STR
Lean loading	0,323	0,295	0,285
Rich loading	0,522	0,494	0,484
Q _{cond} [MW]	230,30	256,26	270,85
Q _{reb} [MW]	474,70	541,28	563,44
Mkp _{H₂O} [t/s]	48,64	14,41	14,41
Mkp _{MEA} [t/s]	1,59	0,12	0,12
CC _{TOT} [US\$]	48.251.500,00	55.126.600,00	76.323.800,00

Fonte: O Autor, 2022.

Por outro lado, com uma coluna de absorção, as dimensões das colunas de *stripping* encontradas foram menores, resultando no menor volume de reação necessário na secção de regeneração do solvente entre os três processos. Mas isso também significa que menos fluido está deixando o absorvedor e atravessando o trocador de calor em direção ao regenerador, ou seja, as perdas de solvente na coluna absorvedora são maiores quando comparadas com os outros

casos, e sendo assim, o processo necessita de uma maior corrente de *make-up*.

Tabela 6. Custos de utilidades.

UTILIDADES - 1ABS-1STR		
NOME	TAXA	CUSTO [USD/H]
Eletricidade	2779,3 KW	221,2646
Água de resfriamento	3,3581 MMGAL/H	452,265
Freon 12	1523,41 KLB/H	1066,6074
Vapor @100PSI	3431,22 KLB/H	26892,221

UTILIDADES - 1ABS-2STR

NOME	TAXA	CUSTO [USD/H]
Eletricidade	3036,32 KW	235,3148
Água de resfriamento	7,759067 MMGAL/H	931,08804
Freon 12	24242,44 KLB/H	2060,6074
Vapor @100PSI	4094,778 KLB/H	33331,492

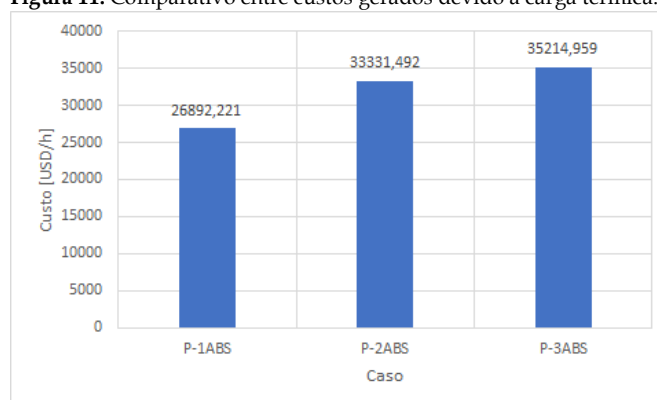
UTILIDADES - 3ABS-2STR

NOME	TAXA	CUSTO [USD/H]
Eletricidade	3409,32 KW	264,2223
Água de resfriamento	8,48606 MMGAL/H	1018,3272
Freon 12	26076,56 KLB/H	2216,5076
Vapor @100PSI	4326,162 KLB/H	35214,959

Fonte: O Autor, 2022.

Quando analisamos os custos de operação de cada planta, podemos obter considerações diferentes das discutidas. Podemos verificar que devido a uma maior necessidade de carga térmica na planta 3, ela se torna mais cara, conforme visto na Tab. 6 e Fig. 11.

Figura 11. Comparativo entre custos gerados devido à carga térmica.



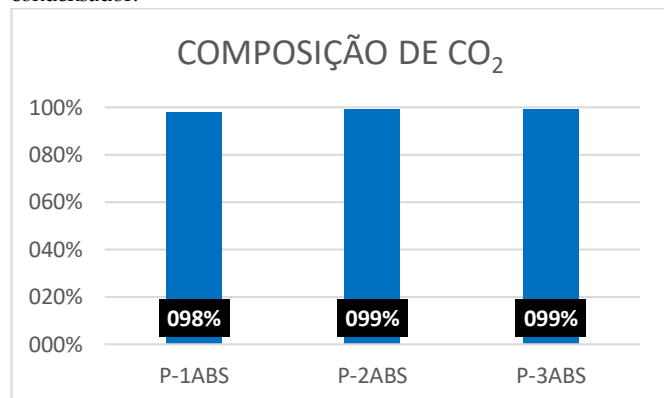
Fonte: O Autor, 2022.

As grandes desvantagens desse primeiro processo estão relacionadas com a manutenção dos equipamentos; colunas com dimensões dessa magnitude são mais complicadas de serem controladas e dificultam a gestão de funcionamento e mantimento do processo de absorção, além de que a qualquer sinal de complicações ou erros durante o

processo, toda a planta teria de ser interrompida, uma vez que nesse caso não temos nenhuma coluna reserva.

Como um outro comparativo, na Fig. 12, podemos analisar a composição de CO₂ presente no fluido que deixa o condensador.

Figura 12. Comparativo entre as composições de CO₂ na saída do condensador.



Fonte: O Autor, 2022.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

É observado que a coluna de *stripping* é responsável por aproximadamente 30-50% do custo capital total de equipamentos, sendo levado em consideração a quantidade de subequipamentos associados a cada um desses equipamentos. Onde também, por esse motivo, os custos operacionais são dominados pelo consumo de vapor, associado exclusivamente às quantidades de carga térmica geradas em cada caso.

Seria também interessante em estudos futuros usar uma abordagem alternativa para o processo, usando uma

modelagem baseada na análise da dinâmica dos fluidos do sistema. Esta análise consistiria, por exemplo, na avaliação do número de Peclet (muito utilizado para estudo dos fenômenos de transporte em fluxos fluidos) para examinar o possível efeito da dispersão axial seguido pela definição de um número adequado de estágios e então ser realizado um comparativo com a modelagem do *RadFrac*.

Além disso, foi visto que a instalação de equipamentos auxiliares para a elaboração de uma seção de lavagem com água para a recuperação de solvente poderia ser interessante.

Por fim, ao fazer uma busca pelo custo total anual referente à planta, entende-se que devem ser avaliadas a soma do total anualizada do custo capital e dos custos operacionais usando o *Aspen Process Economic Analyzer*[®]. É importante a obtenção de melhores estimativas para apurar-se os custos categóricos envolvidos no dimensionamento das unidades de captura, pois são inúmeras as variáveis que podem determinar a precisão dessa análise econômica, não é algo simples, porém, o APEA nos permite enxergar uma boa estimativa e avaliar as maneiras para uma otimização, como as citadas anteriormente.

Cabe ainda atingir melhores estimativas para a apuração dos custos categóricos envolvidos no dimensionamento das unidades de captura, podendo então distinguir entre os produtos dos modelos em estudo qual a disposição mais indicada para a operação das torres, assim como realizar o balanço de pressões na unidade para a verificação de distúrbios operacionais e simular o processo em regime transiente, para conseguir o comportamento das variáveis (concentração, pressão, temperatura, etc.) ao longo do tempo.

REFERÊNCIAS

- AARON, D.; TSOURIS, C. Separation of CO₂ from flue gas: a review. *Separation science and technology*, v. 40, n. 1-3, p. 321-348, 2005.
- ABU-ZAHRA, R. M. A. et al. CO₂ capture from power plants: Part I. A parametric study of the technical performance based on monoethanolamine. *International Journal of Greenhouse gas control*, v. 1, n. 1, p. 37-46, 2007.
- CALDAS, J. N. et al. *Interno de Torres: pratos e recheios*. 2. ed. Rio de Janeiro: Interciência, 2007.
- CHEN, C. C. et al. Local Composition Model for Excess Gibbs Energy of Electrolyte Systems. *AIChE Journal*, p. 588-596, 1982.
- JAMAL, A. et al. Kinetics of Carbon Dioxide Absorption and Desorption in Aqueous Alkanolamine. 2004.
- KHAN, F. M. et al. Modelling reactive absorption of CO₂ in packed columns for postcombustion carbon capture applications. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 89, n. 9, p. 1600-1608, 2011.
- KISTER, H. *Distillation Design*. McGraw Hill Company, Inc. 1992.
- KOHL, A.; NIELSEN, R. *Gas Purification*. 5th ed. Gulf Publishing Company, 1997.
- LIN, Y. et al. Plantwide control of CO₂ capture by absorption and stripping using monoethanolamine solution. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 50, n. 3, p. 1338-1345, 2011.

LUO, X. WANG, M. Improving Prediction Accuracy of a Rate-Based Model of an MEA Based Carbon Capture Process for Large-Scale Commercial Deployment. *Engineering*, v. 3, n. 2, p. 232-243, 2017.

NITTAYA, T. et al. Dynamic modelling and control of MEA absorption processes for CO₂ capture from power plants. *Fuel*, v. 116, p. 672-691, 2014.

PETERS, M. S.; TIMMERHAUS K. D.; WEST, R. E. *Plant design and economics for chemical engineers*. McGraw-Hill Education, New York. 2003.

TOWLER, G. SINNOTT, R. *Chemical Engineering Design: Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design*. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2008.

TURTON, R. et al. *Analysis, Synthesis and Design of Chemical Process*. 5. ed. Ed. Prentice Hall, 2018.

WESTERTERP, K. R.; E. J., WESTERINK. Safe design of cooled tubular reactors for exothermic multiple reactions: Multiple-reaction networks, *Chemical Engineering Science*, Volume 43, Issue 5, 1988. Pages 1051-1069, ISSN 0009-2509.

XUE, B. et al. A comparative study of MEA and DEA for post-combustion CO₂ capture with different process configurations. *International Journal of Coal Science & Technology*, v. 4, n. 1, p. 15-24, 2017.
