



CÁLCULO DE EXERGIA APLICADA À CAPTURA E ARMAZENAMENTO DE CO_2

Matheus Gomes Mesquita

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientadores: Frederico Wanderley Tavares
Amaro Gomes Barreto Jr.

Rio de Janeiro
Novembro de 2024

CÁLCULO DE EXERGIA APLICADA À CAPTURA E ARMAZENAMENTO
DE CO_2

Matheus Gomes Mesquita

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO
ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE
ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO
PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU
DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Orientadores: Frederico Wanderley Tavares
Amaro Gomes Barreto Jr.

Aprovada por: Prof. Frederico Wanderley Tavares
Prof. Amaro Gomes Barreto Jr.
Prof. Frederico de Araújo Kronemberger
Prof. Márcio Luis Lyra Paredes

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
NOVEMBRO DE 2024

Mesquita, Matheus Gomes

Cálculo de Exergia Aplicada à Captura e Armazenamento de CO_2 /Matheus Gomes Mesquita.
– Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2024.

XXI, 149 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: Frederico Wanderley Tavares

Amaro Gomes Barreto Jr.

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Química, 2024.

Referências Bibliográficas: p. 120 – 124.

1. Absorção. 2. Exergia. 3. HYSYS. I. Tavares, Frederico Wanderley *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

Agradecimentos

Primeiramente gostaria de agradecer ao laboratório ATOMS por todo o suporte e aprendizado. Além disso, gostaria de agradecer às seguintes pessoas:

- Fred e Amaro, meus orientadores;
- Vítor, meu colega de laboratório;
- Raimunda, minha mãe, e Antonio, meu pai;
- Lucas, meu irmão;
- Beatriz, minha noiva.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

CÁLCULO DE EXERGIA APLICADA À CAPTURA E ARMAZENAMENTO DE CO_2

Matheus Gomes Mesquita

Novembro/2024

Orientadores: Frederico Wanderley Tavares
Amaro Gomes Barreto Jr.

Programa: Engenharia Química

No presente trabalho, implementou-se o cálculo da exergia no simulador de processos Aspen HYSYS, de modo que se pudesse aplicar a análise exérgica ao processo de absorção de CO_2 , melhorando sua eficiência. Isto foi feito levando-se em consideração somente o consumo de energia no processo, sem levar em consideração aspectos como CAPEX e OPEX. Desta forma, primeiramente foi realizada a validação do cálculo da exergia implementado no Aspen HYSYS e do consumo de energia no processo de absorção a partir da comparação com dados da literatura. Após, determinou-se a temperatura média termodinâmica do vapor d'água.

Realizou-se uma busca por equipamentos do processo de absorção de CO_2 que pudessem ser utilizados na análise exérgica. Também buscou-se por indicadores de eficiência apropriados para serem utilizados na aplicação da análise exérgica ao processo. Assim, de posse do indicador escolhido, aplicou-se a análise exérgica ao processo de absorção para quatro concentrações de CO_2 no gás a ser tratado, variando-se doze variáveis operacionais. Isto foi feito com a finalidade de identificar as variáveis mais convenientes a serem ajustadas no processo, tornando-o mais eficiente.

Realizou-se uma análise comparativa entre o consumo de energia resultante da captura de CO_2 , através do processo de absorção, na indústria do cimento e diretamente do ar atmosférico. Isto foi feito de modo a verificar se é vantajosa, do ponto de vista energético, a aplicação do processo de absorção para a captura de CO_2 do ar. Por fim, foi feito um estudo de caso para a indústria do cimento, o qual possibilitou uma elevada eficiência de captura de CO_2 e uma redução expressiva do consumo de energia e da irreversibilidade no processo.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

EXERGY CALCULATION APPLIED TO CARBON CAPTURE AND STORAGE

Matheus Gomes Mesquita

November/2024

Advisors: Frederico Wanderley Tavares
Amaro Gomes Barreto Jr.

Department: Chemical Engineering

In this work, exergy calculation was implemented in Aspen HYSYS process simulator, in order to apply exergy analysis to CO_2 absorption process, improving its efficiency. This was done considering only energy consumption in the process, not considering CAPEX and OPEX. This way, firstly validation was done for implemented exergy calculations in Aspen HYSYS and for absorption process energy consumption by comparison with literature data. After that, water vapor's thermodynamic average temperature was determined.

A search was done for equipment of CO_2 absorption process which could be used in exergy analysis. A search was done also for appropriate indicators to be used in the application of exergy analysis to the process. This way, using the chosen indicator, exergy analysis was applied to the absorption process for four concentrations of CO_2 in the gas to treat, varying twelve operational variables. This was done in order to identify the most convenient variables to be adjusted in the process, making it more efficient.

Comparative analysis was done between energy consumption from CO_2 capture, by absorption process, in the cement industry and directly from atmospheric air. This was done in order to check if it's advantageous, from energetic perspective, absorption process application for the capture of CO_2 from air. Finally, a case study was done for the cement industry, which allowed a high CO_2 capture efficiency and an expressive reduction in the process' energy consumption and irreversibility.

Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xvi
Lista de Símbolos	xix
1 Introdução	1
1.1 Importância do Tema	1
1.2 Objetivos	5
2 Fundamentação Teórica	7
2.1 Fenômeno da Absorção	7
2.2 Análise Termodinâmica de Processos	8
2.2.1 Irreversibilidade	8
2.3 Balanço de Exergia e Análise Exergética	10
2.3.1 Correntes de Perdas e Correntes Úteis	10
2.3.2 Perdas de Exergia Internas e Perdas de Exergia Externas	12
2.3.3 Eficiência Exergética	13
2.4 Cálculo da Exergia	14
2.4.1 Correntes Materiais	14
2.4.2 Correntes de Energia	19
2.5 Pacote Termodinâmico	19
3 Revisão Bibliográfica	24
4 Metodologia	31
4.1 Implementação do Cálculo da Exergia	31
4.1.1 Propriedades do Usuário	32
4.1.2 Variáveis do Usuário	32
4.2 Validação das Simulações	40
4.2.1 Cálculo da Exergia	40
4.2.2 Consumo de Energia no Processo	42

4.3	Determinação da Temperatura Média Termodinâmica do Vapor d'Água	44
4.4	Escolha dos Indicadores de Eficiência	45
4.4.1	Coluna de Absorção	47
4.4.2	Coluna de Destilação	49
4.5	Análise Exergética da Captura de Gás Carbônico para Diferentes Concentrações do Gás	51
4.6	Avaliação da Captura de Gás Carbônico do Ar Atmosférico	54
4.7	Estudo de Caso para a Indústria do Cimento	58
5	Resultados e Discussões	63
5.1	Validação das Simulações	63
5.1.1	Cálculo da Exergia	63
5.1.2	Consumo de Energia no Processo	64
5.2	Determinação da Temperatura Média Termodinâmica do Vapor d'Água	66
5.3	Escolha dos Indicadores de Eficiência	67
5.3.1	Coluna de Absorção	67
5.3.2	Coluna de Destilação	71
5.4	Análise Exergética da Captura de Gás Carbônico para Diferentes Concentrações do Gás	73
5.4.1	Efeito da Razão L/G	74
5.4.2	Efeito da Fração Mássica de Gás Carbônico no Solvente	76
5.4.3	Efeito da Temperatura do Solvente	78
5.4.4	Efeito da Pressão da Absorvedora	79
5.4.5	Efeito do Número de Pratos da Absorvedora	81
5.4.6	Efeito do Diâmetro da Absorvedora	83
5.4.7	Efeito da Fração Mássica de MEA no Solvente	85
5.4.8	Efeito da Pressão da Retificadora	87
5.4.9	Efeito da Temperatura da Carga	88
5.4.10	Efeito do Prato de Carga	90
5.4.11	Efeito do Número de Pratos da Retificadora	91
5.4.12	Efeito do Diâmetro da Retificadora	97
5.4.13	Observações Gerais	99
5.5	Avaliação da Captura de Gás Carbônico do Ar Atmosférico	100
5.5.1	Ajuste das Variáveis Operacionais para o Ar Seco	103
5.5.2	Ajuste das Variáveis Operacionais para o Ar Úmido	107
5.6	Estudo de Caso para a Indústria do Cimento	112
6	Conclusões	116
7	Sugestões para Trabalhos Futuros	119

Referências Bibliográficas	120
A Código da Variável do Usuário Temperatura Ambiente	125
B Código da Variável do Usuário Pressão Ambiente	126
C Código da Variável do Usuário Pressão Parcial de Xenônio/Oxigênio/Neônio/ Nitrogênio/Criptônio/Hélio/Água/Óxido de Deutério/Dióxido de Carbono/Argônio no Estado Morto de Referência	127
D Código da Variável do Usuário Exergia Física em Unidade de Potência	129
E Código da Variável do Usuário Exergia Química em Unidade de Potência	132
F Código da Variável do Usuário Exergia em Unidade de Potência	143
G Código da Variável do Usuário Temperatura Média Termodinâmica	144
H Código da Variável do Usuário Exergia de uma Corrente de Energia	147

Lista de Figuras

1.1	Fluxograma do processo de absorção clássico.	3
2.1	Representação geral de um processo ou sistema (adaptado de GHAN- NADZADEH <i>et al.</i> [3]).	10
2.2	Fluxograma do cálculo da exergia.	14
2.3	Etapas do cálculo da exergia química.	18
4.1	Algoritmo de cálculo da variável do usuário Exergia Física Mássica. . .	34
4.2	Algoritmo de cálculo da variável do usuário Exergia Química Mássica - parte a.	35
4.3	Algoritmo de cálculo da variável do usuário Exergia Química Mássica - parte b.	36
4.4	Algoritmo de cálculo da variável do usuário Exergia Química Mássica - parte c.	37
4.5	Algoritmo de cálculo da variável do usuário Temperatura Média Ter- modinâmica e Exergia de correntes de energia.	39
4.6	Operação unitária coluna de absorção representada em fluxograma de processos.	48
4.7	Operação unitária coluna de destilação representada em fluxograma de processos.	50
4.8	Fluxograma construído no simulador Aspen HYSYS para as análises exergéticas.	54
4.9	Fluxograma construído no simulador Aspen HYSYS para a realização do estudo de caso relativo à indústria do cimento.	58
4.10	Operação unitária bomba centrífuga representada em fluxograma de processos.	61
4.11	Operação unitária trocador de calor representada em fluxograma de processos.	62
5.1	Temperatura média termodinâmica e eficiência de Carnot do vapor d'água em função da pressão.	66

5.2	Irreversibilidade da coluna de absorção em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora.	67
5.3	Eficiência exergética da coluna de absorção em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora.	68
5.4	Gráfico de barras representativo dos componentes da exergia das correntes relativas à coluna de absorção.	68
5.5	Irreversibilidade e eficiência exergética da coluna de absorção, em suas formas alternativas propostas por MOHAMADI-BAGHMOLAEI <i>et al.</i> [44], em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora (aplicação da máquina de Carnot a cada prato da coluna).	69
5.6	Irreversibilidade e eficiência exergética da coluna de absorção, em suas formas alternativas propostas por MOHAMADI-BAGHMOLAEI <i>et al.</i> [44], em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora (aplicação da máquina de Carnot à coluna como um todo).	70
5.7	Eficiência exergética da coluna de absorção, em sua forma alternativa proposta por EBRAHIMI <i>et al.</i> [39], em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora.	71
5.8	Irreversibilidade da coluna de destilação em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora.	72
5.9	Eficiência racional da coluna de destilação em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora.	73
5.10	Irreversibilidade da coluna de absorção em função da razão L/G, para as diferentes frações molares de CO_2	74
5.11	Irreversibilidade da absorvedora e exergias de suas correntes em função da razão L/G.	75
5.12	Irreversibilidade da coluna de destilação em função da razão L/G, para as diferentes frações molares de CO_2	76
5.13	Irreversibilidade da coluna de absorção em função da fração mássica de CO_2 no solvente, para as diferentes frações molares de CO_2	77
5.14	Irreversibilidade da coluna de destilação em função da fração mássica de CO_2 no solvente, para as diferentes frações molares de CO_2	77
5.15	Irreversibilidade da coluna de absorção em função da temperatura do solvente, para as diferentes frações molares de CO_2	78
5.16	Irreversibilidade da coluna de destilação em função da temperatura do solvente, para as diferentes frações molares de CO_2	79
5.17	Irreversibilidade da coluna de absorção em função de sua pressão de operação, para as diferentes frações molares de CO_2	80

5.18 Irreversibilidade da coluna de destilação em função da pressão de operação da coluna de absorção, para as diferentes frações molares de CO_2	81
5.19 Irreversibilidade da coluna de absorção em função do seu número de pratos, para as diferentes frações molares de CO_2	82
5.20 Irreversibilidade da coluna de destilação em função do número de pratos da coluna de absorção, para as diferentes frações molares de CO_2	83
5.21 Irreversibilidade da coluna de absorção em função de seu diâmetro, para as diferentes frações molares de CO_2	84
5.22 Irreversibilidade da coluna de destilação em função do diâmetro da coluna de absorção, para as diferentes frações molares de CO_2	85
5.23 Irreversibilidade da coluna de absorção em função da fração mássica de MEA no solvente, para as diferentes frações molares de CO_2	86
5.24 Irreversibilidade da coluna de destilação em função da fração mássica de MEA no solvente, para as diferentes frações molares de CO_2	86
5.25 Irreversibilidade da coluna de absorção em função da pressão de operação da coluna de destilação, para as diferentes frações molares de CO_2	87
5.26 Irreversibilidade da coluna de destilação em função de sua pressão de operação, para as diferentes frações molares de CO_2	88
5.27 Irreversibilidade da coluna de absorção em função da temperatura da carga da coluna de destilação, para as diferentes frações molares de CO_2	89
5.28 Irreversibilidade da coluna de destilação em função da temperatura de sua carga, para as diferentes frações molares de CO_2	89
5.29 Irreversibilidade da coluna de absorção em função da localização do prato de carga da coluna de destilação, para as diferentes frações molares de CO_2	90
5.30 Irreversibilidade da coluna de destilação em função da localização de seu prato de carga, para as diferentes frações molares de CO_2	91
5.31 Irreversibilidade da coluna de absorção em função do número de pratos da coluna de destilação, para as diferentes frações molares de CO_2	92
5.32 Irreversibilidade da coluna de destilação em função do seu número de pratos, para as diferentes frações molares de CO_2	92
5.33 Irreversibilidade extensiva da coluna de absorção em função do número de pratos da coluna de destilação, para as diferentes frações molares de CO_2	93

5.34	Irreversibilidade extensiva da coluna de destilação em função de seu número de pratos, para as diferentes frações molares de CO_2	94
5.35	Vazão de CO_2 capturado em função do número de pratos da coluna de destilação, para as diferentes frações molares de CO_2	94
5.36	Energia consumida no refeedor da coluna de destilação em função do seu número de pratos, para as diferentes frações molares de CO_2	95
5.37	Vazão de água que entra no refeedor da coluna de destilação em função do seu número de pratos, para as diferentes frações molares de CO_2	95
5.38	Vazão de água que entra no refeedor em função da razão de refluxo.	96
5.39	Energia consumida no processo em função da razão de refluxo.	97
5.40	Irreversibilidade da coluna de absorção em função do diâmetro da coluna de destilação, para as diferentes frações molares de CO_2	98
5.41	Irreversibilidade da coluna de destilação em função do seu diâmetro, para as diferentes frações molares de CO_2	98
5.42	Fluxograma montado no simulador Aspen HYSYS para o ajuste das variáveis operacionais para o ar seco.	103
5.43	Vazão de CO_2 nas correntes da absorvedora em função do seu número de pratos para o ar seco.	104
5.44	Vazão de água que entra no refeedor em função da razão de refluxo para o ar seco.	106
5.45	Energia consumida no processo em função da razão de refluxo para o ar seco.	106
5.46	Fluxograma montado no simulador Aspen HYSYS para o ajuste das variáveis operacionais para o ar úmido.	108
5.47	Vazão de CO_2 nas correntes da absorvedora em função do seu número de pratos para o ar úmido.	109
5.48	Vazão de água que entra no refeedor em função da razão de refluxo para o ar úmido.	110
5.49	Energia consumida no processo em função da razão de refluxo para o ar úmido.	111
5.50	Vazão de CO_2 nas correntes da absorvedora em função do seu número de pratos para a indústria do cimento.	113
5.51	Consumo de energia no processo em função da fração molar de CO_2 no gás tratado.	114
5.52	Irreversibilidade total do processo em função da fração molar de CO_2 no gás tratado.	115
A.1	Código relativo à variável do usuário temperatura ambiente.	125

B.1	Código relativo à variável do usuário pressão ambiente.	126
C.1	Código relativo à variável do usuário pressão parcial de xenônio/oxigênio/neônio/nitrogênio/criptônio/hélio/água/óxido de deutério/dióxido de carbono/argônio no estado morto de referência. . . .	128
D.1	Código relativo à variável do usuário exergia física em unidade de potência - parte a.	130
D.2	Código relativo à variável do usuário exergia física em unidade de potência - parte b.	131
E.1	Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte a.	133
E.2	Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte b.	134
E.3	Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte c.	135
E.4	Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte d.	136
E.5	Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte e.	137
E.6	Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte f.	138
E.7	Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte g.	139
E.8	Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte h.	140
E.9	Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte i.	141
E.10	Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte j.	142
F.1	Código relativo à variável do usuário exergia em unidade de potência.	143
G.1	Código relativo à variável do usuário temperatura média termodinâmica. Tal variável também identifica o tipo de corrente de energia em questão, calcula e atribui o valor da exergia contida na corrente de energia, sendo utilizada em trocadores de calor - parte a.	145

- G.2 Código relativo à variável do usuário temperatura média termodinâmica. Tal variável também identifica o tipo de corrente de energia em questão, calcula e atribui o valor da exergia contida na corrente de energia, sendo utilizada em trocadores de calor - parte b. 146

- H.1 Código relativo à variável do usuário cálculo da exergia em correntes de energia. Tal variável também identifica o tipo de corrente de energia em questão, calcula e atribui o valor da exergia contida na corrente de energia, sendo utilizada em máquinas de fluxo - parte a. . 148
- H.2 Código relativo à variável do usuário cálculo da exergia em correntes de energia. Tal variável também identifica o tipo de corrente de energia em questão, calcula e atribui o valor da exergia contida na corrente de energia, sendo utilizada em máquinas de fluxo - parte b. . 149

Lista de Tabelas

2.1	Estado morto de referência proposto por SZARGUT <i>et al.</i> [23]	15
4.1	Exemplo de propriedades do usuário (adaptado de ABDOLLAHI-DEMNEH <i>et al.</i> [24]).	32
4.2	Variáveis do usuário referentes ao cálculo da exergia em correntes materiais.	33
4.3	Variáveis do usuário para o cálculo da exergia em correntes de energia.	38
4.4	Condições da corrente exemplo 1 [24].	40
4.5	Condições da corrente exemplo 2 [24].	40
4.6	Coefficientes estequiométricos referentes ao consumo de oxigênio na Equação 2.30.	41
4.7	Coefficientes estequiométricos referentes à geração de água na Equação 2.30.	41
4.8	Coefficientes estequiométricos referentes à geração de gás carbônico na Equação 2.30.	41
4.9	Coefficientes estequiométricos referentes à geração de nitrogênio na Equação 2.30.	42
4.10	Coefficientes estequiométricos referentes à geração de enxofre sólido na Equação 2.30.	42
4.11	Condições da coluna de absorção para a validação do consumo de energia no processo (adaptado de GERVASI <i>et al.</i> [8])	43
4.12	Condições da coluna de destilação para a validação do consumo de energia no processo (adaptado de GERVASI <i>et al.</i> [8])	43
4.13	Informações adicionais para a validação do consumo de energia no processo (adaptado de GERVASI <i>et al.</i> [8])	44
4.14	Condições do gás que entra na absorvedora para a validação do consumo de energia no processo (adaptado de GERVASI <i>et al.</i> [8])	44
4.15	Condições da coluna de absorção para a testagem dos indicadores propostos (adaptado de HASSAN [43])	46
4.16	Condições da coluna de destilação para a testagem dos indicadores propostos (adaptado de HASSAN [43])	46

4.17	Informações adicionais para a testagem dos indicadores propostos (adaptado de HASSAN [43])	47
4.18	Condições do gás a ser tratado para a testagem dos indicadores propostos (adaptado de HASSAN [43])	47
4.19	Condições da coluna de absorção para as quatro frações molares de CO_2 no gás a ser tratado (adaptado de HASSAN [43])	52
4.20	Condições da coluna de destilação para as quatro frações molares de CO_2 no gás a ser tratado (adaptado de HASSAN [43])	52
4.21	Informações adicionais para as quatro frações molares de CO_2 no gás a ser tratado (adaptado de HASSAN [43])	53
4.22	Condições do gás que entra na coluna de absorção (adaptado de HASSAN [43])	53
4.23	Caso base utilizado para as quatro frações molares de CO_2 no gás a ser tratado	53
4.24	Condições da coluna de absorção para os três casos base (adaptado de HASSAN [43])	55
4.25	Condições da coluna de destilação para os três casos base (adaptado de HASSAN [43])	55
4.26	Informações adicionais para os três casos base (adaptado de HASSAN [43])	56
4.27	Condições do gás de combustão na indústria do cimento (adaptado de HASSAN [43])	56
4.28	Condições do ar atmosférico seco (adaptado de YOUNG <i>et al.</i> [45]) .	57
4.29	Condições do ar atmosférico úmido (adaptado de YOUNG <i>et al.</i> [45])	57
4.30	Condições da coluna de absorção para a realização do estudo de caso relativo à indústria do cimento (adaptado de HASSAN [43])	59
4.31	Condições da coluna de destilação para a realização do estudo de caso relativo à indústria do cimento (adaptado de HASSAN [43])	59
4.32	Informações adicionais para a realização do estudo de caso relativo à indústria do cimento (adaptado de HASSAN [43])	59
4.33	Condições do gás que entra na coluna de absorção para a realização do estudo de caso relativo à indústria do cimento (adaptado de HASSAN [43])	60
5.1	Resultados para a corrente exemplo 1 retirados de ABDOLLAHI-DEMNEH <i>et al.</i> [24] e obtidos no presente trabalho.	64
5.2	Resultados para a corrente exemplo 2 retirados de ABDOLLAHI-DEMNEH <i>et al.</i> [24] e obtidos no presente trabalho.	64

5.3	Resultados retirados de GERVASI <i>et al.</i> [8] e obtidos no presente trabalho.	65
5.4	Valores registrados de vazão de destilado, razão de refluxo e fração molar de CO_2 no destilado.	96
5.5	Resultados para o caso base da indústria do cimento.	100
5.6	Resultados para o caso base do ar atmosférico seco.	101
5.7	Resultados para o caso base do ar atmosférico úmido.	102
5.8	Métricas calculadas para cada caso base.	102
5.9	Valores registrados de vazão de destilado, razão de refluxo e vazão de CO_2 no destilado para o ar seco.	105
5.10	Resultados relativos às novas condições do processo de absorção para a captura de CO_2 do ar seco.	107
5.11	Valores registrados de vazão de destilado, razão de refluxo e vazão de CO_2 no destilado para o ar úmido.	110
5.12	Resultados relativos às novas condições do processo de absorção para a captura de CO_2 do ar úmido.	112
5.13	Valores registrados para o número de pratos da absorvedora, a vazão de destilado e a razão de refluxo durante a realização do estudo de caso.	114

Lista de Símbolos

B	Exergia mássica [J/kg]
C	Consumo de energia no processo [J/kgmol]
C_{p_i}	Capacidade calorífica molar a pressão constante do i-ésimo componente [J/(kgmol K)]
EC	Eficiência de captura de CO_2 [-]
E_i	Energia consumida no equipamento i [W]
$G_{f,i}$	Energia de Gibbs molar de formação ideal do i-ésimo componente [J/kgmol]
H	Entalpia mássica [J/kg]
I	Irreversibilidade [J]
MM	Massa molar [kg/kgmol]
P	Pressão absoluta [Pa]
P_c	Pressão crítica [Pa]
P_0	Pressão ambiente [Pa]
P_{00}	Pressão no estado morto de referência [Pa]
P_{0n}	Pressão de referência do simulador [Pa]
$P_{ref,i}$	Pressão parcial do i-ésimo componente no estado morto de referência [Pa]
Q	Calor [J]
R	Constante dos gases ideais [J/(kgmol K)]
S	Entropia mássica [J/(kg K)]
T	Temperatura absoluta [K]
T^{ref}	Temperatura de referência [K]
T_c	Temperatura crítica [K]
T_r	Temperatura reduzida [K]
T_0	Temperatura ambiente [K]
T_{0n}	Temperatura de referência do simulador [K]
T_σ	Temperatura absoluta da vizinhança [K]
W_S	Trabalho real [J]
W_{ideal}	Trabalho ideal [J]

$\Delta H_{f,i}^{T_{0n}}$	Entalpia de formação do i-ésimo componente na temperatura de referência do simulador [J/kgmol]
$P_{ref,i}$	Pressão parcial do i-ésimo componente no estado morto de referência [Pa]
Q	Calor [J]
R	Constante dos gases ideais [J/(kgmol K)]
S	Entropia mássica [J/(kg K)]
T	Temperatura absoluta [K]
T^{ref}	Temperatura de referência [K]
T_c	Temperatura crítica [K]
T_r	Temperatura reduzida [K]
T_0	Temperatura ambiente [K]
T_{0n}	Temperatura de referência do simulador [K]
T_σ	Temperatura absoluta da vizinhança [K]
W_S	Trabalho real [J]
W_{ideal}	Trabalho ideal [J]
$\Delta H_{f,i}^{T_{0n}}$	Entalpia de formação do i-ésimo componente na temperatura de referência do simulador [J/kgmol]
Ψ	Eficiência racional [-]
\dot{B}	Exergia [W]
\dot{B}_C	Exergia da corrente fria [W]
\dot{B}_H	Exergia da corrente quente [W]
\dot{I}	Irreversibilidade [W]
\dot{Q}	Taxa de transferência de calor [W]
\dot{Q}_{COND}	Taxa de transferência de calor do condensador [W]
\dot{Q}_{REF}	Taxa de transferência de calor do refeedor [W]
\dot{S}	Taxa de entropia [W/(kg K)]
\dot{S}_G	Taxa de geração de entropia [W/K]
\dot{W}_S	Potência obtida por trabalho de eixo [W]
\dot{W}_{ideal}	Taxa de trabalho ideal [W]
\dot{m}	Vazão mássica [kg/s]
$\dot{n}_{i,j}$	Vazão molar do componente i na corrente j [kgmol/s]
ϵ	Eficiência de Carnot [-]
η	Eficiência exergética [-]
γ	Coefficiente de atividade [-]
$\nu_{\gamma,\rho}$	Coefficiente estequiométrico do γ -ésimo componente na reação ρ [-]
ω	Fator acêntrico [-]
\bar{T}	Temperatura média de operação [K]

\bar{T}_{CDP}	Temperatura média de operação da corrente de processo do condensador [K]
\bar{T}_{VAP}	Temperatura média de operação do vapor d'água [K]
\underline{z}_0	Vetor de frações molares no estado morto [-]
\underline{z}_{00}	Vetor de frações molares no estado morto de referência [-]
\underline{z}_i	Vetor de frações molares dos componentes da i-ésima corrente [-]
a, b, c, d, e, f, g	Coefficientes da expressão da entalpia de gás ideal [-]
f_s	Correntes de processo (<i>flowing streams</i>)
g	Aceleração da gravidade [m/s ²]
m	Massa [kg]
v	Volume molar [m ³ /kgmol]
u	Velocidade [m/s]
z	Elevação [m]
z_i	Fração molar do i-ésimo componente [-]

Capítulo 1

Introdução

1.1 Importância do Tema

A energia pode ser utilizada para satisfazer as necessidades humanas e melhorar a qualidade de vida, mas geralmente conduz a impactos ambientais [1]. Assim, com o aumento do consumo de energia em todo o mundo, o consumo excessivo de combustíveis fósseis têm levado a grandes emissões de gases do efeito estufa. Tal fenômeno resulta em problemas ambientais severos, tal como a mudança climática. Desta forma, esforços internacionais têm sido realizados para reduzir a emissão de gases do efeito estufa. Na vigésima primeira Conferência para Mudanças Climáticas das Nações Unidas (COP 21), em 2015, 196 países adotaram o Acordo de Paris para limitar o aumento da temperatura do planeta a menos de 2°C. Aproximadamente 62,89% da capacidade energética global é baseada em combustíveis fósseis. De acordo com as estatísticas da Agência Internacional de Energia (IEA), 46,88% da emissão total de gases do efeito estufa está associada com o setor energético, seguido por 24,45% dos transportes, 18,6% da indústria, dentre outros. Portanto, matrizes energéticas alternativas são de fundamental importância para alcançar um sistema energético descarbonizado [2]. Entretanto, mesmo nas projeções mais otimistas tais alternativas constituem soluções de longo prazo e os combustíveis fósseis permanecem relevantes em um futuro próximo [3].

De modo a minimizar as emissões de CO_2 na atmosfera, pode-se fazer uso de algumas tecnologias. Com isto, um método para reduzir as emissões de CO_2 na atmosfera é a captura e armazenamento de CO_2 , que consiste de um conjunto de tecnologias baseadas em capturar CO_2 residual e transportá-lo para um lugar de armazenamento no qual ocorre a injeção do gás em poços [4]. A tecnologia de captura e armazenamento de carbono pode ser uma solução para absorver as emissões de CO_2 e pode ser utilizada em diversas indústrias, tais como usinas termelétricas, cimento, aço, dentre outras. Espera-se que a contribuição na redução das emissões

de CO_2 atinja 19% em 2050 se tal tecnologia for implementada adequadamente [5].

Há diversos métodos para capturar CO_2 , incluindo adsorção sólida, absorção por solvente líquido, membranas, dentre outros. Uma das tecnologias existentes, a absorção, é a mais madura e tem sido amplamente empregada na indústria, especialmente com soluções químicas de amina tais como a monoetanolamina (MEA), a qual possui ampla aplicação na indústria de gás natural. Dentre os solventes de alcanolamina utilizados no processo de remoção de CO_2 tais como a metildietanolamina (MDEA) e dietanolamina (DEA), o MEA é considerado o solvente mais conveniente de ser utilizado [5]. A absorção química com MEA é amplamente utilizada devido à sua rápida taxa de reação, baixo custo, estabilidade e grande capacidade de recuperação. Entretanto, a alta demanda energética e o problema de erosão são obstáculos a serem superados [6].

De modo a melhorar o processo de absorção com aminas e reduzir seu custo, três alternativas são possíveis. Primeiro, o desenvolvimento de novos solventes com alta capacidade de absorção, mantendo boa cinética de absorção, permite a redução significativa da energia de regeneração do solvente. Segundo, a implementação de equipamentos mais eficientes tais como novos contactores gás-líquido ou novos recheios conduz a uma melhoria na performance da absorvedora, o que permite que o solvente atinja uma quantidade de CO_2 próxima à sua capacidade de absorção máxima, reduzindo o CAPEX e o OPEX do processo. Finalmente, o terceiro meio de melhorar a performance do processo de absorção é a implementação de novas configurações do processo de modo a melhorar a integração energética e reduzir seu consumo energético [7].

O presente trabalho possui como foco o processo de absorção, aplicando-se como solvente uma solução aquosa de MEA, cuja concentração mássica de MEA é em geral de 30% [8]. Assim, um fluxograma do processo de absorção clássico pode ser conferido na Figura 1.1:

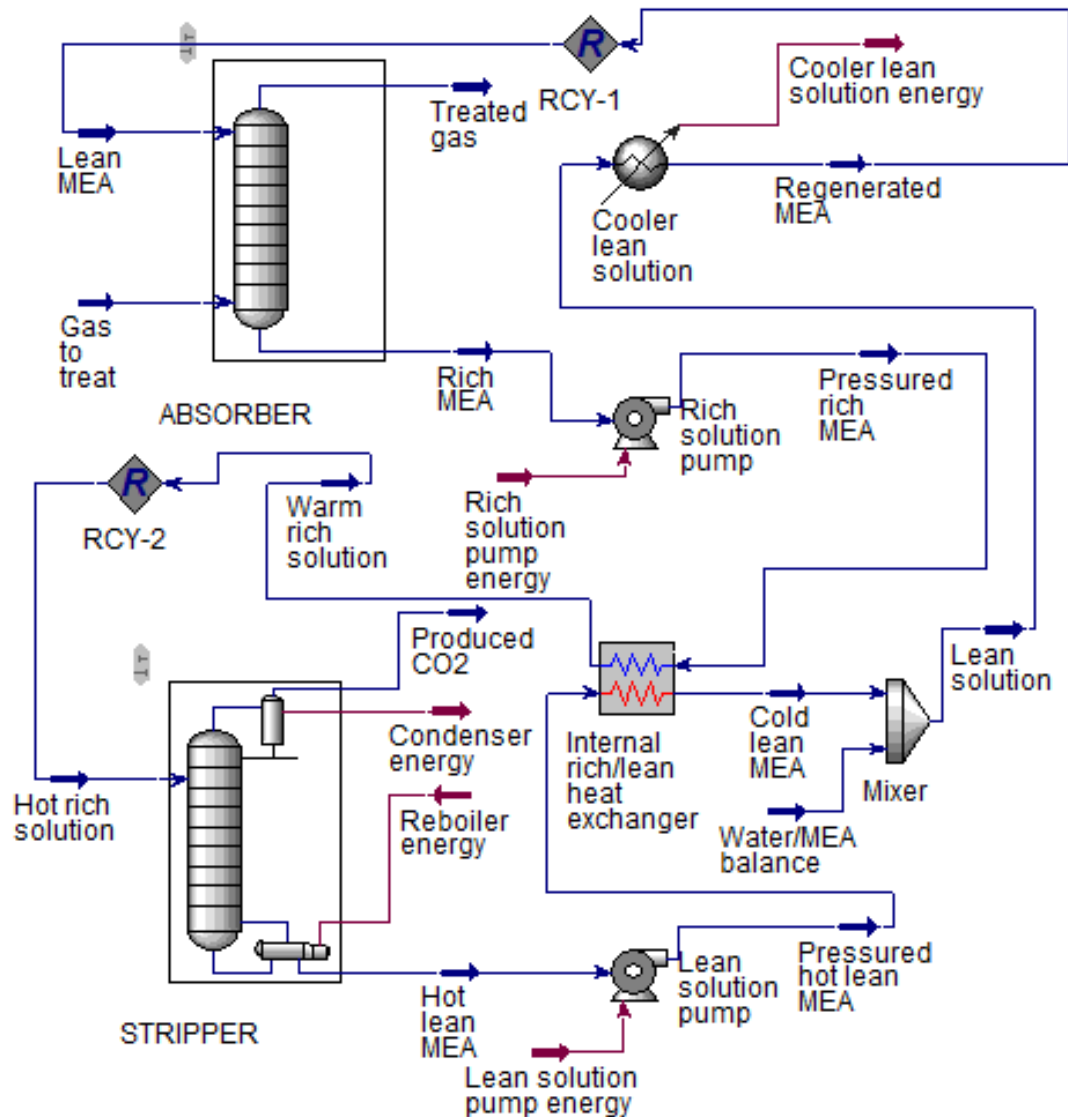


Figura 1.1: Fluxograma do processo de absorção clássica.

Conforme pode ser visto na Figura 1.1, o processo de absorção clássica se inicia em uma coluna de absorção, na qual o solvente entra pelo topo da coluna, enquanto o gás a ser tratado entra pelo fundo. As correntes são colocadas em contato dentro da coluna, e o resultado é uma corrente de gás tratado que deixa a coluna pelo topo e uma corrente de solvente rica em CO_2 que sai pelo fundo. Em seguida, a corrente de solvente que deixa a coluna de absorção vai para um trocador de calor interno, de modo a ter sua temperatura elevada antes de ser enviada para uma coluna de destilação, na qual ocorre a regeneração do solvente. Isto resulta em uma corrente gasosa rica em CO_2 que deixa a coluna pelo topo, e uma corrente de solvente regenerado que sai pelo fundo. Em seguida, a corrente de solvente que deixa a coluna de destilação vai para o trocador de calor mencionado anteriormente, desta vez para que tenha sua temperatura reduzida antes de ser enviada para um misturador, na qual é misturada com uma corrente de solvente de reposição de modo que haja um

ajuste de composição. Então, a corrente resultante do misturador é enviada para um resfriador para que tenha sua temperatura reduzida antes de ser enviada para a coluna de absorção mencionada anteriormente, reiniciando o processo [9]. Com isto, o processo conta com os seguintes equipamentos: 1 coluna de absorção, 1 coluna de destilação, 1 trocador de calor interno, 1 resfriador, 1 misturador e 2 bombas.

Para melhorar a eficiência de processos, incluindo o de absorção, um artifício disponível é a análise exérgica [10]. A exergia pode ser compreendida como o máximo trabalho realizável ao se conduzir uma certa quantidade de matéria até as condições de equilíbrio com o ambiente, sendo tal estado final denominado estado morto [11]. Assim, a análise exérgica busca avaliar o processo do ponto de vista da energia útil, permitindo a identificação de pontos de ineficiência em processos e a redução do impacto ambiental por meio do uso mais eficiente da energia, com foco na sustentabilidade [12].

Outras propriedades termodinâmicas também podem ser utilizadas para avaliar a energia útil de um dado processo, a exemplo da energia livre de Gibbs e da energia livre de Helmholtz. No entanto, a energia livre de Gibbs pressupõe condições de temperatura e pressão constantes, enquanto a energia livre de Helmholtz pressupõe condições de temperatura e volume constantes [13]. Tendo isto em vista, a exergia mostra-se uma ferramenta mais versátil, e por este motivo aplicou-se a análise exérgica ao processo de absorção no presente trabalho.

O cálculo da exergia no presente trabalho foi realizado no simulador de processos Aspen HYSYS, o qual é um dos simuladores mais amplamente utilizados [14]. Tal *software* permite a montagem de fluxogramas de processo, como o da Figura 1.1, e nele é possível a realização de uma análise exérgica concisa, conduzindo a conclusões importantes sobre o processo.

No Capítulo 2 é apresentado o embasamento teórico do presente trabalho. Fala-se a respeito do fenômeno da absorção, da irreversibilidade em processos e também trata-se a respeito do balanço de exergia e da análise exérgica. Além disso, é feito um detalhamento do cálculo da exergia e do pacote termodinâmico utilizado nas simulações.

No Capítulo 3 é feita uma revisão de diversos trabalhos da literatura que abordam o cálculo da exergia. Ao final do capítulo, faz-se uma ponderação a respeito das principais observações extraídas dos trabalhos analisados.

No Capítulo 4 é feito o detalhamento de como foi implementado o cálculo da exergia no simulador de processos Aspen HYSYS. Além disso, são fornecidas as condições operacionais das simulações realizadas.

No Capítulo 5 apresenta-se os resultados obtidos nas simulações a partir das condições operacionais apresentadas no Capítulo 4, bem como suas respectivas discussões. Tais resultados foram gerados levando-se em consideração somente o con-

sumo de energia no processo de absorção de CO_2 , sem levar em consideração aspectos como OPEX e CAPEX. Assim, primeiramente é feita a validação do cálculo da exergia implementado no Aspen HYSYS e do consumo de energia no processo. Após, determina-se a temperatura média termodinâmica do vapor d'água. Então, é escolhido o indicador de eficiência a ser utilizado nas análises exergéticas. De posse do indicador de eficiência escolhido, aplica-se a análise exergética ao processo de absorção para quatro concentrações de CO_2 no gás a ser tratado, variando-se doze variáveis operacionais. Isto foi feito com a finalidade de identificar as variáveis mais convenientes a serem ajustadas no processo, tornando-o mais eficiente. Além disso, realiza-se uma análise comparativa entre o consumo de energia resultante da captura de CO_2 , através do processo de absorção, na indústria do cimento e diretamente do ar atmosférico. O propósito de tal comparação foi verificar se é vantajosa, do ponto de vista energético, a aplicação do processo de absorção para a captura de CO_2 do ar. Por fim, foi feito um estudo de caso para a indústria do cimento, visando um aumento na eficiência de captura de CO_2 e uma redução do consumo de energia e da irreversibilidade no processo.

No Capítulo 6 são expostas as principais conclusões extraídas do presente trabalho.

Por fim, no Capítulo 7 são fornecidas algumas sugestões para trabalhos futuros que venham a ser realizados sobre o tema do presente trabalho.

1.2 Objetivos

Este trabalho possui como objetivo geral tornar o processo de absorção de CO_2 mais eficiente por meio da análise exergética utilizando o simulador de processos Aspen HYSYS. Assim, como objetivos específicos, é possível citar:

- Implementar o cálculo da exergia, em linguagem *Visual Basic*, no simulador de processos Aspen HYSYS;
- Validar o cálculo da exergia implementado no simulador de processos Aspen HYSYS a partir de comparação com artigos da literatura;
- Validar, no simulador de processos Aspen HYSYS, o consumo de energia no processo de absorção de CO_2 a partir de comparação com artigos da literatura;
- Determinar a temperatura média termodinâmica do vapor d'água no simulador de processos Aspen HYSYS;
- Buscar por equipamentos do processo de absorção de CO_2 para serem utilizados na análise exergética;

- Buscar por indicadores de eficiência apropriados para serem utilizados na aplicação da análise exérgica ao processo de absorção de CO_2 ;
- Verificar a sensibilidade do processo de absorção de CO_2 a determinadas variáveis operacionais através da análise exérgica;
- Verificar a sensibilidade do processo de absorção de CO_2 às referidas variáveis operacionais para diferentes concentrações de CO_2 no gás a ser tratado;
- Buscar pelas variáveis que mais impactam na energia consumida e na captura de CO_2 provenientes do processo de absorção de CO_2 ;
- Avaliar o consumo de energia resultante da captura de CO_2 , por meio do processo de absorção, na indústria do cimento;
- Avaliar o consumo de energia resultante da captura de CO_2 , por meio do processo de absorção, diretamente do ar atmosférico seco;
- Avaliar o consumo de energia resultante da captura de CO_2 , por meio do processo de absorção, diretamente do ar atmosférico úmido;
- Comparar o consumo de energia resultante da captura de CO_2 , por meio do processo de absorção, na indústria do cimento e diretamente do ar atmosférico (seco e úmido), e verificar se tal diferença é significativa;
- Realizar um estudo de caso para a captura de CO_2 , por meio do processo de absorção, na indústria do cimento, de modo a aumentar a eficiência de captura de CO_2 e reduzir o consumo de energia e a irreversibilidade do processo;
- Disponibilizar códigos abertos em linguagem *Visual Basic* para implementação do cálculo da exergia no simulador de processos Aspen HYSYS.

Capítulo 2

Fundamentação Teórica

2.1 Fenômeno da Absorção

A absorção é um processo físico-químico de separação amplamente utilizado na indústria [15]. Especificamente em relação à absorção gasosa, esta consiste na transferência de massa de um componente (soluto) de uma fase gasosa para uma fase líquida (solvente). As fases gasosa e líquida geralmente escoam em contracorrente. A presença de colunas recheadas serve para promover um contato mais íntimo entre as fases, favorecendo a transferência de massa. O diâmetro de uma coluna de absorção depende da vazão, das propriedades das correntes líquida e gasosa e do tipo de recheio utilizado. A altura de uma coluna e o volume total de recheio dependem da mudança de concentração desejada e da taxa de transferência de massa por unidade de volume de recheio. No caso em que é possível escolher o solvente, é mais conveniente optar por líquidos em que o soluto possua alta solubilidade, uma vez que uma alta solubilidade minimiza a quantidade de solvente utilizada no processo. Como características desejáveis ao solvente, pode-se citar baixa volatilidade, baixo custo, não ser corrosivo, estabilidade, baixa viscosidade e não ser inflamável [16].

Pode-se classificar a absorção em absorção física e absorção química. Em relação à absorção física, esta não envolve reações químicas, sendo dividida em três etapas: difusão do gás na direção da superfície líquida, dissolução do líquido e transporte do gás dissolvido da superfície ao seio da fase líquida. Já a absorção química (caso do MEA) envolve reações químicas, sendo dividida nas seguintes etapas: difusão do gás do seio da fase gasosa para a interface (em que se considera que o equilíbrio físico é imediatamente alcançado), difusão do gás dissolvido da interface para o seio da fase líquida, difusão do reagente líquido do seio líquido para a interface, reação química dentro da fase líquida e difusão dos produtos de reação de dentro para fora da fase líquida. A reação atua aumentando a taxa de absorção na fase líquida, a qual é maior do que nos processos com absorção física. Um dos motivos para

isso é o fato do consumo do gás absorvido pela reação reduzir a pressão parcial de equilíbrio do gás, aumentando o gradiente de concentração existente entre a interface e o seio da fase gasosa. Outro ponto a ser considerado é o aumento do coeficiente de transferência de massa na fase líquida pela ocorrência da reação [17].

2.2 Análise Termodinâmica de Processos

Há diferentes formas de se realizar um processo, sendo que há maneiras menos dispendiosas, do ponto de vista energético. O aumento de tal dispêndio está atrelado à irreversibilidade do processo. Pode-se definir um processo mecanicamente reversível como uma transformação quase-estática, cujo sistema se afasta infinitesimalmente do equilíbrio com a vizinhança. Assim, um processo reversível representa um limite de desempenho para processos reais. As operações unitárias reais são irreversíveis e, portanto, passíveis de análise termodinâmica. Para quantificar esta irreversibilidade, é preciso utilizar o conceito da função de estado entropia [1].

Tendo em vista o uso eficiente da energia, a eficiência termodinâmica de um processo deveria ser a mais alta possível e a geração de entropia ou o trabalho perdido, o menor possível. Deste modo, a análise termodinâmica de um processo específico mostra os locais de maiores ineficiências, equipamentos ou etapas do processo que devem ser alteradas ou substituídas para torná-lo melhor. Um escopo adicional para análise termodinâmica de processos surge na iminente discussão sobre os problemas relacionados ao meio ambiente, de modo que o projeto final passa a depender também das considerações ambientais, o que configura novos desafios de sustentabilidade energética [1].

2.2.1 Irreversibilidade

O trabalho que é desperdiçado como o resultado de irreversibilidades em um processo é denominado trabalho perdido ou irreversibilidade, e é definido como a diferença entre o trabalho real de uma mudança de estado e o trabalho ideal para a mesma mudança de estado [18]. Portanto, por definição:

$$I = W_S - W_{ideal} \quad (2.1)$$

em que I é a irreversibilidade, em J, W_S é o trabalho real, em J, e W_{ideal} é o trabalho ideal, em J.

Em termos de taxas:

$$\dot{I} = \dot{W}_S - \dot{W}_{ideal} \quad (2.2)$$

em que \dot{I} é a irreversibilidade, em W, \dot{W}_S é a potência obtida por trabalho de eixo, em W, e \dot{W}_{ideal} é a taxa de trabalho ideal, em W.

A taxa de trabalho real é obtida através do balanço de energia, ou seja, da Equação 2.3, enquanto a taxa de trabalho ideal é obtida a partir da Equação 2.4:

$$\dot{W}_S = \Delta \left[\left(H + \frac{1}{2}u^2 + z g \right) \dot{m} \right]_{fs} - \dot{Q} \quad (2.3)$$

$$\dot{W}_{ideal} = \Delta \left[\left(H + \frac{1}{2}u^2 + z g \right) \dot{m} \right]_{fs} - T_\sigma \Delta(S \dot{m})_{fs} \quad (2.4)$$

em que H é a entalpia mássica, em J/kg, u é a velocidade, em m/s, z é a elevação, em m, g é a aceleração da gravidade, em m/s², \dot{m} é a vazão mássica, em kg/s, fs são as correntes de processo (*flowing streams*), \dot{Q} é a taxa de transferência de calor, em W, T_σ é a temperatura absoluta da vizinhança, em K e S é a entropia mássica, em J/(kg K).

Por diferença, conforme a Equação 2.2:

$$\dot{I} = T_\sigma \Delta(S \dot{m})_{fs} - \dot{Q} \quad (2.5)$$

Para o caso de uma temperatura da vizinhança única, como é o caso da temperatura ambiente, T_0 , o balanço de entropia no estado estacionário, ou seja, a Equação 2.6, se torna a Equação 2.7:

$$\Delta(\dot{S} m)_{fs} - \sum_j \frac{\dot{Q}_j}{T_{\sigma,j}} = \dot{S}_G \geq 0 \quad (2.6)$$

$$\dot{S}_G = \Delta(S \dot{m})_{fs} - \frac{\dot{Q}}{T_0} \quad (2.7)$$

em que \dot{S} é a taxa de entropia, em W/(kg K), m é a massa, em kg, \dot{S}_G é a taxa de geração de entropia, em W/K, e T_0 é a temperatura ambiente, em K.

A multiplicação por T_0 fornece:

$$T_0 \dot{S}_G = T_0 \Delta(S \dot{m})_{fs} - \dot{Q} \quad (2.8)$$

Os lados direitos das Equações 2.5 e 2.8 são idênticos. Logo:

$$\dot{I} = T_0 \dot{S}_G \quad (2.9)$$

Como consequência da Segunda Lei da Termodinâmica, $\dot{S}_G \geq 0$, o que implica que $\dot{I} \geq 0$. Quando um processo é completamente reversível, a igualdade se aplica, e $\dot{I} = 0$. Para processos irreversíveis a desigualdade se aplica, e \dot{I} , isto é, a energia indisponível para trabalho, é positiva. Do ponto de vista da engenharia, o que se

pode extrair de tal resultado é que quanto maior a irreversibilidade de um processo, maior a taxa de geração de entropia e maior a quantidade de energia que se torna indisponível para trabalho. Portanto, minimizar a produção de entropia é essencial para a conservação dos recursos naturais [19].

2.3 Balanço de Exergia e Análise Exergética

Diferente do balanço de energia, o qual é deduzido diretamente a partir da Primeira Lei da Termodinâmica, o balanço de exergia é deduzido a partir da Primeira e da Segunda Leis da Termodinâmica. Assim, de modo a permitir a avaliação das perdas internas e externas devido aos balanços de exergia, primeiramente correntes de perdas devem ser distinguidas das correntes úteis.

2.3.1 Correntes de Perdas e Correntes Úteis

O sistema genérico ilustrado na Figura 2.1 pode representar uma única operação unitária, um fluxograma global ou mesmo parte de um fluxograma. Em tal sistema, as entradas materiais, de calor e de energia são convertidas em correntes de saída por operações térmicas e químicas. Neste sistema, algumas correntes materiais e de calor não são úteis e podem ser consideradas correntes de perdas (tais como resíduos que precisam ser reciclados). Os balanços de energia e exergia não consideram estas correntes de perdas do mesmo modo [3].

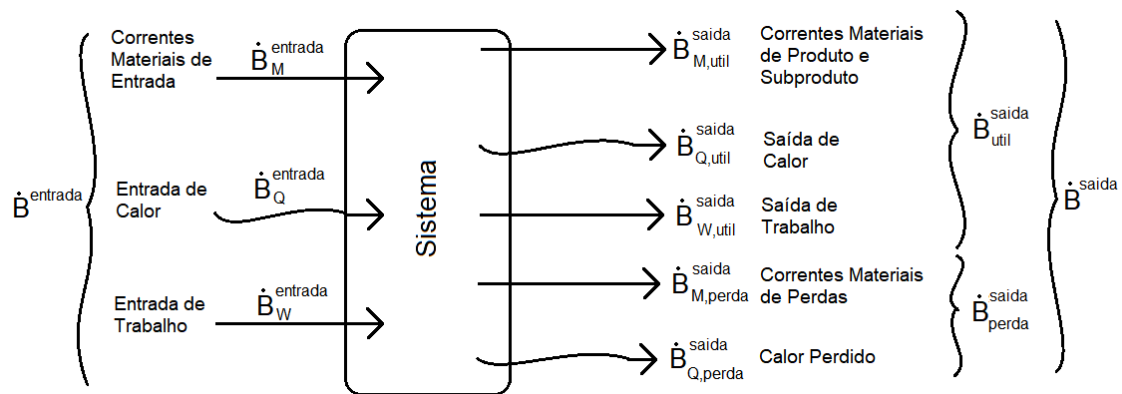


Figura 2.1: Representação geral de um processo ou sistema (adaptado de GHANNADZADEH *et al.* [3]).

Na Figura 2.1, \dot{B} é a exergia, em W. Em relação aos sobrescritos, *entrada* denota as correntes na entrada, enquanto *saída* denota as correntes na saída. Quanto aos subscritos, M , Q e W representam as correntes materiais, de calor e de trabalho, respectivamente, enquanto *util* e *perda* dizem respeito às correntes úteis e às correntes de perdas, respectivamente. Vale destacar que os símbolos, sobrescritos e

subscritos definidos neste ponto se aplicam a todas as equações ao longo da presente seção.

Conforme demonstrado na Equação 2.10, para balanços de energia deduzidos a partir da Primeira Lei da Termodinâmica, correntes de perdas e correntes úteis não precisam ser distinguidas:

$$\dot{H}_M^{entrada} + \dot{Q}^{entrada} + \dot{W}^{entrada} = \dot{H}_M^{saida} + \dot{Q}^{saida} + \dot{W}^{saida} \quad (2.10)$$

em que \dot{H} é a taxa de entalpia, em W, \dot{Q} é a taxa de transferência de calor, em W, e \dot{W} é a potência, em W.

Da mesma forma, para escrever o balanço de exergia, as quantidades totais de exergia na entrada e na saída equivalem à soma das exergias na entrada e na saída associadas à matéria, calor e trabalho:

$$\dot{B}^{entrada} = \sum_{i=1}^N \dot{B}_{M,i}^{entrada} + \sum_{i=1}^N \dot{B}_{Q,i}^{entrada} + \sum_{i=1}^N \dot{B}_{W,i}^{entrada} \quad (2.11)$$

$$\dot{B}^{saida} = \sum_{i=1}^N \dot{B}_{M,i}^{saida} + \sum_{i=1}^N \dot{B}_{Q,i}^{saida} + \sum_{i=1}^N \dot{B}_{W,i}^{saida} \quad (2.12)$$

Nas Equações 2.11 e 2.12, os somatórios de 1 até N correspondem às somas das exergias de um dado tipo na entrada ou na saída. Por exemplo, o primeiro somatório da Equação 2.11 diz respeito à soma das exergias de todas as correntes materiais na entrada, da primeira ($i = 1$) até a última ($i = N$).

Ao contrário do balanço de energia, o balanço de exergia estima a eficiência exérgica do processo classificando as correntes de saída em úteis ou de perdas. Como consequência, a exergia de correntes de calor e materiais deve ser expressa conforme segue:

$$\dot{B}_M^{saida} = \dot{B}_{M,util}^{saida} + \dot{B}_{M,perda}^{saida} \quad (2.13)$$

$$\dot{B}_Q^{saida} = \dot{B}_{Q,util}^{saida} + \dot{B}_{Q,perda}^{saida} \quad (2.14)$$

Além disso, como todo o trabalho na saída é considerado útil, é possível escrever:

$$\dot{B}_{W,perda}^{saida} = 0 \quad (2.15)$$

$$\dot{B}_{perda}^{saida} = \sum_{i=1}^N \dot{B}_{M,perda,i}^{saida} \quad (2.16)$$

Como consequência, o fluxo de exergia na saída total pode ser expresso conforme segue:

$$\dot{B}_{util}^{saida} = \sum_{i=1}^N \dot{B}_{M,util,i}^{saida} + \sum_{i=1}^N \dot{B}_{Q,util,i}^{saida} + \sum_{i=1}^N \dot{B}_{W,i}^{saida} \quad (2.17)$$

Utilizando os conceitos de correntes úteis e correntes de perdas, o balanço de exergia pode ser escrito. Entretanto, ao contrário do balanço de energia, um outro termo correspondente à exergia destruída no sistema (devido à irreversibilidade do processo) deve ser introduzido nos termos de saída [20]. Deste modo, têm-se:

$$\dot{B}^{entrada} = \dot{B}_{util}^{saida} + \dot{B}_{perda}^{saida} + \dot{I} \quad (2.18)$$

em que o termo \dot{B}_{perda}^{saida} corresponde à perda de exergia externa, em W, e \dot{I} representa a perda de exergia interna, ou seja, a irreversibilidade, em W.

Finalmente, o balanço exergético resultante pode ser escrito conforme segue:

$$\sum_{i=1}^N \dot{B}_{M,i}^{entrada} + \sum_{i=1}^N \dot{B}_{Q,i}^{entrada} + \sum_{i=1}^N \dot{B}_{W,i}^{entrada} = \sum_{i=1}^N \dot{B}_{M,util,i}^{saida} + \sum_{i=1}^N \dot{B}_{Q,util,i}^{saida} + \sum_{i=1}^N \dot{B}_{W,i}^{saida} + \sum_{i=1}^N \dot{B}_{M,perda,i}^{saida} + \dot{I} \quad (2.19)$$

A Segunda Lei da Termodinâmica complementa e reforça o balanço energético por permitir a avaliação tanto do valor termodinâmico de um portador de energia quanto das reais ineficiências termodinâmicas e perdas de processos ou sistemas.

2.3.2 Perdas de Exergia Internas e Perdas de Exergia Externas

As perdas de exergia podem ser divididas em internas e externas. As perdas internas (também conhecidas como irreversibilidade ou, ainda, destruição de exergia) estão atreladas com as partes internas do sistema, aparecendo dentro do volume de controle do sistema e podendo ser facilmente calculadas através da Equação 2.9. Já as perdas externas resultam do descarte de resíduos do processo no meio ambiente. A exergia dos resíduos é destruída no meio ambiente. Por este motivo, a perda de exergia externa equivale à exergia dos resíduos considerados. O cálculo das perdas de exergia externas através da Equação 2.9 é difícil, sendo mais fácil determiná-las através da exergia dos resíduos. As perdas de exergia externas indicam que as causas primárias das perdas de exergia frequentemente ocorrem longe do local em que a perda de exergia aparece. Pode ser difícil decidir qual é a causa primária

de uma perda de exergia. Por exemplo, a perda de exergia externa que ocorre quando gases de combustão escoam para fora de uma caldeira pode ser interpretada como resultado de fenômenos irreversíveis dentro da caldeira ou como resultado da ausência de seu uso [11].

As perdas de exergia internas podem ainda ser divididas em técnicas ou estruturais. As perdas de exergia técnicas resultam da imperfeição técnica de partes da instalação, e podem ser minimizadas através de melhoria da performance dos componentes relevantes. Já as perdas de exergia estruturais não podem ser minimizadas de forma significativa sem a mudança da estrutura ou princípio do processo. Por exemplo, se as capacidades caloríficas das correntes de processo em um trocador de calor diferem umas das outras, a diferença de temperatura entre tais correntes difere em cada seção transversal do trocador e não pode ser eliminada mesmo que uma área de troca térmica infinita seja utilizada.

A principal tarefa da análise exergética é detectar e quantificar as causas das imperfeições termodinâmicas. Tais causas são caracterizadas por perdas de exergia conectadas.

2.3.3 Eficiência Exergética

Para realizar uma análise exergética efetiva, é essencial definir indicadores capazes de medir a performance exergética de um processo e identificar as operações unitárias que necessitam ser melhoradas. Na literatura, diversas formulações foram propostas para a eficiência exergética. A eficiência simples corresponde simplesmente à razão entre todas as entradas de exergia e todas as saídas de exergia [21].

$$\eta = \frac{\dot{B}^{saida}}{\dot{B}^{entrada}} = 1 - \frac{\dot{I}}{\dot{B}^{entrada}} \quad (2.20)$$

Na Equação 2.20, η é a eficiência exergética, adimensional.

Apesar de ser fácil de ser calculada, a eficiência exergética simples não fornece uma visão clara nos casos em que uma quantidade significativa de resíduo (ou seja, perda de exergia externa) é produzida. Assim, têm-se também a eficiência racional, a qual corresponde à razão entre a saída de exergia desejada e a exergia utilizada. Ela é rigorosa o suficiente para avaliar a performance das operações unitárias mais utilizadas se seu objetivo for definido com precisão e se os diferentes componentes da exergia das correntes materiais (por exemplo, químico, térmico e mecânico) forem conhecidos [3].

$$\Psi = \frac{\text{Efeito Exergético Desejado}}{\text{Exergia Utilizada}} = \frac{\Delta \dot{B}_{saida\ desejada}}{\Delta \dot{B}_{utilizada}} \quad (2.21)$$

Na Equação 2.21, Ψ é a eficiência racional, adimensional. Além disso, $\Delta\dot{B}_{saida\ desejada}$ é determinada examinando a função do sistema, sem incluir a perda de exergia externa. Tal termo representa o resultado desejado produzido no sistema. Já $\Delta\dot{B}_{utilizada}$ representa os recursos líquidos que foram utilizados para gerar o produto. A maior dificuldade neste tipo de eficiência é a avaliação de $\Delta\dot{B}_{utilizada}$ e $\Delta\dot{B}_{saida\ desejada}$. Ao contrário da eficiência simples, é necessário definir precisamente o objetivo da operação. Algumas vezes é possível definir tal objetivo de diferentes formas para uma mesma operação unitária.

2.4 Cálculo da Exergia

O cálculo da exergia no simulador de processos Aspen HYSYS se divide no cálculo para correntes materiais e para correntes de energia, uma vez que estas são as duas classificações de correntes existentes no simulador. Assim, o cálculo para correntes materiais ainda subdivide-se no cálculo da exergia física e da exergia química. Por fim, a exergia química pode ser decomposta nas contribuições de mistura e de reação, conforme pode ser verificado na Figura 2.2:

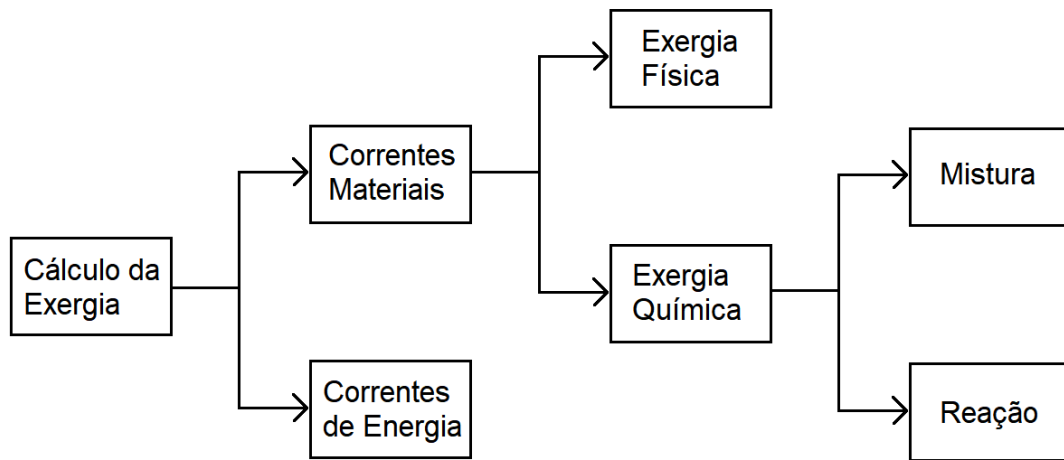


Figura 2.2: Fluxograma do cálculo da exergia.

No caso das correntes materiais, além das componentes física e química da exergia, há também as componentes potencial e cinética. Porém, para a maioria das aplicações práticas, as componentes potencial e cinética podem ser desprezadas [22].

2.4.1 Correntes Materiais

Em termodinâmica, o estado de referência geralmente adotado em funções de estado é gás ideal a temperatura e pressão ambientes. No entanto, no cálculo da

exergia o estado de referência adotado é o estado denominado de estado morto, sendo este nome utilizado devido à impossibilidade de se produzir trabalho a partir de tal estado de referência [23].

O cálculo da exergia realizado no presente trabalho baseia-se na metodologia proposta por ABDOLLAHI-DEMNEH *et al.* [24], enquanto a referência de estado morto utilizada foi sugerida por SZARGUT *et al.* [23], podendo esta última ser verificada na Tabela 2.1:

Tabela 2.1: Estado morto de referência proposto por SZARGUT *et al.* [23]

Temperatura (T_{00})	298,15 K
Pressão (P_{00})	99.312 Pa
Componente	Pressão parcial [Pa]
N_2	75.780
O_2	20.390
CO_2	33,5
H_2O	2.200
D_2O	0,342
Ar	906
Xe	0,0087
Ne	1,77
Kr	0,097
He	0,485

O estado morto de referência da Tabela 2.1 baseia-se na composição da atmosfera terrestre. Desta forma, o procedimento de cálculo proposto por ABDOLLAHI-DEMNEH *et al.* [24] baseia-se em um método direto, sem *loops* de programação, para o cálculo da exergia de correntes de processo, sendo a implementação realizada em linguagem de programação *Visual Basic* no simulador de processos Aspen HYSYS.

Conforme já pontuado, os principais componentes da exergia em correntes materiais são a exergia física e a exergia química. A exergia física consiste na condução da corrente até as condições de pressão e temperatura do ambiente, mantendo-se a composição constante. Assim, a Equação 2.22 mostra como é realizado o cálculo da exergia física:

$$B_F = H(T_1, P_1, \underline{z}_1) - H(T_0, P_0, \underline{z}_1) - T_0(S(T_1, P_1, \underline{z}_1) - S(T_0, P_0, \underline{z}_1)) \quad (2.22)$$

em que B é a exergia mássica, em J/kg, H é a entalpia mássica, em J/kg, T é a temperatura absoluta, em K, P é a pressão absoluta, em Pa, \underline{z}_i é o vetor de frações molares dos componentes da i -ésima corrente, adimensional, T_0 é a temperatura ambiente, em K, P_0 é a pressão ambiente, em Pa, e S é a entropia mássica, em J/(kg K).

Em relação ao cálculo da exergia química, este consiste em conduzir a corrente até as condições de composição do ambiente, mantendo-se constante a temperatura e a pressão. Assim, o cálculo da exergia química pode ser subdividido em quatro etapas, conforme a seguir:

- Etapa 1: Etapa isotérmica. A corrente passa da pressão ambiente para a pressão de referência do simulador ($P_{0n} = 101.325$ Pa). Condução da condição de mistura para a condição de componentes puros e gás ideal. Assim, a equação da primeira etapa do cálculo da exergia química corresponde à Equação 2.23:

$$B_{Q1} = H(T_0, P_0, \underline{z}_1) - H^{id}(T_0, \underline{z}_1) - T_0 \left(S(T_0, P_0, \underline{z}_1) - S^{id}(T_0, P_{0n}, \underline{z}_1) + \frac{R}{MM(\underline{z}_1)} \sum_{i=1}^n z_i \ln(z_i) \right) \quad (2.23)$$

em que P_{0n} é a pressão de referência do simulador, em Pa, R é a constante dos gases ideais, em J/(kgmol K), MM é a massa molar, em kg/kgmol e z_i é a fração molar do i -ésimo componente, adimensional. Assim:

$$H^{id}(T_0, \underline{z}_1) = \frac{1}{MM(\underline{z}_1)} \sum_{i=1}^n z_i \left(\Delta H_{f,i}^{T_{0n}} + \int_{T_{0n}}^{T_0} C_{p_i}(T) dT \right) \quad (2.24)$$

$$\Delta H_{f,i}^{T_{0n}} + \int_{T_{0n}}^{T_0} C_{p_i}(T) dT = \Delta H_{f,i}^{T_{0n}} + \Psi_i^{id}(T_0) - \Psi_i^{id}(T_{0n}) \quad (2.25)$$

$$\Psi_i^{id}(T) = \int C_{p_i}(T) dT = MM_i(a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3 + e_i T^4 + f_i T^5) \quad (2.26)$$

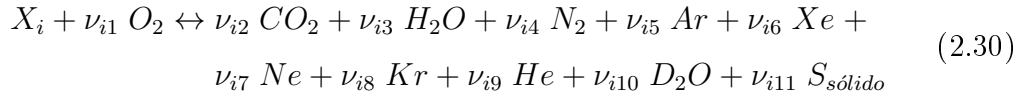
em que $\Delta H_{f,i}^{T_{0n}}$ é a entalpia de formação do i -ésimo componente na temperatura de referência do simulador, em J/kgmol, T_{0n} é a temperatura de referência do simulador, em K, C_{p_i} é a capacidade calorífica molar a pressão constante do i -ésimo componente, em J/(kgmol K), e a , b , c , d , e , f e g são coeficientes da expressão da entalpia de gás ideal, adimensionais. Com isto:

$$S^{id}(T_0, P_{0n}, \underline{z}_1) = \frac{1}{MM(\underline{z}_1)} \sum_{i=1}^n z_i \left(S_i^{id}(T_{0n}, P_{0n}) + \int_{T_{0n}}^{T_0} \frac{C_{p_i}(T)}{T} dT - R \ln(z_i) \right) \quad (2.27)$$

$$S_i^{id}(T_{0n}, P_{0n}) + \int_{T_{0n}}^{T_0} \frac{C_{p_i}(T)}{T} dT = \xi_i^{id}(T_0) \quad (2.28)$$

$$\xi_i^{id}(T) = \int \frac{Cp_i(T)}{T} dT = -R \ln(P_{0n}) + MM_i \left(b_i \ln(T) + 2 c_i T + \frac{3}{2} d_i T_2 + \frac{4}{3} e_i T_3 + \frac{5}{4} f_i T_4 + g_i \right) \quad (2.29)$$

- Etapa 2: Etapa isotérmica e isobárica. Etapa correspondente à reação química. Condução da condição de componentes puros e gás ideal para a condição de componentes de referência puros. Desta forma, a reação química corresponde à Equação 2.30:



em que $\nu_{\gamma,\rho}$ é o coeficiente estequiométrico do γ -ésimo componente na reação ρ , adimensional.

Na Equação 2.30, X_i corresponde a uma substância de não referência, enquanto ν corresponde aos coeficientes estequiométricos da reação. Assim, a equação da segunda etapa do cálculo da exergia química corresponde à Equação 2.31:

$$B_{Q2} = \frac{1}{MM(\underline{z}_1)} \sum_{i=1}^n z_i \sum_{j=1}^{10} \nu_{ij} G_{f,j} \quad (2.31)$$

em que $G_{f,i}$ é a energia de Gibbs molar de formação ideal do i -ésimo componente, em J/kgmol.

- Etapa 3: Etapa isotérmica. Condução da condição de componentes de referência puros para a condição de mistura. A soma das pressões parciais dos componentes da mistura corresponde à pressão do estado morto de referência. Deste modo, a equação da terceira etapa do cálculo da exergia química corresponde à Equação 2.32:

$$B_{Q3} = \frac{1}{MM(\underline{z}_1)} \sum_{i=1}^n z_i \sum_{j=1}^{10} \nu_{ij} R T_0 \ln \left(\frac{P_{0n}}{P_{ref,j}} \right) \quad (2.32)$$

em que $P_{ref,i}$ é a pressão parcial do i -ésimo componente no estado morto de referência, em Pa.

Neste ponto, cabe resaltar que os coeficiente estequiométricos possuem valor negativo para reagentes, e positivo para produtos. Sendo assim, a exceção

para a Equação 2.32 é o enxofre sólido rômboico, cujo cálculo é realizado com base no íon sulfato dissolvido na água do mar, resultando na Equação 2.33:

$$B_{Q3} = \frac{1}{MM(\underline{z}_1)} z_i \nu_{i11} \Delta B_S \quad (2.33)$$

em que:

$$\Delta B_S = 609,6 J/kgmol \quad (2.34)$$

- Etapa 4: Etapa isotérmica, com composições constantes. Corresponde à correção da pressão, a qual passa da pressão do estado morto de referência para a pressão do estado morto real. Desta forma, a equação da quarta etapa do cálculo da exergia química corresponde à Equação 2.35:

$$B_{Q4} = \frac{1}{MM(\underline{z}_1)} \sum_{i=1}^n z_i \sum_{j=1}^{10} \nu_{ij} R T_0 \ln \left(\frac{\sum_{j=1}^{10} P_{ref,j}}{P_0} \right) \quad (2.35)$$

Um fluxograma ilustrativo das etapas do cálculo da exergia química pode ser conferido na Figura 2.3:

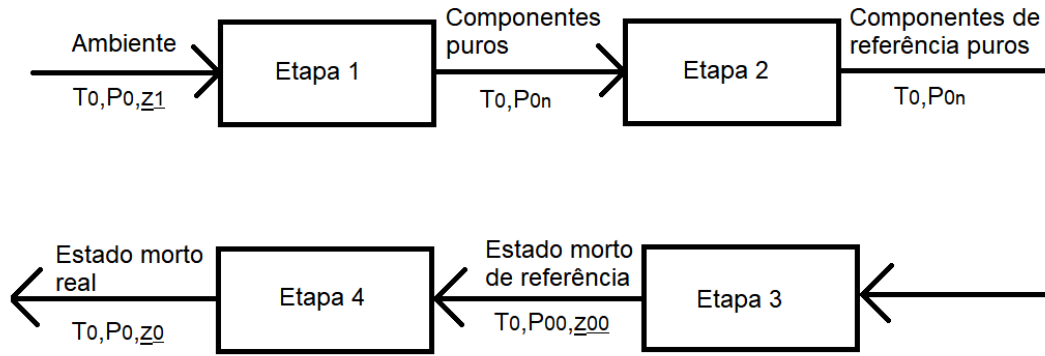


Figura 2.3: Etapas do cálculo da exergia química.

em que P_{00} é a pressão no estado morto de referência, em Pa, \underline{z}_{00} é o vetor de frações molares no estado morto de referência, adimensional, e \underline{z}_0 é o vetor de frações molares no estado morto, adimensional.

Vale ressaltar que a etapa 1 do cálculo da exergia química corresponde à contribuição de mistura, enquanto as etapas 2, 3 e 4 correspondem à contribuição de reação. Com isto, o cálculo completo da exergia, incluindo a exergia física e as quatro etapas do cálculo da exergia química, pode ser representado pela Equação 2.36:

$$\begin{aligned}
B = & H(T_1, P_1, \underline{z}_1) - H(T_0, P_0, \underline{z}_1) - T_0(S(T_1, P_1, \underline{z}_1) - S(T_0, P_0, \underline{z}_1)) + \\
& H(T_0, P_0, \underline{z}_1) - H^{id}(T_0, \underline{z}_1) - \\
& T_0 \left(S(T_0, P_0, \underline{z}_1) - S^{id}(T_0, P_{0n}, \underline{z}_1) + \frac{R}{MM(\underline{z}_1)} \sum_{i=1}^n z_i \ln(z_i) \right) + \\
& \frac{1}{MM(\underline{z}_1)} \sum_{i=1}^n z_i \sum_{j=1}^{10} \nu_{ij} \left(R T_0 \ln \left(\frac{\sum_{j=1}^{10} P_{ref,j}}{P_0} \frac{P_{0n}}{P_{ref,j}} \right) + G_{f,j} + \nu_{i11} \Delta B_S \right)
\end{aligned} \tag{2.36}$$

2.4.2 Correntes de Energia

O cálculo da exergia de correntes de energia é realizado de forma diferente para calor e trabalho, ou seja, para trocadores de calor e máquinas de fluxo, respectivamente. No caso do trabalho, o valor da exergia em unidade de potência corresponde simplesmente à taxa de energia da corrente. Já no caso do calor, a exergia é calculada aplicando uma máquina de Carnot [3]. Para tal, primeiramente calcula-se a temperatura média termodinâmica, com base na fonte quente, conforme a Equação 2.37:

$$\bar{T} = \frac{\int dQ}{\int \frac{dQ}{T}} = \frac{\Delta H}{\Delta S} \tag{2.37}$$

em que \bar{T} é a temperatura média de operação, em K, e Q é o calor, em J.

Após calculada a temperatura média termodinâmica, calcula-se a eficiência de Carnot de acordo com a Equação 2.38:

$$\epsilon = 1 - \frac{T_0}{\bar{T}} = 1 - \frac{T_0 \Delta S}{\Delta H} \tag{2.38}$$

em que ϵ é a eficiência de Carnot, adimensional.

Finalmente, multiplica-se a eficiência de Carnot calculada pelo valor da energia, obtendo-se, assim, a exergia para o caso do calor.

2.5 Pacote Termodinâmico

Com exceção das simulações realizadas na validação do cálculo da exergia apresentada na Seção 4.2, todas as simulações realizadas no Aspen HYSYS utilizaram o pacote termodinâmico *Acid Gas - Chemical Solvents*. Tal pacote é usado no Aspen HYSYS para simular a remoção de gases ácidos tais como sulfito de hidrogênio, dióxido de enxofre, mercaptanas e dióxido de carbono. Durante a seleção do pacote ter-

modinâmico, o simulador automaticamente seleciona o pacote *Acid Gas - Chemical Solvents* caso a lista de componentes inclua um dos seguintes componentes: K_2CO_3 , *DGA*, *DIPA*, *MDEA*, *MEA*, *PZ*, *Sulfolane-DIPA*, *Sulfolane-MDEA*, *TEA*, *DEA* e qualquer combinação das aminas.

O pacote termodinâmico *Acid Gas - Chemical Solvents* é baseado em pesquisa extensiva sobre a simulação do processo de absorção química e modelos termodinâmicos moleculares para soluções de amina aquosas [25]. Tal pacote foi desenvolvido com a equação de estado de Peng-Robinson para a fase vapor e o modelo NRTL eletrolítico para a termodinâmica de eletrólitos [26]. O *Acid Gas - Chemical Solvents* contém os parâmetros do modelo eNRTL e outros parâmetros identificados a partir da regressão de dados de propriedades termodinâmicas e físicas para soluções de amina aquosas [27] [28]. A regressão foi realizada com dados de equilíbrio líquido-vapor e de calor de absorção para todos os solventes de amina envolvidos, os quais são amplamente empregados na indústria. O pacote também leva em consideração a química das soluções de amina aquosas.

Os modelos matemáticos do pacote termodinâmico *Acid Gas - Chemical Solvents* consideram a termodinâmica e a modelagem de processos de gases ácidos (CO_2 e H_2S) removidos pela maioria dos solventes de amina tais como MDEA, MEA ativado, DEA, MEA, DGA e suas combinações. Os contaminantes relacionados, tais como sais, mercaptanas, sulfito de carbonila e dissulfito de carbono também são levados em conta. Além disso, os modelos também consideram a modelagem de gases inertes, componentes de hidrocarbonetos e frações de petróleo (componentes hipotéticos).

Conforme mencionado, o pacote termodinâmico *Acid Gas - Chemical Solvents* utiliza a equação de estado de Peng-Robinson para a fase vapor. Tal equação de estado, a qual é baseada na equação de van der Waals, é aplicada como uma equação de gás ideal com termos de correção para volume e energia [29]. A forma mais comum da equação é:

$$P = \frac{R T}{v - b} - \frac{a(T)}{v(v + b) + b(v - b)} \quad (2.39)$$

em que P é a pressão absoluta, em Pa, T é a temperatura absoluta, em K, v é o volume molar, em $m^3/kgmol$, e R é a constante dos gases ideais, em $J/(kgmol K)$, enquanto que $a(T)$ e b são parâmetros da equação. Tais parâmetros são dados pelas equações a seguir:

$$a(T) = \alpha a(T_c) \quad (2.40)$$

$$\alpha^{1/2} = 1 + k (1 - T_r^{1/2}) \quad (2.41)$$

$$k = 0,37464 + 1,54226 \omega - 0,26992 \omega^2 \quad (2.42)$$

$$a(T_c) = 457.240 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \quad (2.43)$$

$$b = 77,8 \frac{R T_c}{P_c} \quad (2.44)$$

em que T_c é a temperatura crítica, em K, P_c é a pressão crítica, em Pa, e T_r é a temperatura reduzida, adimensional. Já o parâmetro k , adimensional, é definido em termos do fator acêntrico ω , adimensional.

No tocante à termodinâmica de eletrólitos, conforme pontuado anteriormente, o pacote termodinâmico *Acid Gas - Chemical Solvents* utiliza o modelo NRTL eletrolítico, o qual pode ser utilizado em concentrações muito baixas ou elevadas, como também em sistemas solventes aquosos e misturados [30]. Tal modelo utiliza a solução aquosa em diluição infinita como estado de referência para íons. Ele adota a Equação de Born para contabilizar a transformação do estado de referência de íons da solução solvente misturada em diluição infinita para a solução aquosa em diluição infinita [31]. Assim, no modelo NRTL eletrolítico, a energia livre de Gibbs de excesso é calculada conforme segue:

$$\begin{aligned} \frac{G_m^{E,lc}}{R T} = & \sum_B X_B \frac{\sum_j X_j G_{jB} \tau_{jB}}{\sum_k X_k G_{kB}} + \sum_c X_c \sum_{a'} \left(\frac{X_a}{\sum_{a''} X_{a''}} \right) \frac{\sum_j X_j G_{jc,a'c} \tau_{jc,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} + \\ & \sum_a X_a \sum_{c'} \left(\frac{X_{c'}}{\sum_{c''} X_{c''}} \right) \frac{\sum_j X_j G_{ja,c'a} \tau_{ja,c'a}}{\sum_k X_k G_{ka,c'a}} \end{aligned} \quad (2.45)$$

em que j e k podem ser qualquer forma iônica (a, c ou B).

O coeficiente de atividade da molécula é calculado conforme segue:

$$\begin{aligned} \ln \gamma_B^{lc} = & \frac{\sum_j X_j G_{jB} \tau_{jB}}{\sum_k X_k G_{kB}} + \sum_{B'} \frac{X_{B'} G_{BB'}}{\sum_k X_k G_{kB'}} \left(\tau_{BB'} - \frac{\sum_k X_k G_{kB'} \tau_{kB'}}{\sum_k X_k G_{kB'}} \right) + \\ & \sum_c \sum_{a'} \frac{X_a}{\sum_{a''} X_{a''}} \frac{X_c G_{Bc,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} \left(\tau_{Bc,a'c} - \frac{\sum_k X_k G_{kc,a'c} \tau_{kc,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} \right) + \\ & \sum_{a'} \sum_c \frac{X_{c'}}{\sum_{c''} X_{c''}} \frac{X_a G_{Ba,c'a}}{\sum_k X_k G_{ka,c'a}} \left(\tau_{Bc,c'a} - \frac{\sum_k X_k G_{ka,c'a} \tau_{ka,c'a}}{\sum_k X_k G_{ka,c'a}} \right) \end{aligned} \quad (2.46)$$

O coeficiente de atividade dos cátions é calculado conforme segue:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{z_c} \ln \gamma_c^{lc} &= \sum_{a'} \left(\frac{X_{a'}}{\sum_{a''} X_{a''}} \right) \frac{\sum_k X_k G_{kc,a'c} \tau_{kc,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} + \\
&\sum_{B'} \frac{X_B G_{cB}}{\sum_k X_k G_{kB}} \left(\tau_{cB} - \frac{\sum_k X_k G_{kB} \tau_{kB}}{\sum_k X_k G_{kB}} \right) + \\
&\sum_a \sum_{c'} \left(\frac{X_{c'}}{\sum_{c''} X_{c''}} \right) \frac{X_a G_{ca,c'a}}{\sum_k X_k G_{ka,c'a}} \left(\tau_{ca,c'a} - \frac{\sum_k X_k G_{ka,c'a} \tau_{ka,c'a}}{\sum_k X_k G_{ka,c'a}} \right)
\end{aligned} \tag{2.47}$$

O coeficiente de atividade dos ânions é calculado conforme segue:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{z_a} \ln \gamma_a^{lc} &= \sum_{c'} \left(\frac{X_{c'}}{\sum_{c''} X_{c''}} \right) \frac{\sum_k X_k G_{ka,c'a} \tau_{ka,c'a}}{\sum_k X_k G_{ka,c'a}} + \\
&\sum_B \frac{X_B G_{aB}}{\sum_k X_k G_{kB}} \left(\tau_{aB} - \frac{\sum_k X_k G_{kB} \tau_{kB}}{\sum_k X_k G_{kB}} \right) + \\
&\sum_c \sum_{a'} \left(\frac{X_{a'}}{\sum_{a''} X_{a''}} \right) \frac{X_c G_{ac,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} \left(\tau_{ac,a'c} - \frac{\sum_k X_k G_{kc,a'c} \tau_{kc,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} \right)
\end{aligned} \tag{2.48}$$

em que:

$$G_{cB} = \frac{\sum_a X_a G_{ca,B}}{\sum_{a'} X_{a'}} \tag{2.49}$$

$$G_{aB} = \frac{\sum_c X_c G_{ca,B}}{\sum_{c'} X_{c'}} \tag{2.50}$$

$$\alpha_{Bc} = \alpha_{cB} = \frac{\sum_a X_a G_{B,ca}}{\sum_{a'} X_{a'}} \tag{2.51}$$

$$\alpha_{Ba} = \alpha_{aB} = \frac{\sum_c X_c G_{B,ca}}{\sum_{c'} X_{c'}} \tag{2.52}$$

$$\tau_{cB} = -\frac{\ln G_{cB}}{\alpha_{cB}} \tag{2.53}$$

$$\tau_{aB} = -\frac{\ln G_{aB}}{\alpha_{cB}} \tag{2.54}$$

$$\tau_{Ba,ca} = \tau_{aB} - \tau_{ca,B} + \tau_{B,ca} \tag{2.55}$$

$$\tau_{Bc,ac} = \tau_{cB} - \tau_{ca,B} + \tau_{B,ca} \tag{2.56}$$

Cada tipo de parâmetro do modelo NRTL eletrolítico consiste tanto no fator de não-aleatoriedade (α) quanto nos parâmetros de energia (τ). Os parâmetros do modelo NRTL eletrolítico possuem algumas relações de dependência com a temperatura. Dentre tais relações, há os parâmetros binários molécula-molécula apresentados a seguir:

$$\tau_{ij} = A_{ij} + \frac{B_{ij}}{T} + F_{ij} \ln(T) + G_{ij} T \quad (2.57)$$

$$\alpha_{ij} = C_{ij} + D_{ij}(T - 273,15) \quad (2.58)$$

Outras relações de dependência com a temperatura dizem respeito aos parâmetros do par eletrólito-molécula, apresentados a seguir:

$$\tau_{ca,B} = C_{ca,B} + \frac{D_{ca,B}}{T} + E_{ca,B} \left[\frac{T^{ref} - T}{T} + \ln \left(\frac{T}{T^{ref}} \right) \right] \quad (2.59)$$

$$\tau_{B,ca} = C_{B,ca} + \frac{D_{B,ca}}{T} + E_{B,ca} \left[\frac{T^{ref} - T}{T} + \ln \left(\frac{T}{T^{ref}} \right) \right] \quad (2.60)$$

Para os parâmetros do par eletrólito-eletrólito, os eletrólitos devem compartilhar um cátion ou um ânion em comum:

$$\tau_{c'a,c''a} = C_{c'a,c''a} + \frac{D_{c'a,c''a}}{T} + E_{c'a,c''a} \left[\frac{T^{ref} - T}{T} + \ln \left(\frac{T}{T^{ref}} \right) \right] \quad (2.61)$$

$$\tau_{ca',ca''} = C_{ca',ca''} + \frac{D_{ca',ca''}}{T} + E_{ca',ca''} \left[\frac{T^{ref} - T}{T} + \ln \left(\frac{T}{T^{ref}} \right) \right] \quad (2.62)$$

em que T^{ref} equivale a 298,15 K.

A_{ij} e B_{ij} são assimétricos, o que significa dizer, por exemplo, que A_{ij} pode não ser equivalente a A_{ji} . Os parâmetros binários A_{ij} , B_{ij} e C_{ij} podem ser determinados a partir de regressão de dados de equilíbrio líquido-vapor ou líquido-líquido. Tipicamente, valores recomendados de C_{ij} para diferentes tipos de misturas são 0,3, 0,2 ou 0,47.

Capítulo 3

Revisão Bibliográfica

Há diversos trabalhos na literatura que abordam o cálculo da exergia. ABDOLLAHI-DEMNEH *et al.* [24] propuseram um método direto para cálculo das exergias química e física de correntes materiais. Além disso, o procedimento proposto para cálculo da exergia foi implementado no HYSYS, utilizando quinze variáveis do usuário principais para correntes materiais. Códigos em linguagem de programação Visual Basic necessários ao funcionamento de cada variável do usuário também foram apresentados no texto.

GHANNADZADEH *et al.* [3] apresentaram uma metodologia geral para balanço exergético em processos químicos e térmicos integrados no *software* ProSimPlus. No artigo, além do uso de expressões gerais para correntes de calor e trabalho, todo o balanço exergético é apresentado em um único *software* de modo a automatizar por completo a análise exergética. Além disso, após o balanço exergético, elementos essenciais tais como fontes de irreversibilidade em análises exergéticas são apresentados para auxiliar o usuário em modificações tanto de sistemas de processo quanto de utilidades.

FERRARA *et al.* [4] desenvolveram uma análise exergética de um processo de captura de CO_2 utilizando absorção química. Um modelo de fluxograma foi construído para a absorção química com MEA como solvente, utilizando o simulador de processos Aspen Plus para uma planta termelétrica a base de carvão com uma taxa de captura de 90%. Os resultados mostraram que as maiores irreversibilidades ocorreram nas unidades relacionadas à captura química de CO_2 (77% do total) e no compressor de CO_2 (9% do total). Um melhoramento na planta reduziu o custo unitário da captura de CO_2 .

GEUZEBROEK *et al.* [32] conduziram uma análise exergética em um processo de captura de CO_2 baseado na tecnologia de absorção com monoetanolamina (MEA). É mostrado que com uma combinação do Aspen Plus e do ExerCom, é possível conseguir um resultado razoável para a destruição de exergia por operação unitária. Para permitir isto, algumas modificações foram realizadas na termodinâmica da

reação do CO_2 com MEA. Em tal reação, espécies iônicas são formadas e uma abordagem permitindo o uso de eletrólitos é necessária. Os resultados mostraram que as maiores fontes de destruição de exergia são a absorvedora, o tanque de *flash* e o soprador de gás de combustão.

AMROLLAHI *et al.* [33] analisaram e compararam diversas configurações do processo de captura de CO_2 por absorção química de acordo com suas destruições de exergia associadas. A demanda de trabalho total foi reduzida de 1,39 MJ/kg de CO_2 na configuração do processo de absorção química utilizada como caso base para 1,23 MJ/kg de CO_2 na configuração do processo de absorção química modificada correspondente à recompressão de vapor regenerado com interresfriamento da absorvedora (melhor caso). Considerando a demanda de trabalho mínima de processos de separação, a eficiência exergética de plantas de captura e compressão foi aumentada de 31,6% no processo de absorção química utilizado como caso base para 35,6% no melhor caso. Respectivamente, irreversibilidades foram reduzidas de 1,6 MJ/kg de CO_2 no caso base para 1,29 MJ/kg de CO_2 no caso com interresfriamento da absorvedora e recompressão de vapor regenerado. A eficiência racional da planta termelétrica a base de gás natural com captura e compressão de CO_2 mostrou um aumento de 48,5% na configuração do processo de absorção química utilizada como caso base para 49,5% no melhor caso.

YU *et al.* [6] propuseram, com base na integração energética, um processo acoplado, o qual incluiu absorção com MEA de CO_2 e SO_2 , e a recuperação de calor da unidade de recuperação de calor perdido do gás de combustão e da unidade de resfriamento interestágio do compressor. Comparando o processo modificado com o original, 9% da energia térmica pôde ser reduzida no novo fluxograma. Enquanto isso, a descarbonização e a dessulfurização puderam ser realizadas simultaneamente na absorvedora sem o sistema de dessulfurização de gás de combustão usual. Um modelo de análise exergética foi estabelecido e validado a partir de dados da literatura com um desvio inferior a 5,4%. Os resultados de exergia indicaram que a destruição de exergia do processo modificado foi entre 15,48 e 20,75% inferior à do original, o que provou que o processo modificado era razoável e efetivo da perspectiva do uso de energia.

WANG *et al.* [34] estudaram a recuperação de CO_2 a partir dos processos de absorção com monoetanolamina (MEA) e carbonato de potássio quente (K_2CO_3) em uma planta termelétrica com o propósito de desenvolver uma tecnologia de controle de gases do efeito estufa. Com base na análise energética e exergética de ambos os sistemas, opções de melhoramento foram fornecidas de modo a reduzir o consumo energético na separação de CO_2 . Nas opções de melhoramento, o consumo energético da separação de CO_2 é reduzido em torno de 32%. Como resultado, a eficiência térmica do sistema foi aumentada em 2,15 pontos percentuais no sistema de absorção

com MEA, e em 1,56 pontos percentuais no sistema de absorção com K_2CO_3 .

ROCHELLE *et al.* [35] apresentaram um novo processo que utiliza piperazina 8m (40% em massa) com regeneração a 150°C em um *flash* de dois estágios. É mencionado que os dados de performance do sistema da piperazina não possuem proprietário e estão disponíveis para comparação. Assim sendo, a demanda energética esperada para a piperazina ou outros processos de separação por amina é de 220 kWh/tonelada de CO_2 removida. O trabalho mínimo desta separação é de 113 kWh/tonelada. As maiores destruições de exergia (kWh/tonelada de CO_2) no processo da piperazina são: condensador, 34; trocador de calor, 25; compressor, 22; absorvedora, 14. Devido ao fato de a compressão mecânica adiabática possuir uma eficiência termodinâmica geral entre 55 e 60%, a separação por amina com regeneração de balanço térmico fornece melhor performance energética com maior calor de absorção de CO_2 e máxima temperatura de regeneração. A piperazina pode ser utilizada em uma temperatura de 150°C sem degradação térmica significativa. Isto permite melhor performance energética e minimiza os impactos dos produtos de degradação. O solvente de piperazina é resistente à degradação oxidativa, possui volatilidade inferior à do MEA e não corrói aço inoxidável. Também é adequado para recuperação por destilação e outros métodos já comercializados pela indústria de tratamento de gases.

VALENTI *et al.* [36] acoplaram um modelo aproximado do sistema CO_2 - H_2O - NH_3 com um processo proposto para avaliar as vazões mássica, energética e de entropia. Para cada kg de CO_2 capturado, a simulação fornece uma extração de vapor de 0,59 kg, equivalente a um excesso de carga térmica de 1,5 MJ e uma perda de geração de aproximadamente 0,1 kWh, um consumo auxiliar de 0,1 kWh e uma diferença de quase 0,18 kWh com relação ao caso ideal. Assumindo um custo da eletricidade de 7 c€/kWh, a operação do sistema de captura totaliza 14 €/tonelada de CO_2 .

ZHANG *et al.* [37] analisaram o mecanismo e potencial de poupar energia no processo de captura de CO_2 por meio da absorção química, e dois métodos de recuperação de calor perdido no processo de captura de CO_2 foram propostos, como um esforço para minimizar a perda de eficiência devido à captura de CO_2 em plantas termelétricas a base de carvão. Um modelo termodinâmico do processo de captura de CO_2 foi desenvolvido, através do qual as distribuições da destruição de exergia foram analisadas e o potencial evitável de destruição de exergia foi quantificado. A otimização de parâmetros e a recuperação de calor perdido no processo de captura de CO_2 indicaram possuir significativo potencial para poupar energia. No caso da recuperação de calor perdido, dois métodos foram propostos: introdução de um ciclo de potência orgânico e compressão de uma corrente para preaquecimento de água e geração de vapor. Simulações utilizando Aspen Plus demonstraram que o consumo

de trabalho equivalente foi reduzido em 9,32% com o primeiro método e em 8,71% com o segundo método em comparação ao caso base. As perdas de eficiência para o primeiro método e para o segundo método na planta termelétrica a base de carvão foram de 9,39% e 9,45%, respectivamente, 0,97% e 0,91% inferiores àquele do caso base. Quando considerou-se o efeito da condensação do vapor nas características do escoamento na turbina, as perdas de eficiência foram de 10,57% com o primeiro método e de 10,28% com o segundo, os quais são, respectivamente, 0,97% e 1,26% inferiores àquele do caso base. A recuperação de calor perdido indicou possuir um papel fundamental na redução do consumo energético adicional devido à captura de CO_2 , e os métodos propostos forneceram efetivos meios de recuperação de calor para plantas termelétricas a base de carvão com captura de CO_2 .

FEYZI e BEHESHTI [38] aplicaram o método da análise exérgica para avaliar a performance da coluna de destilação reativa no processo de produção de ácido acético, no qual ácido acético é produzido através da reação entre monóxido de carbono e metanol com um sistema catalisador solúvel composto de complexo de ródio (catalisador) e iodeto de metila-iodeto de hidrogênio (promotor). Em tal coluna, a pureza desejada do produto é obtida através da reação entre metanol e iodeto de hidrogênio. Os efeitos de diferentes parâmetros operacionais na separação e nas eficiências exérgicas da coluna foram avaliados através de análise de sensibilidade, e finalmente o método da superfície de resposta foi aplicado para modelagem e minimização da destruição de exergia. A adequação do modelo desenvolvido para as destruições de exergia na coluna de destilação reativa foi avaliada utilizando análises de variância. O resultado do estudo da análise de variância demonstrou que os parâmetros operacionais mais efetivos são a temperatura da carga, a razão de *boilup* e a razão de refluxo. Como resultado desta otimização, as destruições de exergia e o consumo energético da coluna de destilação reativa foram reduzidos em 28% e 12%, respectivamente. Tal estudo mostrou que o método da superfície de resposta somado ao conceito de exergia poderia ser uma ferramenta apropriada para a otimização de sistemas de destilação reativa complexos e intensivos em energia.

EBRAHIMI *et al.* [39] desenvolveram uma estrutura integrada inovadora para a cogeração de biometano e dióxido de carbono líquido por biogás não-refinado e fumaça de escapamento de plantas termelétricas. O processo de biogás criogênico e o ciclo de captura de CO_2 são utilizados para o tratamento de biogás não-refinado e da fumaça de escapamento das plantas termelétricas, respectivamente. O processo de refrigeração baseado em absorção-compressão e as unidades de geração de energia baseadas no ciclo Rankine/Kalina utilizando energia geotérmica são utilizados para fornecer refrigeração e energia. O processo integrado em questão gera 0,8434 kg/s de biometano e 2,631 kg/s de CO_2 líquido através do recebimento de 2,368 kg/s de biogás não-tratado, 21,32 kg/s de gás de combustão, e 7.922 kW de carga térmica

advinda de energia geotérmica. As eficiências térmica e exergética total do sistema híbrido atingiram 59,94% e 73,1%, respectivamente. A análise exergética aponta que os trocadores de calor (4.043 kW) e as colunas de destilação (1.857 kW) possuem as maiores destruições de exergia, representando 39,12% do total. A avaliação econômica ilustra que o período de retorno e o custo primário do produto são equivalentes a 4,45 anos e 0,8189 $US\$/m^3$ de biometano, respectivamente. A análise de sensibilidade ilustra que a eficiência térmica total aumenta por volta de 72,5% e a carga térmica proveniente de energia geotérmica é reduzida para 7.808 kW com o aumento da composição do metano no biogás não-tratado de 0,55 para 0,75, em base molar. O período de retorno aumenta para em torno de 2,235 anos e o benefício anual líquido diminui para 16,73 MMUS\$/ano quando o custo do biometano diminui de 2,5 $US\$/m^3$ para 0,5 $US\$/m^3$.

ESMAEILI e MEHRPOOYA [40] modelaram um sistema condicionador de energia baseado em tiristor, o qual utiliza um conversor de seis pulsos, para um sistema de armazenamento de energia magnético supercondutor. O foco principal da pesquisa é a geração de hélio necessário para o armazenamento de energia magnético supercondutor porque, para que a bobina seja submetida à temperatura supercondutora, ela precisa sempre estar imersa em hélio líquido. Na simulação conduzida, o sistema de produção de hélio forneceu certa quantidade de hélio, em que primeiramente a temperatura do hélio gasoso foi reduzida em trocadores de calor internos e então, após a súbita queda de pressão, o gás se tornou líquido. O efeito dos vários ângulos de queima foi investigado, e descobriu-se que em ângulos inferiores a 90° , em um ângulo específico, a corrente de saída se intensifica com o tempo. Em um ângulo de 90° , tal corrente permanece constante, e em ângulos superiores a 90° , a corrente de saída diminui com o tempo. A porcentagem de fluxos que entram nos expansores é investigada para encontrar a máxima taxa de produção de hélio líquido em relação ao hélio gasoso. A taxa desviada de vazão mássica via expensor 1 e expensor 2 foi de 0,46 e 0,35, respectivamente. O uso de trabalho do sistema da rede, e a produção de hélio líquido foram de 67,18 MW e 12,7 kg/h. Além disso, a análise exergética foi realizada e os resultados demonstraram 35,7% de eficiência exergética. A eficiência da produção de hélio possui uma relação direta com a vazão mássica de nitrogênio líquido. Entretanto, devido à elevada quantidade de energia demandada para se produzir nitrogênio líquido, com incremento na taxa da vazão mássica, a eficiência total do sistema foi reduzida. Os resultados foram avaliados com Aspen HYSYS, Aspen Energy Analyser e MATLAB. O trabalho específico obtido da análise foi de 290,097 (kW s)/kg, o que indica um menor consumo de energia em comparação com os outros métodos de produção de hélio, resultando em economia de energia e menores custos com eletricidade.

HAJIALIGOL *et al.* [41] investigaram diferentes configurações de ciclos de Rankine orgânicos combinados com um ciclo de Brayton através da realização de análises termodinâmica, exergética e exergoeconômica. A energia térmica do ciclo é produzida por meio da queima de metano gasoso gerado via gaseificação de biomassa. Uma análise sistemática de tais configurações é conduzida de modo a aumentar a eficiência exergética dos ciclos. Além disso, o reuso da energia térmica que seria desperdiçada no ciclo de Brayton contribui para um aumento significativo na eficiência térmica global do ciclo combinado. Uma faixa de fluidos de trabalho, sendo eles m-xileno, o-xileno, p-xileno, tolueno, e etilbenzeno, foram analisados para o ciclo de Rankine orgânico. Previsões utilizando uma rede neural artificial (função base radial) também foram realizadas. Os resultados indicam que o p-xileno aumenta a eficiência exergética mais do que os demais fluidos de trabalho. Adicionalmente, o ciclo de Rankine orgânico melhorado mitiga a destruição de exergia em 10%. Apesar de a aplicação de evaporadores de *flash* duplos melhorar a eficiência exergética em 3%, ela eleva o custo unitário da energia gerada em mais de 10%. Pouco investigou-se a respeito da aplicação de um modelo baseado em dados para prever várias configurações do ciclo de Rankine orgânico combinado com um ciclo de Brayton alimentado por biomassa.

Finalmente, SEZER e ÖZVEREN [42] aplicaram um modelo de rede neural artificial (ANN), na forma de um método de *machine learning*, para investigar o valor da exergia de gás de síntese, em que o conteúdo de hidrogênio no gás de síntese atingiu um máximo na gaseificadora de leito fluidizado de bolhas, sendo o desenvolvimento no Aspen Plus e a validação com dados experimentais da literatura. O algoritmo de Levenberg-Marquardt foi utilizado para treinar o modelo de ANN, no qual os conteúdos de oxigênio, hidrogênio e carbono foram selecionados como parâmetros de entrada do modelo. Além disso, quatro diferentes amostras de biomassa, as quais não haviam sido utilizadas no treinamento e teste, foram usadas para criar uma segunda validação. A fração molar de hidrogênio do gás de síntese também foi avaliada em diferentes razões vapor/combustível e também estimou-se, com baixo valor de erro relativo, a temperatura de gaseificação e o valor da exergia do gás de síntese no ponto no qual o conteúdo de hidrogênio no gás de síntese atingiu um máximo.

Após a análise dos trabalhos presentes na literatura, foi possível constatar que a análise exergética é uma ferramenta bastante aplicada na detecção de pontos de ineficiência em processos, permitindo alterações que os tornem mais eficientes. Observou-se também que tal análise é amplamente empregada no processo de absorção, sendo a absorvedora, a coluna de destilação e os trocadores de calor os equipamentos que geralmente apresentam maiores destruições de exergia. Ainda em relação ao processo de absorção, verificou-se a aplicação da análise exergética

em processos que utilizam outros solventes que não o MEA. Também constatou-se o amplo uso de outras ferramentas além do Aspen HYSYS no cálculo da exergia, como outros simuladores de processos, a exemplo do Aspen Plus, ou mesmo linguagens de programação, tal como o MATLAB. Por fim, observou-se a crescente aplicação de inteligência artificial na análise exergética de processos, sendo esta uma ferramenta cada vez mais utilizada nas mais diversas áreas.

Capítulo 4

Metodologia

No presente capítulo, primeiramente é feito o detalhamento de como foi implementado o cálculo da exergia no simulador de processos Aspen HYSYS. Então, são fornecidas as condições operacionais para a validação do cálculo da exergia implementado no simulador, bem como do consumo de energia no processo de absorção de CO_2 . Após, mostra-se como foi feita a determinação da temperatura média termodinâmica do vapor d'água.

São apresentados alguns indicadores de eficiência a serem testados para as análises exérgicas do processo de absorção de CO_2 , bem como as condições operacionais para a realização de tais testes. Então, são fornecidas as condições operacionais para a aplicação da análise exérgica ao processo de absorção utilizando-se quatro concentrações de CO_2 no gás a ser tratado e variando-se doze variáveis operacionais. Isto foi feito com a finalidade de identificar as variáveis mais convenientes a serem ajustadas no processo, tornando-o mais eficiente.

São disponibilizadas as condições operacionais, assim como as métricas utilizadas, para a realização de uma análise comparativa entre o consumo de energia resultante da captura de CO_2 , através do processo de absorção, na indústria do cimento e diretamente do ar atmosférico. Isto foi feito de modo a verificar se é vantajosa, do ponto de vista energético, a aplicação do processo de absorção para a captura de CO_2 do ar. Por fim, mostra-se como foi feito o estudo de caso para a indústria do cimento, visando um aumento na eficiência de captura de CO_2 e uma redução do consumo de energia e da irreversibilidade no processo.

4.1 Implementação do Cálculo da Exergia

Nas simulações realizadas no Aspen HYSYS, primeiramente implementou-se o cálculo da exergia no simulador. Desta forma, foram criadas propriedades do usuário e então, de posse de tais propriedades, implementou-se o cálculo da exergia na forma de variáveis do usuário, em linguagem de programação *Visual Basic*.

4.1.1 Propriedades do Usuário

As propriedades do usuário criadas no simulador de processos Aspen HYSYS correspondem aos coeficientes estequiométricos da reação química correspondente à Equação 2.30. Um exemplo do funcionamento das propriedades do usuário pode ser conferido na Tabela 4.1:

Tabela 4.1: Exemplo de propriedades do usuário (adaptado de ABDOLLAHI-DEMNEH *et al.* [24]).

Substância	Propriedades e seus respectivos coeficientes			
	<i>O2Demand</i>	<i>GenCO2</i>	<i>GenH2O</i>	Outros
	ν_1	ν_2	ν_3	$\nu_4 \dots \nu_{11}$
Nitrogênio	0	0	0	0
Dióxido de carbono	0	0	0	0
Metano	2	1	2	0
Etano	3,5	2	3	0
Propano	5	3	4	0
i-Butano	6,5	4	5	0
n-Butano	6,5	4	5	0
i-Pentano	8	5	6	0
n-Pentano	8	5	6	0
n-Hexano	9,5	6	7	0
Benzeno	7,5	6	3	0
Metilciclopentano	9	6	6	0
Ciclohexano	9	6	6	0
n-Heptano	11	7	8	0

Na Tabela 4.1, *O2Demand* corresponde aos coeficientes estequiométricos relativos ao consumo de oxigênio na Equação 2.30, enquanto *Gen* diz respeito aos coeficientes estequiométricos referentes à geração de espécies de referência na reação. Por exemplo, na reação do metano, para cada mol de metano consumido, são consumidos 2 mols de O_2 , gerando 1 mol de CO_2 e 2 mols de H_2O , sendo o valor para as demais espécies de referência equivalente a 0, uma vez que não participam da reação.

4.1.2 Variáveis do Usuário

As variáveis do usuário criadas no simulador de processos Aspen HYSYS dividem-se nas variáveis para correntes materiais e para correntes de energia. Assim, a Tabela 4.2 mostra as variáveis do usuário relativas às correntes materiais:

Tabela 4.2: Variáveis do usuário referentes ao cálculo da exergia em correntes materiais.

Nome	Significado	Valor	Unidade
<i>Ambient Temperature</i>	Temperatura ambiente	25	°C
<i>Ambient Pressure</i>	Pressão ambiente	101,325	kPa
<i>Amb. Xe Partial Pres.</i>	Pressão parcial de xenônio no estado morto de referência	$8,7 \cdot 10^{-6}$	kPa
<i>Amb. O2 Partial Pres.</i>	Pressão parcial de oxigênio no estado morto de referência	20,39	kPa
<i>Amb. Ne Partial Pres.</i>	Pressão parcial de neônio no estado morto de referência	$1,77 \cdot 10^{-3}$	kPa
<i>Amb. N2 Partial Pres.</i>	Pressão parcial de nitrogênio no estado morto de referência	75,78	kPa
<i>Amb. Kr Partial Pres.</i>	Pressão parcial de criptônio no estado morto de referência	$9,7 \cdot 10^{-5}$	kPa
<i>Amb. He Partial Pres.</i>	Pressão parcial de hélio no estado morto de referência	$4,85 \cdot 10^{-4}$	kPa
<i>Amb. H2O Partial Pres.</i>	Pressão parcial de água no estado morto de referência	2,2	kPa
<i>Amb. D2O Partial Pres.</i>	Pressão parcial de óxido de deutério no estado morto de referência	$3,42 \cdot 10^{-4}$	kPa
<i>Amb. CO2 Partial Pres.</i>	Pressão parcial de gás carbônico no estado morto de referência	$3,35 \cdot 10^{-2}$	kPa
<i>Amb. Ar Partial Pres.</i>	Pressão parcial de argônio no estado morto de referência	0,906	kPa
<i>Physical Exergy</i>	Exergia física	*	kW
<i>Chemical Exergy</i>	Exergia química	*	kW
<i>Mix</i>	Exergia química de mistura	*	kW
<i>Reaction</i>	Exergia química de reação	*	kW
<i>Mass Physical Exergy</i>	Exergia física mássica	*	kW
<i>Mass Chemical Exergy</i>	Exergia química mássica	*	kW
<i>Exergy</i>	Exergia	*	kW

*Variáveis calculadas.

Os códigos das variáveis do usuário listadas na Tabela 4.2 encontram-se nos apêndices do presente trabalho.

O algoritmo de cálculo da variável do usuário Exergia Física Mássica (*Mass Physical Exergy*), em J/kg, pode ser conferido na Figura 4.1:

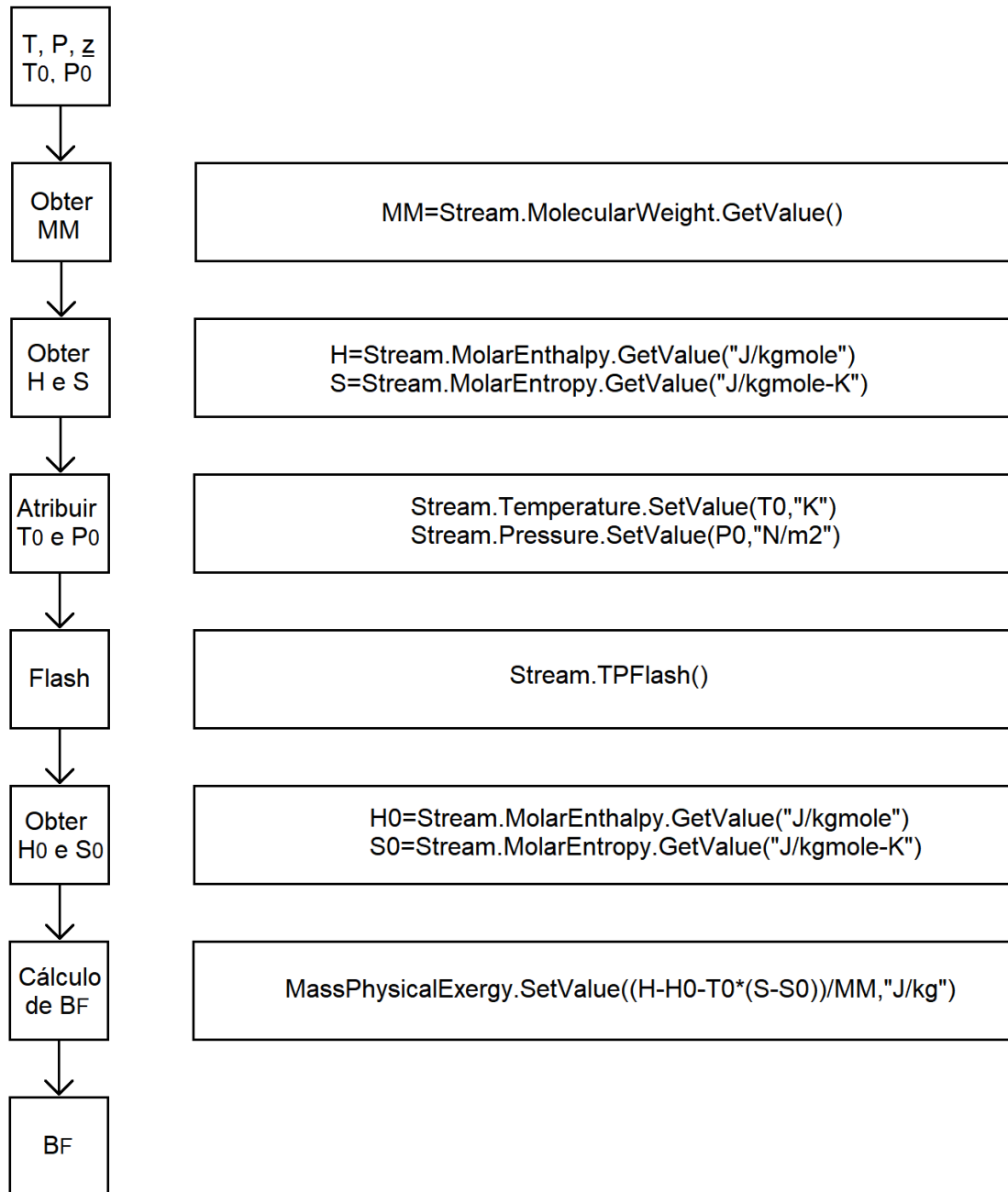


Figura 4.1: Algoritmo de cálculo da variável do usuário Exergia Física Mássica.

Já o algoritmo da variável do usuário Exergia Química Mássica (*Mass Chemical Exergy*), em J/kg, pode ser conferido nas Figuras 4.2, 4.3 e 4.4:

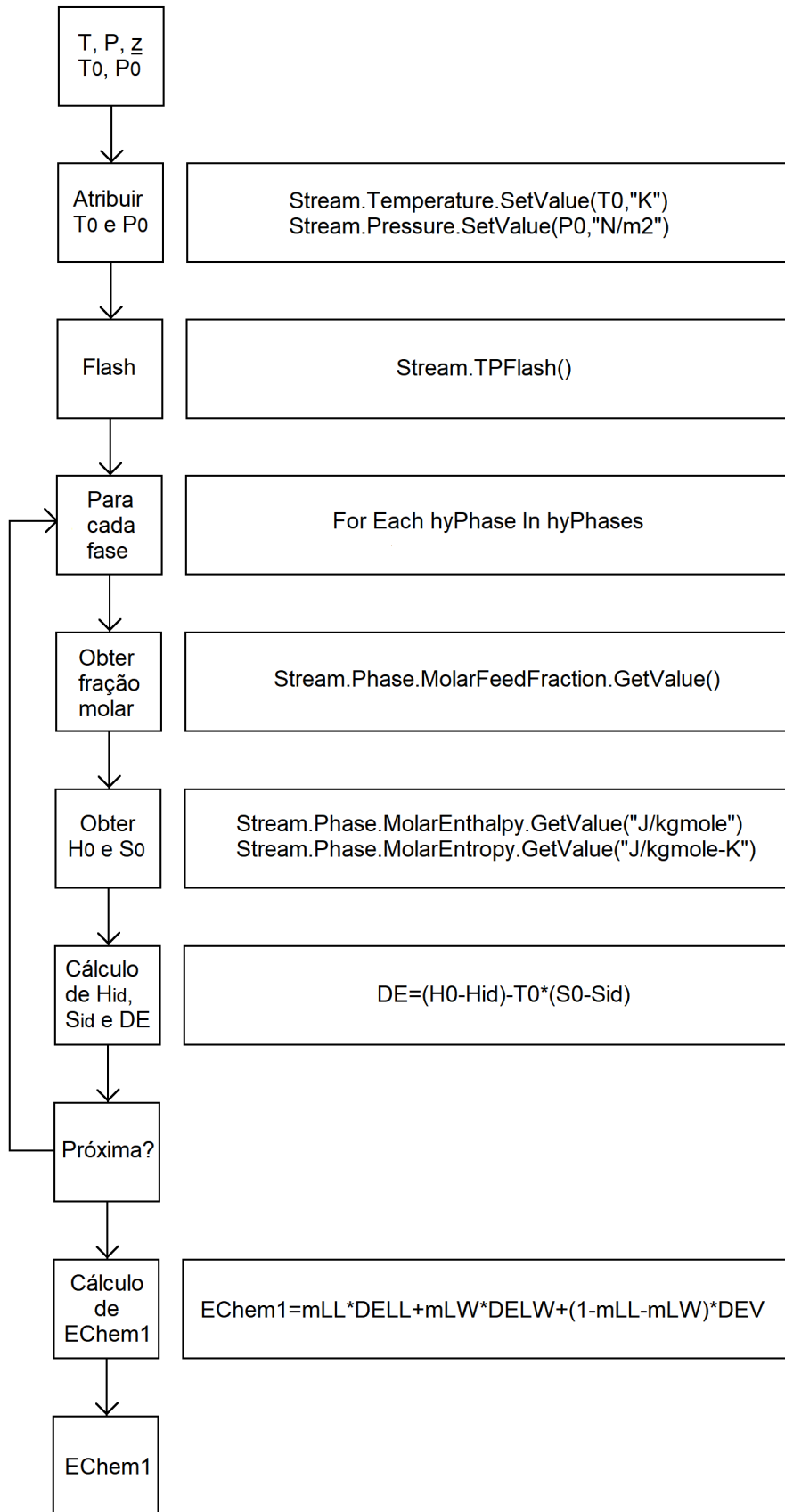


Figura 4.2: Algoritmo de cálculo da variável do usuário Exergia Química Mássica - parte a.

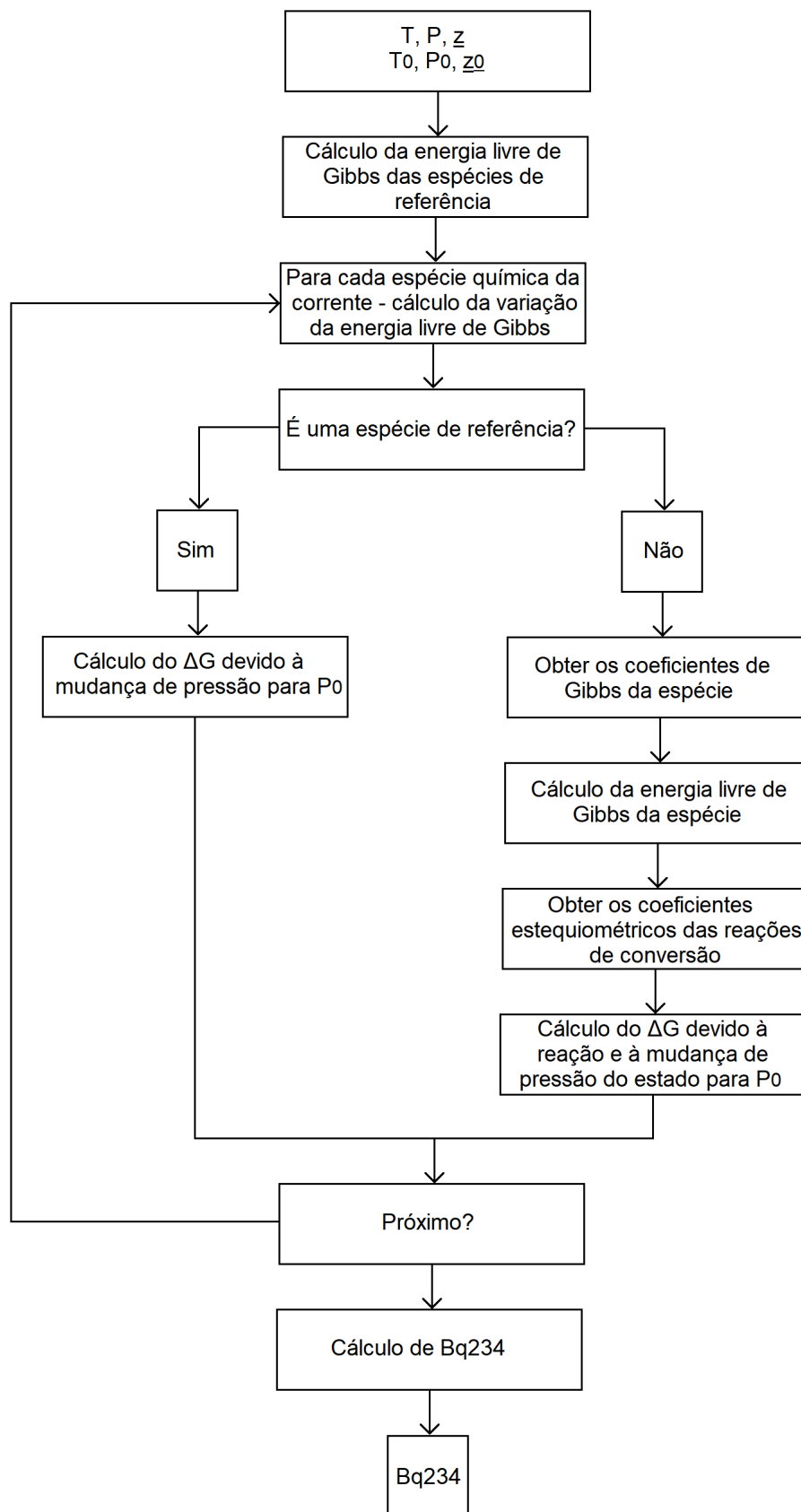


Figura 4.3: Algoritmo de cálculo da variável do usuário Exergia Química Mássica - parte b.

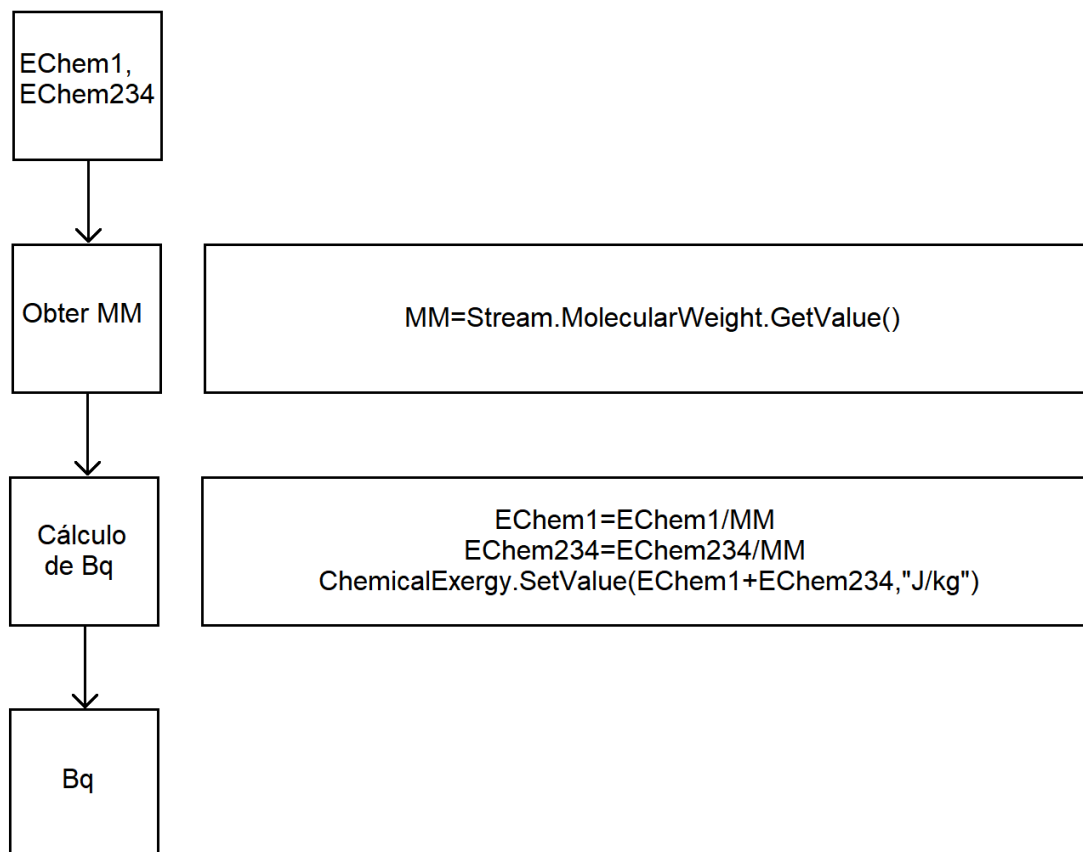


Figura 4.4: Algoritmo de cálculo da variável do usuário Exergia Química Mássica - parte c.

Outras variáveis do usuário que foram programadas incluem as variáveis extensivas Exergia Física (*Physical Exergy*) e Exergia Química (*Chemical Exergy*), ambas em kW. A variável do usuário Exergia corresponde simplesmente à soma das contribuições física e química.

No tocante às variáveis do usuário implementadas para o cálculo da exergia em correntes de energia, estas podem ser conferidas na Tabela 4.3. Tal cálculo é realizado por uma variável do usuário contida na operação unitária em questão.

Tabela 4.3: Variáveis do usuário para o cálculo da exergia em correntes de energia.

Nome	Variável	Significado	Valor
<i>Mean Thermo Temp</i>	$T_{mean}/$ $T_{meanStream}$	Variável do trocador de calor que calcula e apresenta a temperatura média termodinâmica e realiza o cálculo da exergia da corrente de energia	*
<i>Exergy in Energy Stream Calculator</i>	<i>Exergy in Energy Stream Calculator</i>	Variável de máquinas de fluxo que realiza o cálculo da exergia em correntes de energia	-
<i>Heat or Work</i>	<i>HW</i>	Identificação do tipo de corrente de energia	<i>Heat/Work</i>
<i>Exergy in Energy Stream</i>	<i>ExergyEnergy</i>	Exergia em correntes de energia	*

*Variáveis calculadas.

No caso da energia em forma de trabalho, ou seja, no caso das máquinas de fluxo, há somente uma rotina, denominada *Exergy in Energy Stream Calculator*, a qual atribui o valor da potência calculada pelo simulador à variável exergia da corrente de energia em questão.

Calcula-se a variável do usuário *Exergy in Energy Stream*, ou seja, exergia em correntes de energia, em kW, por meio da rotina de cálculo da temperatura média termodinâmica, denominada *Mean Thermo Temp*, a qual é implementada nos trocadores de calor. Tal rotina identifica o tipo de corrente de energia em questão, de acordo com o algoritmo da Figura 4.5:

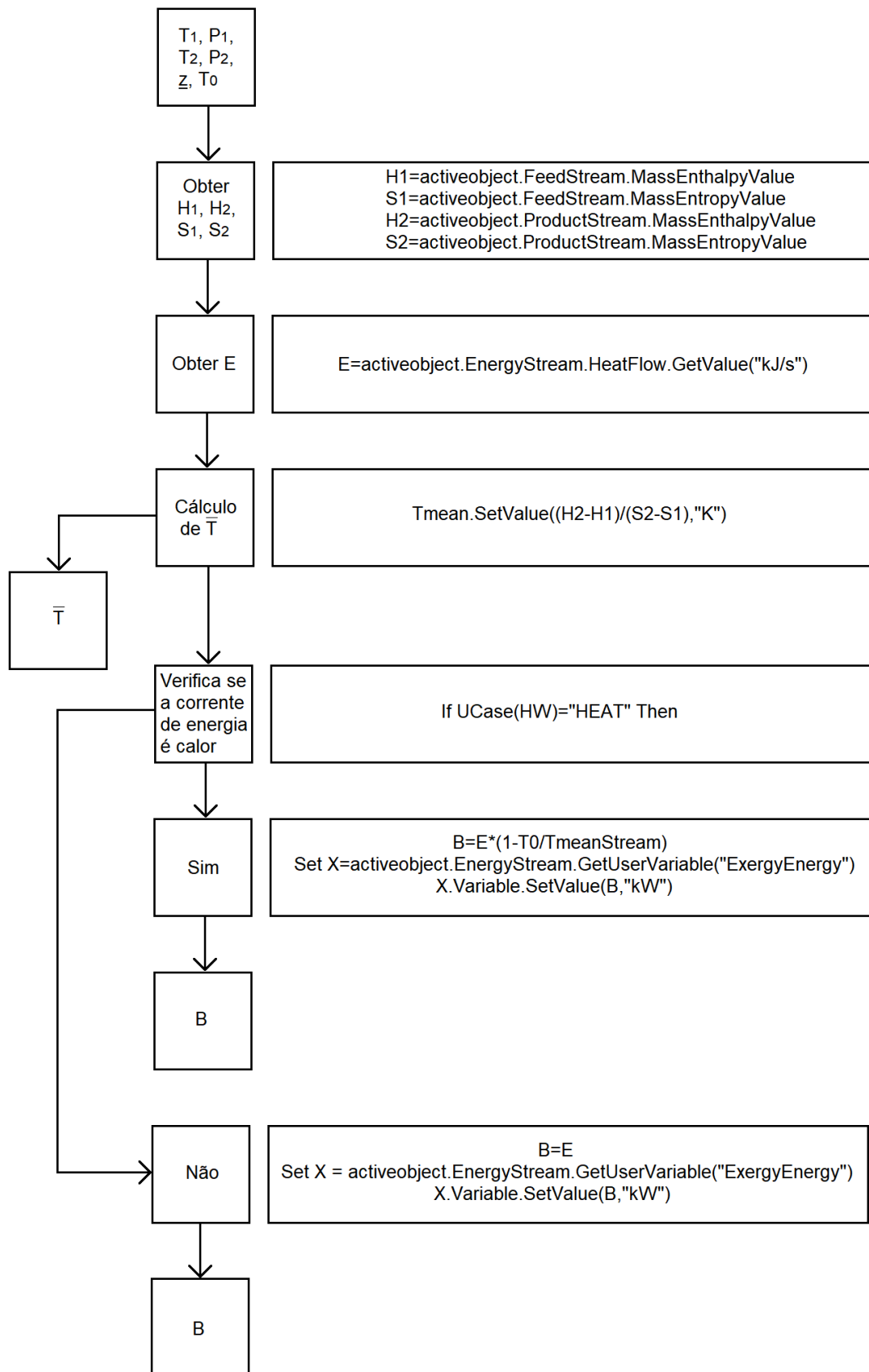


Figura 4.5: Algoritmo de cálculo da variável do usuário Temperatura Média Termodinâmica e Exergia de correntes de energia.

4.2 Validação das Simulações

4.2.1 Cálculo da Exergia

Para validar o cálculo da exergia no simulador de processos Aspen HYSYS, foram utilizados os dados de ABDOLLAHI-DEMNEH *et al.* [24], mais especificamente das correntes exemplo 1 e 2. Os resultados de tal artigo também foram obtidos utilizando o simulador em questão. Desta forma, as Tabelas 4.4 e 4.5 mostram as condições da corrente exemplo 1 e da corrente exemplo 2, respectivamente:

Tabela 4.4: Condições da corrente exemplo 1 [24].

Temperatura [K]	423,15
Pressão [kPa]	101,325
Vazão molar [kgmol/h]	3.600
Fração molar	
Componente	Valor
H_2O	0,22
N_2	0,75
CO_2	0,02
NO	0,005
CO	0,005

Tabela 4.5: Condições da corrente exemplo 2 [24].

Temperatura [K]		303,15	
Pressão [kPa]		6.200	
Vazão molar [kgmol/h]		500	
Fração molar			
Componente	Valor	Componente	Valor
N_2	0,001	$i - C_4H_{10}$	0,0059
H_2S	0,01544	$n - C_4H_{10}$	0,003
CO_2	0,02835	$i - C_5H_{10}$	0,001
CH_4	0,8982	$n - C_5H_{10}$	0,0005
C_2H_6	0,03098	H_2O	0,00086
C_3H_8	0,01479		

Assim, os componentes selecionados no simulador foram: H_2O , nitrogênio, CO_2 , metano, etano, propano, i-butano, n-butano, i-pentano, n-pentano, n-hexano, benzeno, metilciclopentano, ciclohexano, n-heptano, NO , CO , H_2S , O_2 e enxofre rômico. Já o pacote termodinâmico selecionado foi o SRK. Com isto, os valores das propriedades do usuário para cada componente selecionado podem ser conferidos nas Tabelas 4.6 a 4.10:

Tabela 4.6: Coeficientes estequiométricos referentes ao consumo de oxigênio na Equação 2.30.

<i>O2Demand</i>					
Componente	Valor	Componente	Valor	Componente	Valor
H_2O	0	Propano	5	n-Hexano	9,5
Nitrogênio	0	i-Butano	6,5	Benzeno	7,5
CO_2	0	n-Butano	6,5	Metilciclopentano	9
Metano	2	i-Pentano	8	Ciclohexano	9
Etano	3,5	n-Pentano	8	n-Heptano	11
NO	-0,5	CO	0,5	H_2S	0,5
Oxigênio	0	Enxofre rômbico	0		

Tabela 4.7: Coeficientes estequiométricos referentes à geração de água na Equação 2.30.

<i>GenH2O</i>					
Componente	Valor	Componente	Valor	Componente	Valor
H_2O	0	Propano	4	n-Hexano	7
Nitrogênio	0	i-Butano	5	Benzeno	3
CO_2	0	n-Butano	5	Metilciclopentano	6
Metano	2	i-Pentano	6	Ciclohexano	6
Etano	3	n-Pentano	6	n-Heptano	8
NO	0	CO	0	H_2S	1
Oxigênio	0	Enxofre rômbico	0		

Tabela 4.8: Coeficientes estequiométricos referentes à geração de gás carbônico na Equação 2.30.

<i>GenCO2</i>					
Componente	Valor	Componente	Valor	Componente	Valor
H_2O	0	Propano	3	n-Hexano	6
Nitrogênio	0	i-Butano	4	Benzeno	6
CO_2	0	n-Butano	4	Metilciclopentano	6
Metano	1	i-Pentano	5	Ciclohexano	6
Etano	2	n-Pentano	5	n-Heptano	7
NO	0	CO	1	H_2S	0
Oxigênio	0	Enxofre rômbico	0		

Tabela 4.9: Coeficientes estequiométricos referentes à geração de nitrogênio na Equação 2.30.

<i>GenN2</i>					
Componente	Valor	Componente	Valor	Componente	Valor
H_2O	0	Propano	0	n-Hexano	0
Nitrogênio	0	i-Butano	0	Benzeno	0
CO_2	0	n-Butano	0	Metilciclopentano	0
Metano	0	i-Pentano	0	Ciclohexano	0
Etano	0	n-Pentano	0	n-Heptano	0
NO	0,5	CO	0	H_2S	0
Oxigênio	0	Enxofre rômbico	0		

Tabela 4.10: Coeficientes estequiométricos referentes à geração de enxofre sólido na Equação 2.30.

<i>GenS</i>					
Componente	Valor	Componente	Valor	Componente	Valor
H_2O	0	Propano	0	n-Hexano	0
Nitrogênio	0	i-Butano	0	Benzeno	0
CO_2	0	n-Butano	0	Metilciclopentano	0
Metano	0	i-Pentano	0	Ciclohexano	0
Etano	0	n-Pentano	0	n-Heptano	0
NO	0,5	CO	0	H_2S	1
Oxigênio	0	Enxofre rômbico	0		

Vale ressaltar que os coeficientes estequiométricos ausentes nas Tabelas 4.6 a 4.10 equivalem a zero.

4.2.2 Consumo de Energia no Processo

Para validar o consumo de energia no processo, foram utilizados os dados de GERVASI *et al.* [8], mais especificamente a energia fornecida pelo refeedor e a energia retirada no condensador. Os resultados de tal artigo também foram obtidos utilizando o simulador de processos Aspen HYSYS. Além disso, os valores de energia apresentam-se na forma intensiva, ou seja, são as respectivas taxas de energia divididas pela vazão de CO_2 capturado (CO_2 presente no destilado da retificadora). Com isto, os componentes selecionados no simulador foram: MEA, N_2 , CO_2 , H_2O e O_2 . Já as condições da coluna de absorção e da coluna de destilação podem ser conferidas na Tabela 4.11 e na Tabela 4.12, respectivamente:

Tabela 4.11: Condições da coluna de absorção para a validação do consumo de energia no processo (adaptado de GERVASI *et al.* [8])

Variável	Valor
Tipo de pratos [-]	Borbulhadores
Número de pratos [-]	8
Diâmetro [m]	6
Espaço entre pratos [m]	0,6096
Volume dos pratos [m ³]	17,24
Nível de líquido [m]	0,0508
Pressão de operação [bar]	1,2

Tabela 4.12: Condições da coluna de destilação para a validação do consumo de energia no processo (adaptado de GERVASI *et al.* [8])

Variável	Valor
Tipo de pratos [-]	Borbulhadores
Número de pratos [-]	7
Diâmetro [m]	5,5
Espaço entre pratos [m]	0,6096
Volume dos pratos [m ³]	14,48
Nível de líquido [m]	0,0508
Pressão de operação [bar]	1,9
Temperatura de entrada da água de resfriamento [°C]	20
Temperatura de saída da água de resfriamento [°C]	25
Temperatura de entrada do vapor d'água [°C]	175
Temperatura de saída do vapor d'água [°C]	174
Tipo de condensador [-]	<i>Full reflux</i>
Tipo de vapor d'água [-]	Média pressão

Nas Tabelas 4.11 e 4.12, o nível de líquido corresponde à altura de líquido nos pratos. Quanto à água de resfriamento e ao vapor d'água, estes dizem respeito às utilidades usadas no condensador e no refeedor da coluna de destilação, respectivamente. No tocante ao tipo de condensador, o condensador *full reflux* condensa parte da corrente gasosa que entra nele, resultando em uma corrente de saída líquida e uma corrente de saída gasosa. Por fim, em relação ao tipo de vapor d'água, o vapor de média pressão consiste no vapor cuja pressão se encontra entre 10 e 12,5 kgf/cm².

Vale destacar que os valores especificados na coluna de destilação foram a fração molar de CO_2 no destilado, correspondendo a 0,98, e a vazão de CO_2 no destilado, sendo equivalente a 68.285 kg/h. Desta forma, informações adicionais podem ser verificadas na Tabela 4.13:

Tabela 4.13: Informações adicionais para a validação do consumo de energia no processo (adaptado de GERVASI *et al.* [8])

Variável	Valor
Fração mássica de MEA no solvente que entra na coluna de absorção [-]	0,28
Fração mássica de CO_2 no solvente que entra na coluna de absorção [-]	0,0605
Vazão molar de solvente que entra na coluna de absorção [kgmol/h]	74.397,49
Temperatura da carga da coluna de destilação [°C]	101,90
Prato de carga da coluna de destilação a partir do topo [-]	1
Pressão na saída das bombas [bar]	2
Eficiência adiabática das bombas [%]	75
Pressão nas saídas do trocador de calor interno [bar]	2
Temperatura na saída do resfriador [°C]	40
Pressão na saída do resfriador [bar]	200
Vazão mássica de MEA no solvente de reposição [kg/h]	12
Vazão mássica de água no solvente de reposição [kg/h]	9.224

Por fim, as condições do gás que entra na coluna de absorção podem ser verificadas na Tabela 4.14:

Tabela 4.14: Condições do gás que entra na absorvedora para a validação do consumo de energia no processo (adaptado de GERVASI *et al.* [8])

Variável	Valor	Componente	Fração molar
Temperatura [°C]	40	N_2	0,6971
Pressão [kPa]	120	CO_2	0,2375
Vazão [kgmol/h]	7.907	H_2O	0,0416
		O_2	0,0238

4.3 Determinação da Temperatura Média Termodinâmica do Vapor d'Água

Conforme mencionado na Seção 2.4.2, o cálculo da temperatura média termodinâmica é sempre aplicado à fonte quente em trocadores de calor. Assim, no caso de trocadores de calor que utilizam utilidades frias, a fonte quente corresponde à corrente de processo, e o cálculo da temperatura média termodinâmica pode ser feito sem problemas através da variável do usuário *Mean Thermo Temp*, uma vez que o simulador de processos Aspen HYSYS fornece fácil acesso às propriedades das correntes de processo. No entanto, no caso de trocadores de calor que utilizam utilidades quentes, a fonte quente corresponde à utilidade, o que implica em problemas no cálculo da temperatura média termodinâmica, visto que é difícil o acesso às propriedades das correntes de utilidade no simulador. Especificamente no tocante ao processo de absorção de CO_2 , isto impossibilita o cálculo da irreversibilidade da

coluna de destilação, pois, não sendo possível o cálculo da temperatura média termodinâmica do vapor d'água utilizado no refeedor, torna-se impossível o cálculo de sua exergia e, como consequência, torna-se impossível o cálculo da irreversibilidade da retificadora. Deste modo, surge a necessidade do cálculo da temperatura média termodinâmica das utilidades quentes a partir de correntes materiais.

Para o cálculo da temperatura média termodinâmica por meio de correntes de processo, utilizou-se, no Aspen HYSYS, um resfriador, uma vez que é possível, em tal equipamento, o cálculo da temperatura média termodinâmica diretamente através das variáveis do usuário. Deste modo, configurou-se o resfriador de modo a não possuir queda de pressão. A corrente material consiste de vapor d'água (simulando vapor de média pressão), cujas temperaturas de entrada e de saída são de 175°C e de 174°C, respectivamente, e cuja vazão mássica é de 20 kg/s. Vale ressaltar que a temperatura média termodinâmica independe da vazão. No tocante à utilidade, esta consiste de água de resfriamento, cujas temperaturas de entrada e de saída são de 20°C e de 25°C, respectivamente. Não há mudança de fase em relação à utilidade.

Como não se sabia a pressão do vapor d'água utilizada no simulador de processos Aspen HYSYS, testou-se diferentes valores de pressão na faixa de 100 a 800 kPa para o cálculo da temperatura média termodinâmica. É preciso frisar que, após a pressão de 800 kPa, ocorre formação de líquido, devendo tais valores de pressão ser evitados.

4.4 Escolha dos Indicadores de Eficiência

Após a implementação do cálculo da exergia de correntes materiais e de energia, é preciso a escolha de indicadores que possam ser utilizados na análise exérgica de processos. Assim, a presente seção trata dos indicadores que foram aplicados na análise exérgica do processo de absorção.

A coluna de absorção e a coluna de destilação consistem nas maiores fontes de irreversibilidade do processo de absorção [4]. Deste modo, torna-se mais conveniente que a análise exérgica do processo tenha como foco tais equipamentos, uma vez que suas variáveis operacionais tendem a possuir maior impacto sobre a eficiência do processo do que as variáveis das demais operações unitárias. Devido a isto, tais equipamentos foram selecionados para os testes dos indicadores de eficiência.

Nas simulações referentes aos testes dos indicadores, os componentes selecionados no simulador foram: MEA, N_2 , CO_2 , H_2O , O_2 e Ar . Em relação às condições da coluna de absorção e da coluna de destilação, estas podem ser conferidas na Tabela 4.15 e na Tabela 4.16, respectivamente:

Tabela 4.15: Condições da coluna de absorção para a testagem dos indicadores propostos (adaptado de HASSAN [43])

Variável	Valor
Tipo de pratos [-]	Borbulhadores
Número de pratos [-]	20
Diâmetro [m]	6
Espaço entre pratos [m]	0,6096
Volume dos pratos [m ³]	17,24
Nível de líquido [m]	0,0508
Pressão de operação [bar]	1,2

Tabela 4.16: Condições da coluna de destilação para a testagem dos indicadores propostos (adaptado de HASSAN [43])

Variável	Valor
Tipo de pratos [-]	Borbulhadores
Número de pratos [-]	8
Diâmetro [m]	5,5
Espaço entre pratos [m]	0,6096
Volume dos pratos [m ³]	14,48
Nível de líquido [m]	0,0508
Pressão de operação [bar]	1,9
Temperatura de entrada da água de resfriamento [°C]	20
Temperatura de saída da água de resfriamento [°C]	25
Temperatura de entrada do vapor d'água [°C]	175
Temperatura de saída do vapor d'água [°C]	174
Tipo de condensador [-]	<i>Full reflux</i>
Tipo de vapor d'água [-]	Média pressão

Vale destacar que os valores especificados na coluna de destilação foram a fração molar de CO_2 no destilado, correspondendo a 0,98, e a fração mássica de MEA no solvente regenerado, sendo equivalente a 0,3. Desta forma, informações adicionais podem ser verificadas na Tabela 4.17:

Tabela 4.17: Informações adicionais para a testagem dos indicadores propostos (adaptado de HASSAN [43])

Variável	Valor
Fração mássica de MEA no solvente que entra na coluna de absorção [-]	0,3
Vazão molar de solvente que entra na coluna de absorção [kgmol/h]	79.000
Temperatura da carga da coluna de destilação [°C]	100
Prato de carga da coluna de destilação a partir do topo [-]	4
Pressão na saída das bombas [bar]	2
Eficiência adiabática das bombas [%]	75
Pressão nas saídas do trocador de calor interno [bar]	1,9
Temperatura na saída do resfriador [°C]	40
Pressão na saída do resfriador [bar]	1,2
Fração mássica de MEA no solvente de reposição [-]	0,3
Fração mássica de água no solvente de reposição [-]	0,7

Quanto às condições do gás que entra na coluna de absorção, estas podem ser conferidas na Tabela 4.18:

Tabela 4.18: Condições do gás a ser tratado para a testagem dos indicadores propostos (adaptado de HASSAN [43])

Variável	Valor	Componente	Fração molar
Temperatura [°C]	40	N_2	0,6971
Pressão [kPa]	120	CO_2	0,2375
Vazão [kgmol/h]	7.900	H_2O	0,0416
		O_2	0,0238

Desta forma, para os testes dos indicadores propostos para a coluna de absorção e a coluna de destilação, a variável escolhida foi a fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora. Tal variável foi escolhida por estar intrinsecamente relacionada à irreversibilidade da coluna de destilação, a qual, conforme mencionado anteriormente, é um dos equipamentos que mais contribuem para a irreversibilidade do processo de absorção. Assim, quanto menor a quantidade de energia consumida no refeedor, além da irreversibilidade da coluna de destilação diminuir, a concentração de CO_2 no solvente regenerado aumenta, o que faz com que elevadas frações molares de CO_2 no solvente regenerado sejam um indicativo de baixas irreversibilidades na retificadora. Assim, nas simulações feitas, a fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora variou entre 0,01 e 0,05, com um intervalo de 0,005 entre as simulações.

4.4.1 Coluna de Absorção

A Figura 4.6 representa a operação unitária coluna de absorção em fluxograma de processos:

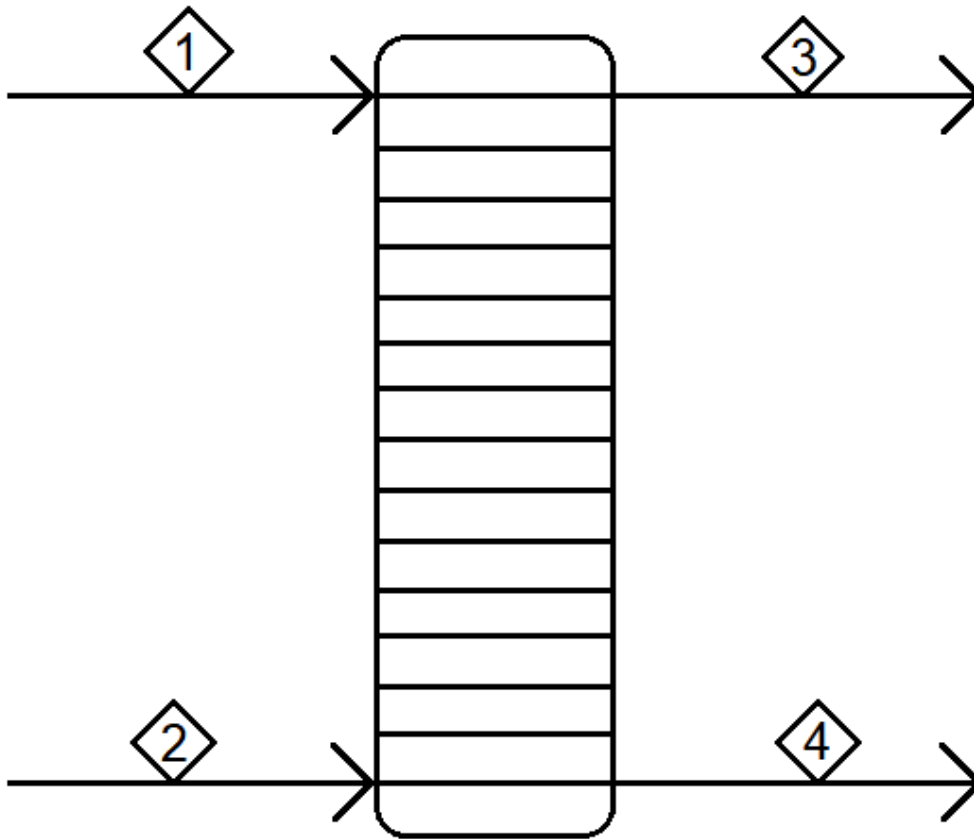


Figura 4.6: Operação unitária coluna de absorção representada em fluxograma de processos.

Na Figura 4.6, a corrente 1 representa a corrente de solvente que entra no topo da coluna de absorção. Já a corrente 2 representa a corrente gasosa rica em CO_2 que entra no fundo da coluna (gás a tratar). Quanto à corrente 3, esta representa a corrente gasosa que sai no topo da coluna (gás tratado). Por fim, a corrente 4 diz respeito à corrente de solvente rica em CO_2 que sai no fundo da coluna. Assim, um dos indicadores de eficiência testados para a coluna de absorção foi a irreversibilidade, a qual pode ser conferida na Equação 4.1:

$$\dot{I} = \dot{B}_1 + \dot{B}_2 - \dot{B}_3 - \dot{B}_4 \quad (4.1)$$

em que \dot{I} é a irreversibilidade, em W, e \dot{B} é a exergia, em W.

Outro indicador testado para a coluna de absorção foi a eficiência exergética, a qual corresponde à Equação 4.2:

$$\eta = \frac{\dot{B}_3 + \dot{B}_4}{\dot{B}_1 + \dot{B}_2} \quad (4.2)$$

em que η é a eficiência exergética, adimensional.

Alguns outros indicadores relativos à coluna de absorção que foram testados no presente trabalho foram propostas por MOHAMADI-BAGHMOLAEI *et al.* [44]. Um desses indicadores corresponde a uma forma alternativa do cálculo da irreversibilidade, a qual pode ser conferida na Equação 4.3:

$$\dot{I} = \dot{B}_1 + \dot{B}_2 + \dot{Q}_{perdido} \left(1 - \frac{T_0}{T_{média}} \right) - \dot{B}_3 - \dot{B}_4 \quad (4.3)$$

em que \dot{Q} é a taxa de transferência de calor, em W, T_0 é a temperatura ambiente, em K, e T é a temperatura absoluta, em K.

O outro indicador proposto por MOHAMADI-BAGHMOLAEI *et al.* [44] foi uma forma alternativa da eficiência exergética, a qual pode ser verificada na Equação 4.4:

$$\eta = \frac{\dot{B}_3 + \dot{B}_4 - \dot{Q}_{perdido} \left(1 - \frac{T_0}{T_{média}} \right)}{\dot{B}_1 + \dot{B}_2} \quad (4.4)$$

Na Equação 4.3 e na Equação 4.4, é aplicada uma máquina de Carnot à coluna de absorção, considerando-se o calor perdido pela mesma e tomando-se a temperatura ambiente como a da fonte fria e a temperatura média da coluna como a da fonte quente. Deste modo, tais equações foram testadas de duas formas: aplicando-se a máquina de Carnot a cada prato da coluna e aplicando-se a máquina de Carnot para a coluna como um todo.

Finalmente, o último indicador testado para a coluna de absorção foi outra forma alternativa da eficiência exergética, a qual foi proposta por EBRAHIMI *et al.* [39] e que pode ser conferida na Equação 4.5:

$$\eta = \frac{\dot{B}_3 + \dot{B}_4 - \dot{B}_1}{\dot{B}_2} \quad (4.5)$$

4.4.2 Coluna de Destilação

A Figura 4.7 representa a operação unitária coluna de destilação em fluxograma de processos:

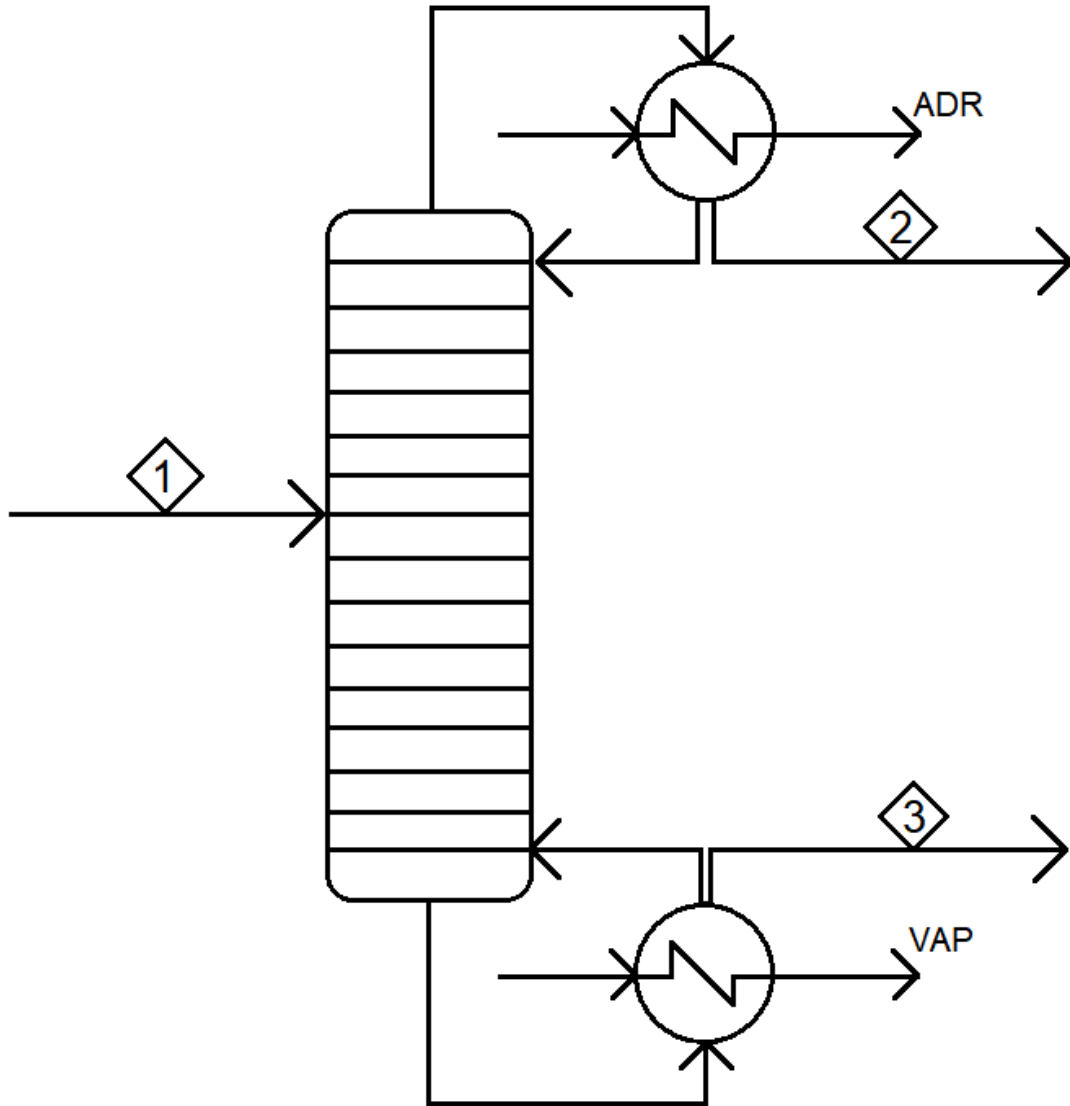


Figura 4.7: Operação unitária coluna de destilação representada em fluxograma de processos.

Na Figura 4.7, a corrente 1 representa a carga da coluna de destilação. Já a corrente 2 representa a corrente de destilado rica em CO_2 que sai no topo da coluna. Quanto à corrente 3, esta diz respeito à corrente de solvente regenerado que sai no fundo da coluna. Por fim, as correntes ADR e VAP representam a água de resfriamento utilizada no condensador e o vapor d'água utilizado no refeedor, respectivamente. Assim, um dos indicadores de eficiência testados para a coluna de destilação foi a irreversibilidade, a qual pode ser conferida na Equação 4.6:

$$\dot{I} = \dot{B}_1 - \dot{B}_2 - \dot{B}_3 + |\dot{Q}_{REF}| \left(1 - \frac{T_0}{\bar{T}_{VAP}}\right) - |\dot{Q}_{COND}| \left(1 - \frac{T_0}{\bar{T}_{CDP}}\right) \quad (4.6)$$

em que \dot{Q}_{REF} é a taxa de transferência de calor do refeedor, em W, \bar{T}_{VAP} é a temperatura média de operação do vapor d'água, em K, \dot{Q}_{COND} é a taxa de transferência de calor do condensador, em W, e \bar{T}_{CDP} é a temperatura média de operação da corrente de processo do condensador, em K.

O outro indicador testado para a coluna de destilação foi a eficiência racional, a qual foi proposta por GHANNADZADEH *et al.* [3], sendo representada pela Equação 4.7:

$$\Psi = \frac{\dot{B}_2 + \dot{B}_3 - \dot{B}_1 + |\dot{Q}_{COND}| \left(1 - \frac{T_0}{\bar{T}_{CDP}}\right)}{|\dot{Q}_{REF}| \left(1 - \frac{T_0}{\bar{T}_{VAP}}\right)} \quad (4.7)$$

em que Ψ é a eficiência racional, adimensional.

Conforme mencionado na Seção 2.3.3, a eficiência racional corresponde à razão entre a saída de exergia desejada e a exergia utilizada. Assim, o teste de tal indicador torna-se conveniente por ele fornecer uma visão clara nos casos em que uma quantidade significativa de perda de exergia externa é produzida, sendo rigoroso o suficiente para avaliar a performance das operações unitárias mais utilizadas se seu objetivo for definido com precisão e se os diferentes componentes da exergia das correntes materiais forem conhecidos.

4.5 Análise Exergética da Captura de Gás Carbônico para Diferentes Concentrações do Gás

De posse do indicador de eficiência escolhido a partir das condições da Seção 4.4, aplicou-se a análise exergética ao processo de absorção para diferentes concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora. Isto foi feito com o intuito de verificar as variáveis mais convenientes a serem ajustadas nas próximas seções. Deste modo, os componentes selecionados no simulador foram: MEA, N_2 , CO_2 , H_2O e O_2 . Já as frações molares de CO_2 no gás que entra na coluna de absorção, para as simulações realizadas, foram: 0,05, 0,1, 0,15 e 0,2375.

Conforme pontuado na Seção 4.4, a coluna de absorção e a coluna de destilação consistem nas maiores fontes de irreversibilidade do processo de absorção [4]. Deste modo, torna-se mais conveniente que a análise exergética do processo tenha como foco tais equipamentos, uma vez que suas variáveis operacionais tendem a possuir maior impacto sobre a eficiência do processo do que as variáveis das demais operações unitárias. Devido a isto, tais equipamentos foram selecionados para as análises exergéticas da presente seção.

Para cada fração molar de CO_2 mencionada anteriormente, as variáveis analisadas relacionadas com a coluna de absorção foram: razão L/G (líquido/gás), fração

mássica de CO_2 no solvente, temperatura do solvente, pressão de operação, número de pratos, diâmetro e fração de MEA no solvente. Quanto às variáveis analisadas relacionadas com a coluna de destilação, estas foram: pressão de operação, temperatura da carga, prato de carga, número de pratos e diâmetro. Desta forma, para as quatro frações molares de CO_2 no gás a ser tratado, a Tabela 4.19 apresenta as condições da coluna de absorção, enquanto a Tabela 4.20 apresenta as condições da coluna de destilação:

Tabela 4.19: Condições da coluna de absorção para as quatro frações molares de CO_2 no gás a ser tratado (adaptado de HASSAN [43])

Variável	Valor
Tipo de pratos [-]	Borbulhadores
Espaço entre pratos [m]	0,6096
Volume dos pratos [m ³]	17,24
Nível de líquido [m]	0,0508

Tabela 4.20: Condições da coluna de destilação para as quatro frações molares de CO_2 no gás a ser tratado (adaptado de HASSAN [43])

Variável	Valor
Tipo de pratos [-]	Borbulhadores
Espaço entre pratos [m]	0,6096
Volume dos pratos [m ³]	14,48
Nível de líquido [m]	0,0508
Temperatura de entrada da água de resfriamento [°C]	20
Temperatura de saída da água de resfriamento [°C]	25
Temperatura de entrada do vapor d'água [°C]	175
Temperatura de saída do vapor d'água [°C]	174
Tipo de condensador [-]	<i>Full reflux</i>
Tipo de vapor d'água [-]	Média pressão

Vale destacar que os valores especificados na coluna de destilação foram a fração molar de CO_2 no destilado, correspondendo a 0,98, e a fração mássica de MEA no solvente regenerado, sendo equivalente à fração de MEA no solvente que entra na absorvedora. Também é importante frisar que a fração mássica de MEA no solvente de reposição foi ajustada, nas simulações, como sendo igual à fração mássica de MEA no solvente que entra na absorvedora. Desta forma, informações adicionais podem ser verificadas na Tabela 4.21:

Tabela 4.21: Informações adicionais para as quatro frações molares de CO_2 no gás a ser tratado (adaptado de HASSAN [43])

Variável	Valor
Pressão na saída das bombas [bar]	2
Eficiência adiabática das bombas [%]	75
Pressão nas saídas do trocador de calor interno [bar]	1,9
Pressão na saída do resfriador [bar]	1,2

No tocante às condições do gás que entra na coluna de absorção, estas podem ser conferidas na Tabela 4.22:

Tabela 4.22: Condições do gás que entra na coluna de absorção (adaptado de HASSAN [43])

Variável	Valor	Componente	Fração molar
Temperatura [°C]	40	H_2O	0,0416
Pressão [kPa]	120	O_2	0,0238
Vazão [kgmol/h]	7.900		

Conforme é possível observar na Tabela 4.22, as frações molares de H_2O e O_2 permaneceram constantes para todas as simulações realizadas, enquanto que, conforme aumentava-se o valor da fração molar de CO_2 , tal aumento era compensado com a redução da fração molar de N_2 , de modo que a soma das frações molares dos componentes fosse 1. Com isto, para as simulações referentes a cada concentração de CO_2 no gás que entra na coluna de absorção, utilizou-se o caso base apresentado na Tabela 4.23:

Tabela 4.23: Caso base utilizado para as quatro frações molares de CO_2 no gás a ser tratado

Coluna de absorção		Coluna de destilação	
Variável	Valor	Variável	Valor
Temperatura do solvente [°C]	40	Temperatura da carga [°C]	100
Pressão de operação [kPa]	120	Pressão de operação [kPa]	190
Vazão de solvente [kgmol/h]	79.000	Prato de carga a partir do topo [-]	4
Fração mássica de CO_2 no solvente [-]	0,01	Número de pratos [-]	8
Número de pratos [-]	20	Diâmetro [m]	5,5
Diâmetro [m]	6		
Fração mássica de MEA no solvente [-]	0,3		

Para cada valor da fração molar de CO_2 no gás que entra na absorvedora, as simulações foram realizadas de modo que, para cada variável da Tabela 4.23, tal variável era variada enquanto as demais eram mantidas fixas, analisando, desta

maneira, a sensibilidade do processo de absorção à variável em questão. Assim, o fluxograma montado no simulador de processos Aspen HYSYS para as simulações referentes à presente seção pode ser conferido na Figura 4.8:

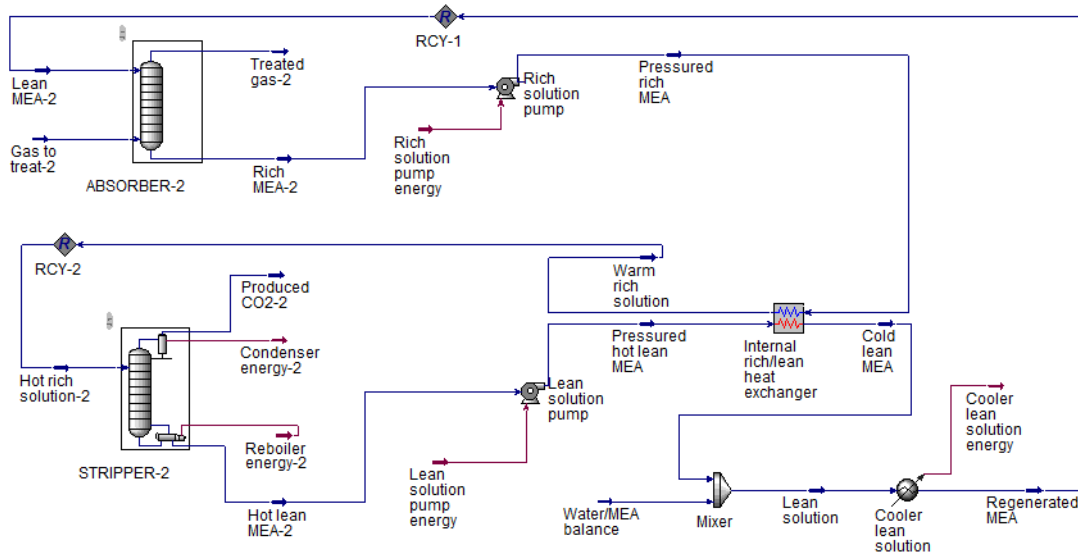


Figura 4.8: Fluxograma construído no simulador Aspen HYSYS para as análises exérgicas.

4.6 Avaliação da Captura de Gás Carbônico do Ar Atmosférico

Foi realizada uma análise comparativa entre o consumo de energia proveniente da captura de CO_2 , por meio do processo de absorção, na indústria do cimento e diretamente do ar atmosférico. Isto foi feito com a finalidade de verificar se é vantajosa, do ponto de vista energético, a aplicação do processo de absorção para a captura de CO_2 do ar. Assim, os componentes selecionados no simulador Aspen HYSYS foram: MEA, N_2 , CO_2 , H_2O , O_2 e Ar .

As simulações foram realizadas utilizando três casos base. O primeiro deles diz respeito à captura de CO_2 na indústria do cimento. O segundo é relativo à captura do ar atmosférico seco. Por fim, o último caso base consiste na captura do ar atmosférico saturado em água. A escolha da indústria do cimento como caso base se justifica porque os gases de combustão provenientes de tal indústria, diferentemente do ar atmosférico, apresentam elevada concentração de CO_2 . Assim, isto permite o estabelecimento de uma comparação entre o consumo de energia resultante da captura de CO_2 , por meio do processo de absorção, tendo-se um gás a tratar concentrado no referido componente e tendo-se um gás a tratar diluído. Em

relação ao ar atmosférico, este foi dividido em seco e úmido de modo a verificar se a umidade do ar impacta de forma significativa o consumo de energia no processo.

Para todos os casos em análise, a Tabela 4.24 apresenta as condições da coluna de absorção, enquanto a Tabela 4.25 apresenta as condições da coluna de destilação:

Tabela 4.24: Condições da coluna de absorção para os três casos base (adaptado de HASSAN [43])

Variável	Valor
Tipo de pratos [-]	Borbulhadores
Número de pratos [-]	20
Diâmetro [m]	6
Espaço entre pratos [m]	0,6096
Volume dos pratos [m ³]	17,24
Nível de líquido [m]	0,0508
Pressão de operação [bar]	1,2

Tabela 4.25: Condições da coluna de destilação para os três casos base (adaptado de HASSAN [43])

Variável	Valor
Tipo de pratos [-]	Borbulhadores
Número de pratos [-]	8
Diâmetro [m]	5,5
Espaço entre pratos [m]	0,6096
Volume dos pratos [m ³]	14,48
Nível de líquido [m]	0,0508
Pressão de operação [bar]	1,9
Temperatura de entrada da água de resfriamento [°C]	20
Temperatura de saída da água de resfriamento [°C]	25
Temperatura de entrada do vapor d'água [°C]	175
Temperatura de saída do vapor d'água [°C]	174
Tipo de condensador [-]	<i>Full reflux</i>
Tipo de vapor d'água [-]	Média pressão

Informações adicionais podem ser verificadas na Tabela 4.26:

Tabela 4.26: Informações adicionais para os três casos base (adaptado de HASSAN [43])

Variável	Valor
Fração mássica de MEA no solvente que entra na coluna de absorção [-]	0,3
Vazão molar de solvente que entra na coluna de absorção [kgmol/h]	79.000
Temperatura da carga da coluna de destilação [°C]	100
Prato de carga da coluna de destilação a partir do topo [-]	4
Pressão na saída das bombas [bar]	2
Eficiência adiabática das bombas [%]	75
Pressão nas saídas do trocador de calor interno [bar]	1,9
Temperatura na saída do resfriador [°C]	40
Pressão na saída do resfriador [bar]	1,2

Vale ressaltar que, no caso base da indústria do cimento, o solvente que entra na coluna de absorção possui uma fração mássica de CO_2 de 0,01, enquanto nos casos relativos ao ar atmosférico o solvente é isento de CO_2 . Tal diferença se deve à baixa concentração de CO_2 no ar atmosférico, pois a concentração de CO_2 no solvente não pode ser superior à concentração de CO_2 no gás a tratar. Também é importante frisar que, no caso base da indústria do cimento, os valores especificados na coluna de destilação foram a fração molar de CO_2 no destilado, a qual foi equivalente a 0,98, e a fração mássica de MEA no solvente regenerado, correspondendo a 0,3. Já nos casos relativos ao ar atmosférico, os valores especificados na coluna de destilação foram a vazão de destilado, a qual foi equivalente a 25.000 kgmol/h, e a razão de refluxo, sendo igual a 500. Porém, como o caso base da indústria do cimento é utilizado apenas como referência de comparação, tal diferença entre os valores especificados não representa um problema.

As condições do gás de combustão na indústria do cimento, do ar atmosférico seco e do ar atmosférico úmido podem ser verificadas na Tabela 4.27, na Tabela 4.28 e na Tabela 4.29, respectivamente:

Tabela 4.27: Condições do gás de combustão na indústria do cimento (adaptado de HASSAN [43])

Variável	Valor	Componente	Fração molar
Temperatura [°C]	40	N_2	0,6971
Pressão [kPa]	120	CO_2	0,2375
Vazão [kgmol/h]	7.900	H_2O	0,0416
		O_2	0,0238

Tabela 4.28: Condições do ar atmosférico seco (adaptado de YOUNG *et al.* [45])

Variável	Valor	Componente	Fração molar
Temperatura [°C]	20	N_2	0,7808
Pressão [kPa]	120	O_2	0,2095
Vazão [kgmol/h]	7.900	Ar	0,0093
		CO_2	0,0004

Tabela 4.29: Condições do ar atmosférico úmido (adaptado de YOUNG *et al.* [45])

Variável	Valor	Componente	Fração molar
Temperatura [°C]	20	N_2	0,7662
Pressão [kPa]	120	CO_2	0,0004
Vazão [kgmol/h]	7.900	H_2O	0,0186
		O_2	0,2056
		Ar	0,0091

As condições da Tabela 4.27 (indústria do cimento) correspondem, na Seção 4.5, à maior das quatro concentrações de CO_2 no gás a ser tratado. Quanto às métricas utilizadas para comparação dos três casos base, a primeira delas foi a eficiência de captura de CO_2 , calculada de acordo com a Equação 4.8:

$$EC = \frac{\dot{n}_{CO_2,destilado}}{\dot{n}_{CO_2,gás\ a\ tratar}} \quad (4.8)$$

em que EC é a eficiência de captura de CO_2 , adimensional, e $\dot{n}_{i,j}$ é a vazão molar do componente i na corrente j , em kgmol/s. Em relação aos subscritos, *destilado* corresponde à corrente de destilado da coluna de destilação. Neste ponto, destaca-se que o CO_2 presente na corrente de destilado equivale ao CO_2 capturado. Já o subscrito *gás a tratar* diz respeito à corrente gasosa que entra na coluna de absorção. Sendo assim, outra métrica utilizada diz respeito à fração molar de CO_2 no gás tratado, ou seja, no gás que deixa a coluna de absorção. Por fim, a última métrica utilizada foi o consumo de energia no processo, calculada de acordo com a Equação 4.9:

$$C = \frac{E_{bomba\ 1} + E_{bomba\ 2} + E_{refervedor}}{\dot{n}_{CO_2,destilado}} \quad (4.9)$$

em que C é o consumo de energia no processo, em J/kgmol, e E_i é a energia consumida no equipamento i , em W. Quanto aos subscritos, *bomba 1* e *bomba 2* denotam as bombas, enquanto *refervedor* denota o refervedor da coluna de destilação.

4.7 Estudo de Caso para a Indústria do Cimento

Visando reduzir o consumo de energia e a irreversibilidade do processo de absorção para o caso base da indústria do cimento da Seção 4.6, bem como melhorar a eficiência de captura de CO_2 , foi realizado um estudo de caso para tal indústria. Para isto, o ajuste das variáveis operacionais foi realizado sem reciclo, conforme pode ser visto na Figura 4.9:

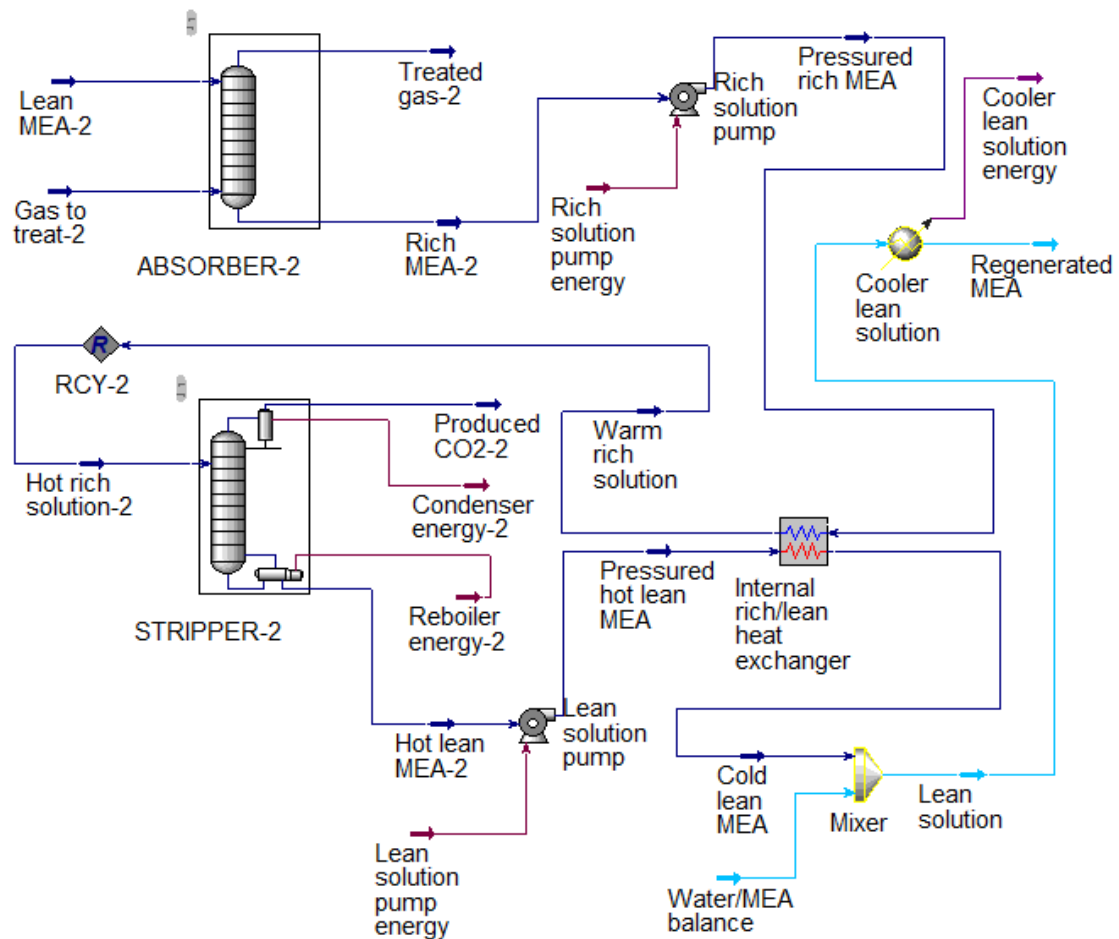


Figura 4.9: Fluxograma construído no simulador Aspen HYSYS para a realização do estudo de caso relativo à indústria do cimento.

Assim, somente após todos os ajustes das variáveis operacionais implementou-se o reciclo no processo.

Os componentes selecionados no simulador para a realização do estudo de caso foram: MEA, N_2 , CO_2 , H_2O e O_2 . Em relação às condições da coluna de absorção e da coluna de destilação, estas podem ser conferidas na Tabela 4.30 e na Tabela 4.31, respectivamente:

Tabela 4.30: Condições da coluna de absorção para a realização do estudo de caso relativo à indústria do cimento (adaptado de HASSAN [43])

Variável	Valor
Tipo de pratos [-]	Borbulhadores
Diâmetro [m]	6
Espaço entre pratos [m]	0,6096
Volume dos pratos [m ³]	17,24
Nível de líquido [m]	0,0508
Pressão de operação [bar]	1,2

Tabela 4.31: Condições da coluna de destilação para a realização do estudo de caso relativo à indústria do cimento (adaptado de HASSAN [43])

Variável	Valor
Tipo de pratos [-]	Borbulhadores
Número de pratos [-]	20
Diâmetro [m]	5,5
Espaço entre pratos [m]	0,6096
Volume dos pratos [m ³]	14,48
Nível de líquido [m]	0,0508
Pressão de operação [bar]	1,9
Temperatura de entrada da água de resfriamento [°C]	20
Temperatura de saída da água de resfriamento [°C]	25
Temperatura de entrada do vapor d'água [°C]	175
Temperatura de saída do vapor d'água [°C]	174
Tipo de condensador [-]	<i>Full reflux</i>
Tipo de vapor d'água [-]	Média pressão

Informações adicionais podem ser verificadas na Tabela 4.32:

Tabela 4.32: Informações adicionais para a realização do estudo de caso relativo à indústria do cimento (adaptado de HASSAN [43])

Variável	Valor
Fração mássica de MEA no solvente que entra na coluna de absorção [-]	0,3
Fração mássica de CO ₂ no solvente que entra na coluna de absorção [-]	0,01
Temperatura da carga da coluna de destilação [°C]	100
Prato de carga da coluna de destilação a partir do topo [-]	1
Pressão na saída das bombas [bar]	2
Eficiência adiabática das bombas [%]	75
Pressão nas saídas do trocador de calor interno [bar]	1,9
Temperatura na saída do resfriador [°C]	40
Pressão na saída do resfriador [bar]	1,2

Desta forma, as condições do gás que entra na coluna de absorção podem ser verificadas na Tabela 4.33:

Tabela 4.33: Condições do gás que entra na coluna de absorção para a realização do estudo de caso relativo à indústria do cimento (adaptado de HASSAN [43])

Variável	Valor	Componente	Fração molar
Temperatura [°C]	40	N_2	0,6971
Pressão [kPa]	120	CO_2	0,2375
Vazão [kgmol/h]	7.900	H_2O	0,0416
		O_2	0,0238

Quanto ao consumo de energia no processo, este é calculado por meio da Equação 4.9. Já a irreversibilidade total do processo é calculada por meio da Equação 4.10:

$$\hat{I} = \frac{\dot{I}_{absorvedora} + \dot{I}_{bomba\ 1} + \dot{I}_{trocador\ interno} + \dot{I}_{retificadora} + \dot{I}_{bomba\ 2}}{\dot{n}_{CO_2,destilado}} \quad (4.10)$$

em que \hat{I} é a irreversibilidade total do processo, em J/kgmol, \dot{I}_i é a irreversibilidade no equipamento i , em W, e $\dot{n}_{i,j}$ é a vazão molar do componente i na corrente j , em kgmol/s. Em relação aos subscritos, *absorvedora* denota a coluna de destilação, *bomba 1* e *bomba 2* denotam as bombas, *trocador interno* denota o trocador de calor interno, *retificadora* denota a coluna de destilação e *destilado* denota a corrente de destilado da coluna de destilação. Neste ponto, destaca-se que o CO_2 presente na corrente de destilado equivale ao CO_2 capturado.

Na Equação 4.10, a irreversibilidade da absorvedora e da retificadora são calculadas através das Equações 4.1 e 4.6, respectivamente. Quanto à irreversibilidade das bombas, a Figura 4.10 representa a operação unitária bomba centrífuga em fluxograma de processos:

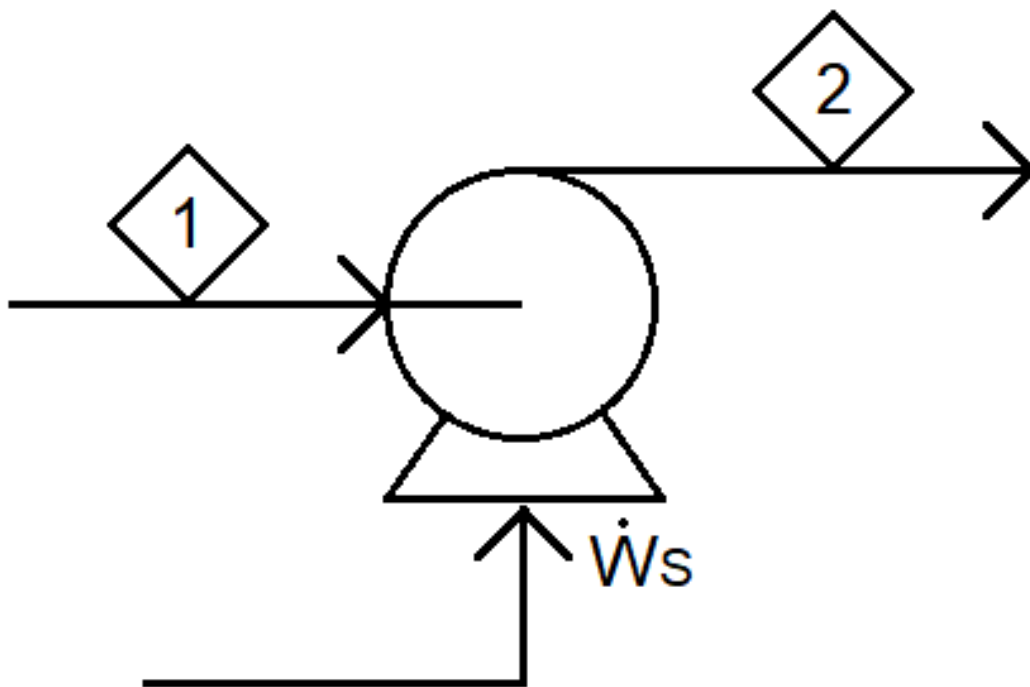


Figura 4.10: Operação unitária bomba centrífuga representada em fluxograma de processos.

Na Figura 4.10, a corrente 1 e a corrente 2 representam a corrente que entra na bomba e a corrente que sai da bomba, respectivamente. Já a corrente \dot{W}_S representa a potência obtida por trabalho de eixo da bomba. Com isto, a irreversibilidade em bombas centrífugas pode ser calculada de acordo com a Equação 4.11:

$$\dot{I} = \dot{B}_1 + |\dot{W}_S| - \dot{B}_2 \quad (4.11)$$

em que \dot{B} é a exergia, em W, e \dot{W}_S é a potência obtida por trabalho de eixo, em W. Já em relação à irreversibilidade do trocador de calor interno, a Figura 4.11 representa a operação unitária trocador de calor em fluxograma de processos:

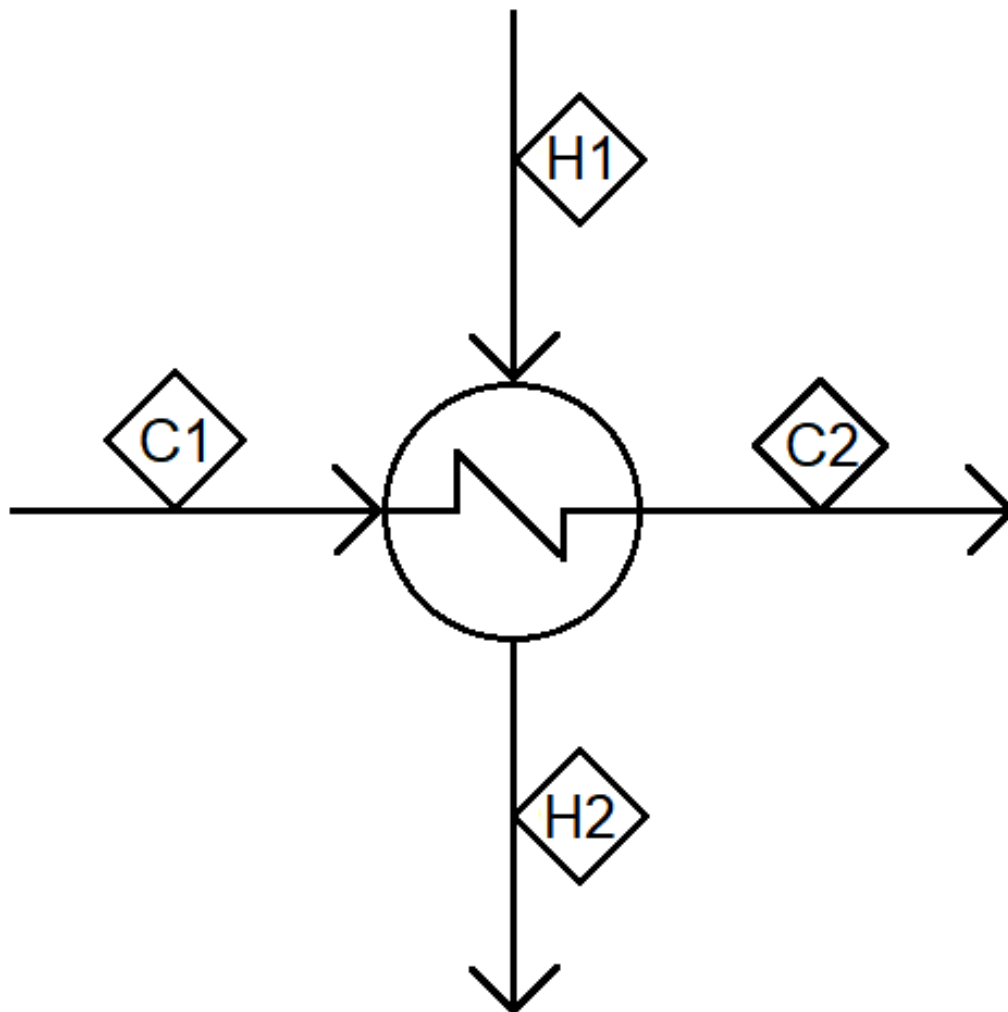


Figura 4.11: Operação unitária trocador de calor representada em fluxograma de processos.

Na Figura 4.11, as correntes C1 e C2 representam a corrente fria na entrada e na saída do trocador de calor, respectivamente. Já as correntes H1 e H2 representam a corrente quente na entrada e na saída do trocador de calor, respectivamente. Deste modo, a irreversibilidade em trocadores de calor pode ser calculada de acordo com a Equação 4.12:

$$\dot{I} = \dot{B}_{H1} + \dot{B}_{C1} - \dot{B}_{H2} - \dot{B}_{C2} \quad (4.12)$$

Vale frisar que, devido às simulações serem realizadas sem reciclo em um primeiro momento, as contribuições do misturador e do resfriador não são contabilizadas na Equação 4.10. Porém, devido ao fato de as maiores fontes de irreversibilidade serem a coluna de absorção e a coluna de destilação, tal consideração não impacta de forma significativa a irreversibilidade total do processo.

Capítulo 5

Resultados e Discussões

No presente capítulo, apresenta-se os resultados obtidos nas simulações a partir das condições operacionais apresentadas no Capítulo 4, bem como suas respectivas discussões. Tais resultados foram gerados levando-se em consideração somente o consumo de energia no processo de absorção de CO_2 , sem levar em consideração aspectos como OPEX e CAPEX. Assim, primeiramente é feita a validação do cálculo da exergia implementado no Aspen HYSYS e do consumo de energia no processo. Após, determina-se a temperatura média termodinâmica do vapor d'água.

É feita a escolha do indicador de eficiência a ser utilizado nas análises exergéticas. Então, de posse do indicador de eficiência escolhido, aplica-se a análise exérgica ao processo de absorção para quatro concentrações de CO_2 no gás a ser tratado, variando-se doze variáveis operacionais. Isto foi feito com a finalidade de identificar as variáveis mais convenientes a serem ajustadas no processo, tornando-o mais eficiente.

Realiza-se uma análise comparativa entre o consumo de energia resultante da captura de CO_2 , através do processo de absorção, na indústria do cimento e diretamente do ar atmosférico. Isto foi feito de modo a verificar se é vantajosa, do ponto de vista energético, a aplicação do processo de absorção para a captura de CO_2 do ar. Por fim, é feito um estudo de caso para a indústria do cimento, visando um aumento na eficiência de captura de CO_2 e uma redução do consumo de energia e da irreversibilidade no processo.

5.1 Validação das Simulações

5.1.1 Cálculo da Exergia

Os valores de exergia retirados de ABDOLLAHI-DEMNEH *et al.* [24] e aqueles obtidos no presente trabalho através do algoritmo implementado no simulador de processos Aspen HYSYS, para a corrente exemplo 1, podem ser conferidos na Tabela

5.1:

Tabela 5.1: Resultados para a corrente exemplo 1 retirados de ABDOLLAHI-DEMNEH *et al.* [24] e obtidos no presente trabalho.

Variável	ABDOLLAHI-DEMNEH <i>et al.</i> [24]	Presente trabalho
Exergia física [kW]	1.287,40	1.288,11
Exergia química [kW]	2.446,30	2.448,65
Exergia [kW]	3.733,70	3.736,77

Pode-se observar, pela Tabela 5.1, que no caso da corrente exemplo 1 os valores das variáveis obtidos no presente trabalho se mostraram semelhantes àqueles extraídos do artigo. O valor de exergia física do presente trabalho apresentou um erro de 0,06% em relação ao valor do artigo. Quanto à exergia química, verificou-se um erro de 0,1% do valor relativo ao presente trabalho em relação ao valor do artigo. Já o valor de exergia do presente trabalho apresentou um erro de 0,08% em relação ao valor do artigo.

No tocante à corrente exemplo 2, seus valores de exergia retirados do artigo e aqueles obtidos no presente trabalho por meio do simulador podem ser conferidos na Tabela 5.2

Tabela 5.2: Resultados para a corrente exemplo 2 retirados de ABDOLLAHI-DEMNEH *et al.* [24] e obtidos no presente trabalho.

Variável	ABDOLLAHI-DEMNEH <i>et al.</i> [24]	Presente trabalho
Exergia física [kW]	1.376,50	1.372,57
Exergia química [kW]	118.437,10	118.458,72
Exergia [kW]	119.813,60	119.831,28

Tal como ocorreu para o caso da corrente exemplo 1, verifica-se na Tabela 5.2 que, no caso da corrente exemplo 2, os valores das variáveis obtidos no presente trabalho apresentaram semelhança com aqueles retirados do artigo. O valor de exergia física do presente trabalho mostrou um erro de 0,28% em relação ao valor do artigo. Quanto à exergia química, o valor relativo ao presente trabalho mostrou um erro de 0,02% em relação ao valor do artigo. Já o valor de exergia do presente trabalho mostrou um erro de 0,01% em relação ao valor do artigo.

Tendo em vista que, tanto para a corrente exemplo 1 quanto para a corrente exemplo 2, os resultados não apresentaram um erro relativo expressivo, foi possível validar o cálculo da exergia implementado no simulador.

5.1.2 Consumo de Energia no Processo

Os valores do consumo de energia no processo de absorção de CO_2 , além de outros valores, que foram retirados de GERVASI *et al.* [8] e aqueles obtidos no presente

trabalho por meio do simulador de processos Aspen HYSYS podem ser conferidos na Tabela 5.3:

Tabela 5.3: Resultados retirados de GERVASI *et al.* [8] e obtidos no presente trabalho.

Variável	GERVASI <i>et al.</i> [8]	Presente trabalho
Fração molar de CO_2 no gás que deixa a coluna de absorção [-]	0,044	0,050
Fração molar de N_2 no gás que deixa a coluna de absorção [-]	0,865	0,864
Fração molar de O_2 no gás que deixa a coluna de absorção [-]	0,030	0,030
Fração molar de H_2O no gás que deixa a coluna de absorção [-]	0,061	0,057
Fração molar de MEA no gás que deixa a coluna de absorção [-]	$1,97 \cdot 10^{-4}$	0
Fração molar de CO_2 no gás que deixa a coluna de destilação [-]	0,980	0,980
Fração molar de N_2 no gás que deixa a coluna de destilação [-]	$2,92 \cdot 10^{-4}$	$3,00 \cdot 10^{-4}$
Fração molar de O_2 no gás que deixa a coluna de destilação [-]	$1,85 \cdot 10^{-5}$	0
Fração molar de H_2O no gás que deixa a coluna de destilação [-]	0,019	0,020
Fração molar de MEA no gás que deixa a coluna de destilação [-]	$2,03 \cdot 10^{-7}$	0
Fração mássica de MEA no solvente que deixa a coluna de absorção [-]	0,283	0,269
Razão molar entre o CO_2 e o MEA presentes no solvente que deixa a coluna de absorção [-]	0,496	0,496
Temperatura do solvente que deixa a coluna de absorção [$^{\circ}C$]	55,5	61,1
Fração mássica de MEA no solvente que deixa a coluna de destilação [-]	0,294	0,280
Razão molar entre o CO_2 e o MEA presentes no solvente que deixa a coluna de destilação [-]	0,307	0,302
Temperatura do solvente que deixa a coluna de destilação [$^{\circ}C$]	116,8	116,2
Energia retirada no condensador [GJ/t de CO_2 capturado]	1,19	1,17
Energia fornecida pelo refeedor [GJ/t de CO_2 capturado]	3,71	3,92

Conforme pode ser observado na Tabela 5.3, os valores das variáveis obtidos no presente trabalho se mostraram semelhantes àqueles retirados de GERVASI *et al.* [8].

Especificamente em relação ao consumo de energia no processo, o valor do presente trabalho para a energia retirada no condensador apresentou um erro de 1,68% em relação ao valor retirado do artigo, enquanto que, para a energia fornecida pelo refulvedor, tal erro foi de 5,66%. Com isto, constata-se que os erros relativos para a validação do consumo de energia foram consideravelmente superiores aos erros para a validação do cálculo da exergia, os quais foram todos inferiores a 1%. Isto se justifica porque, no caso do cálculo da exergia, as simulações envolveram somente correntes de processo. Já no caso do consumo de energia, as simulações envolveram o processo como um todo, havendo uma maior quantidade de condições operacionais envolvidas, o que resulta em um erro relativo maior. No entanto, tendo em vista que os resultados não apresentaram um erro relativo expressivo, foi possível validar o consumo de energia do processo nas simulações.

5.2 Determinação da Temperatura Média Termodinâmica do Vapor d'Água

A Figura 5.1 mostra os gráficos da temperatura média termodinâmica e da eficiência de Carnot do vapor d'água em função da pressão:

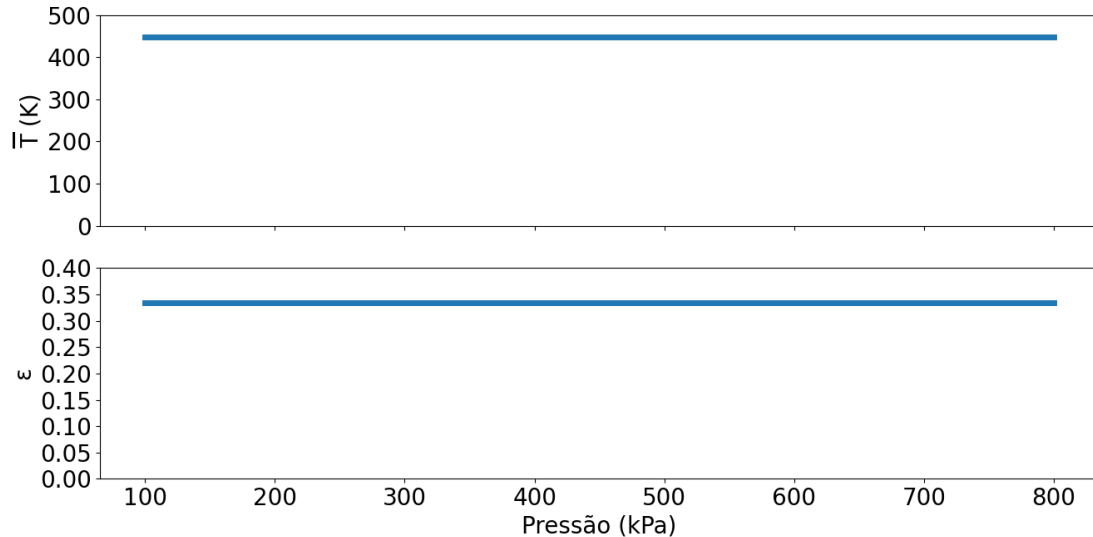


Figura 5.1: Temperatura média termodinâmica e eficiência de Carnot do vapor d'água em função da pressão.

Constata-se, pela Figura 5.1, que a temperatura média termodinâmica e a eficiência de Carnot do vapor d'água praticamente não sofrem alterações na faixa de pressão adotada. Assim, devido à baixa sensibilidade da temperatura média termodinâmica em relação à pressão, é possível adotar para a mesma um valor constante e equivalente a 447,65 K para as condições adotadas, sendo este o valor da tem-

peratura média termodinâmica utilizado em todos os trocadores de calor que usam vapor d'água de média pressão como utilidade no presente trabalho. Deste modo, foi possível contornar o problema de não haver acesso às propriedades das correntes de utilidade no simulador de processos Aspen HYSYS.

5.3 Escolha dos Indicadores de Eficiência

5.3.1 Coluna de Absorção

A Figura 5.2 mostra a irreversibilidade da coluna de absorção em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora:

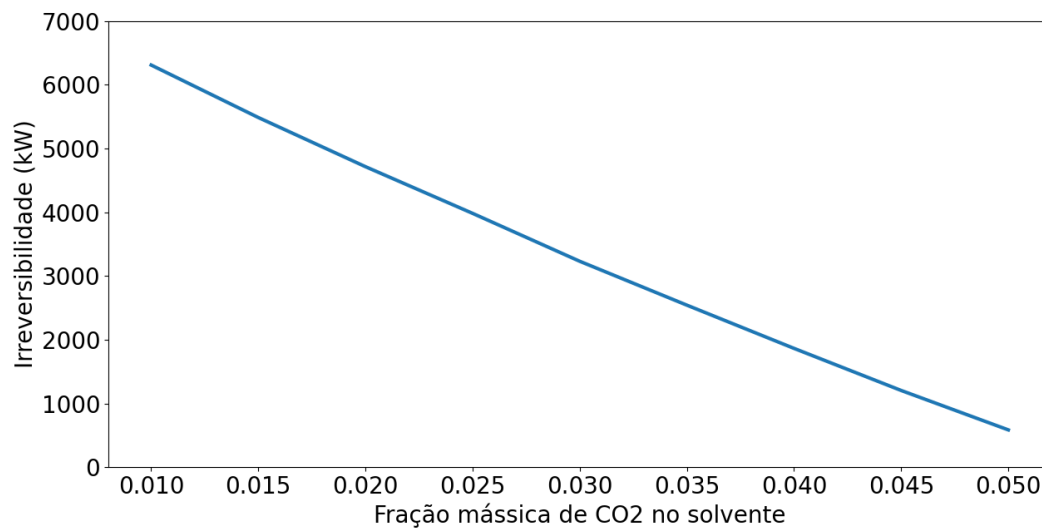


Figura 5.2: Irreversibilidade da coluna de absorção em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora.

Precebe-se, pela Figura 5.2, que a irreversibilidade da absorvedora diminui conforme se aumenta a fração mássica de CO_2 no solvente, apresentando elevada sensibilidade à referida variável operacional e, portanto, mostrando-se um indicador de eficiência adequado a ser utilizado nas análises exergéticas.

Quanto à Figura 5.3, esta mostra a eficiência exergética da coluna de absorção em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora:

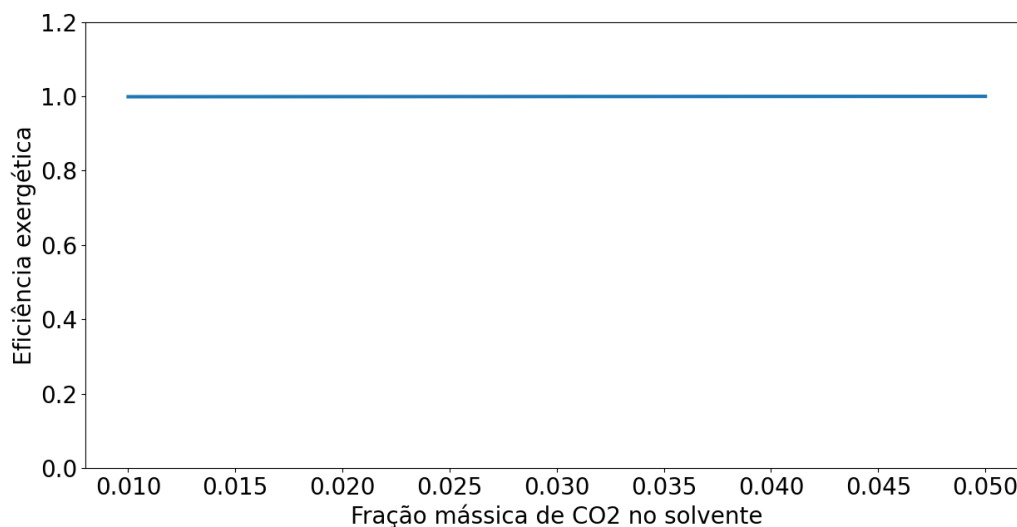


Figura 5.3: Eficiência exergética da coluna de absorção em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora.

É possível verificar, na Figura 5.3, que a eficiência exergética da coluna de absorção permanece estagnada em um valor próximo a 1 em toda a faixa de variação da fração mássica de CO_2 no solvente. No entanto, isto não significa que a coluna está operando de forma eficiente. Assim, para encontrar a razão para que isto ocorra, tomou-se o valor da fração mássica de CO_2 no solvente igual a 0,01 e, para tal valor, dividiu-se a exergia das correntes da absorvedora nas contribuições física, química de mistura e química de reação, obtendo-se o gráfico da Figura 5.4:

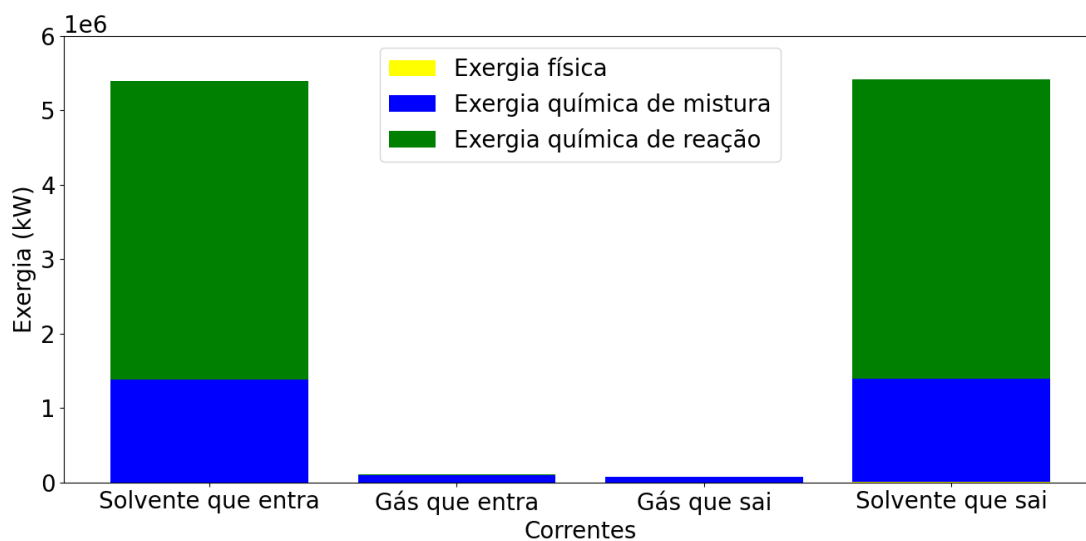


Figura 5.4: Gráfico de barras representativo dos componentes da exergia das correntes relativas à coluna de absorção.

Percebe-se, na Figura 5.4, que os maiores valores de exergia correspondem às exergias químicas das correntes de solvente que entra e que deixa a coluna de absorção, sobretudo no que se refere à contribuição de reação. Desta forma, constata-se que a explicação para a eficiência exergética ser sempre próxima de 1 é que as exergias químicas das correntes líquidas possuem valores elevados e semelhantes, o que inviabiliza o uso da eficiência exergética como indicador de eficiência para a análise exergética.

No tocante à Figura 5.5, esta mostra a irreversibilidade e a eficiência exergética da coluna de absorção, em suas formas alternativas propostas por MOHAMADI-BAGHMOLAEI *et al.* [44], em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora. Tal figura foi gerada aplicando-se a máquina de Carnot a cada prato da coluna.

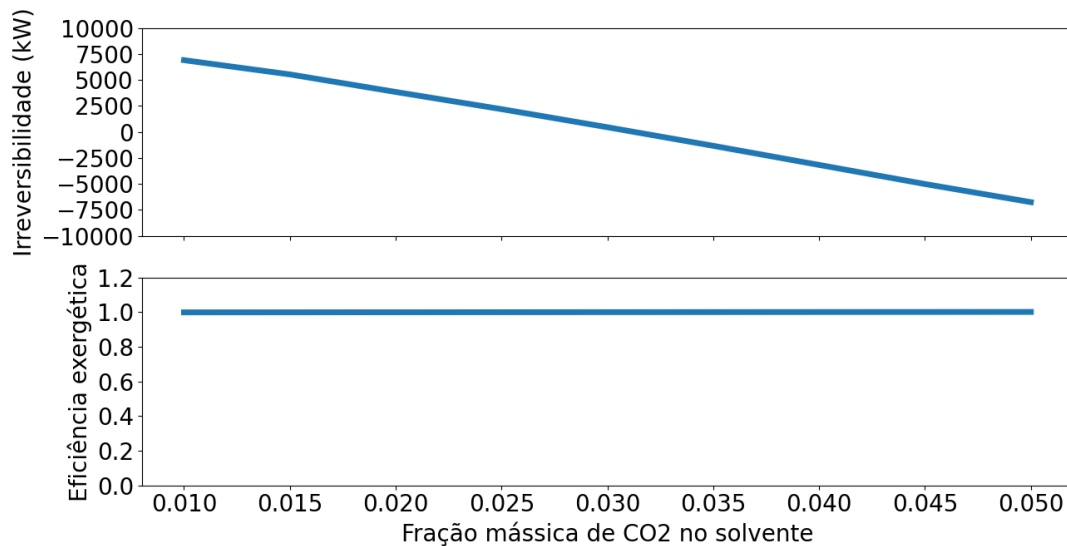


Figura 5.5: Irreversibilidade e eficiência exergética da coluna de absorção, em suas formas alternativas propostas por MOHAMADI-BAGHMOLAEI *et al.* [44], em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora (aplicação da máquina de Carnot a cada prato da coluna).

Constata-se, na Figura 5.5, que a irreversibilidade da coluna de absorção atinge valores negativos e a eficiência exergética da coluna atinge valores superiores a 1 para maiores valores da fração mássica de CO_2 no solvente, o que não faz sentido, uma vez que a exergia é sempre destruída em processos. Assim, têm-se que os indicadores de eficiência propostos por MOHAMADI-BAGHMOLAEI *et al.* [44] não são adequados para análise exergética se a máquina de Carnot for aplicada a cada prato da coluna de absorção.

Em relação à Figura 5.6, esta também mostra a irreversibilidade e a eficiência exergética da coluna de absorção, em suas formas alternativas propostas por MOHAMADI-BAGHMOLAEI *et al.* [44], em função da fração mássica de CO_2 no

solvente que entra na absorvedora. Porém, tal figura foi gerada aplicando-se a máquina de Carnot à coluna como um todo.

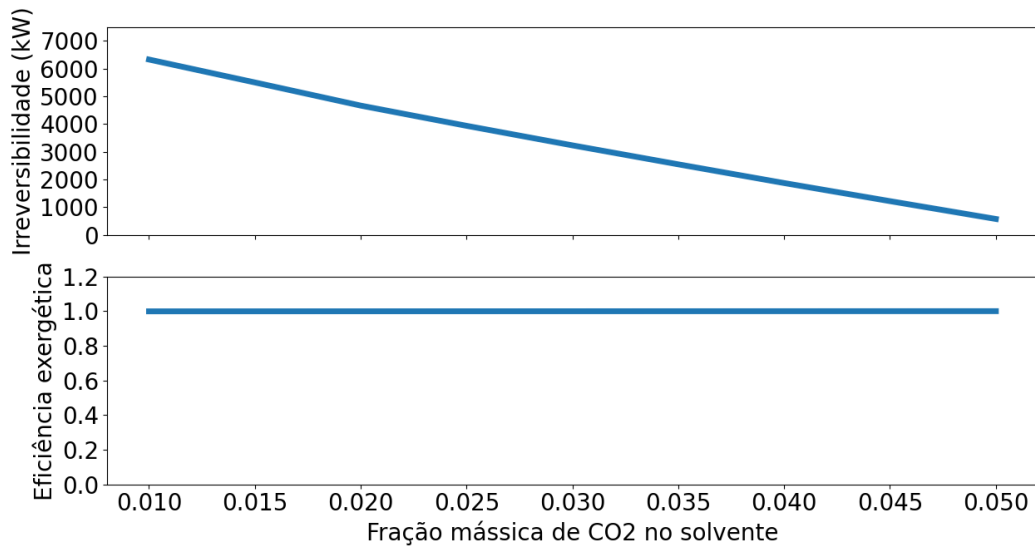


Figura 5.6: Irreversibilidade e eficiência exergética da coluna de absorção, em suas formas alternativas propostas por MOHAMADI-BAGHMOLAEI *et al.* [44], em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora (aplicação da máquina de Carnot à coluna como um todo).

Percebe-se, pela Figura 5.6, que a irreversibilidade da coluna de absorção apresentou comportamento semelhante ao da Figura 5.2, enquanto a eficiência exergética da coluna apresentou comportamento semelhante ao da Figura 5.3. Isto se deve ao fato de que o valor de exergia relacionado à perda de calor da coluna de absorção é desprezível se comparado aos valores de exergia das correntes de processo.

Finalmente, a Figura 5.7 mostra a eficiência exergética da coluna de absorção, em sua forma alternativa proposta por EBRAHIMI *et al.* [39], em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora:

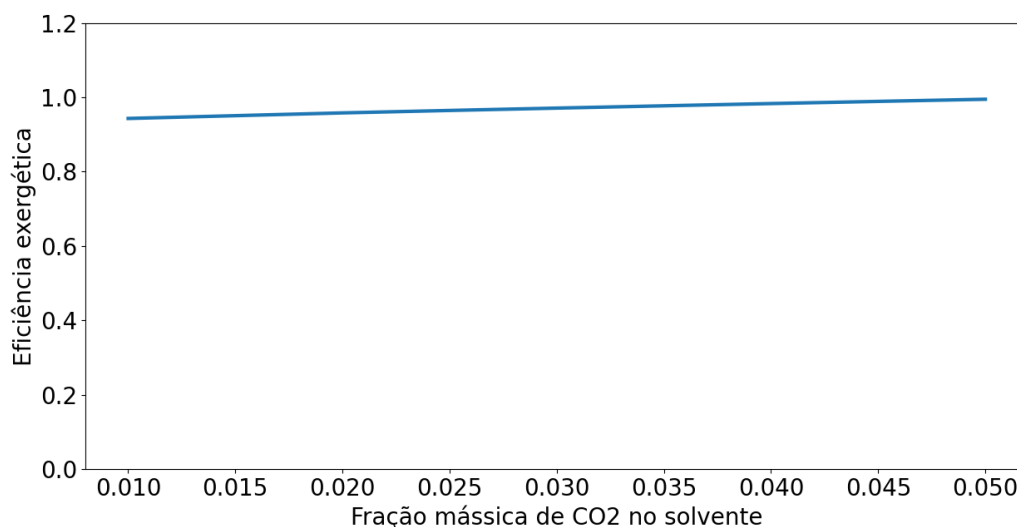


Figura 5.7: Eficiência exergética da coluna de absorção, em sua forma alternativa proposta por EBRAHIMI *et al.* [39], em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora.

Verifica-se, na Figura 5.7, alguma sensibilidade da eficiência exergética da coluna de absorção à variação da fração mássica de CO_2 no solvente. No entanto, tal sensibilidade é insuficiente para que este indicador de eficiência seja utilizado em análises exergéticas.

Após o teste dos indicadores de eficiência propostos para a coluna de absorção, escolheu-se a irreversibilidade para ser o indicador utilizado nas análises exergéticas, desconsiderando-se as perdas de calor da coluna para fins de simplificação de cálculo. Assim, a irreversibilidade da absorvedora foi calculada no simulador de processos Aspen HYSYS por meio de variáveis do usuário, sendo a programação de tal variável realizada através de *spreadsheet*, as quais correspondem a planilhas disponibilizadas pelo simulador para cálculos. As variáveis podem ser importadas e exportadas usando tal ferramenta.

5.3.2 Coluna de Destilação

A Figura 5.8 mostra a irreversibilidade da coluna de destilação em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora:

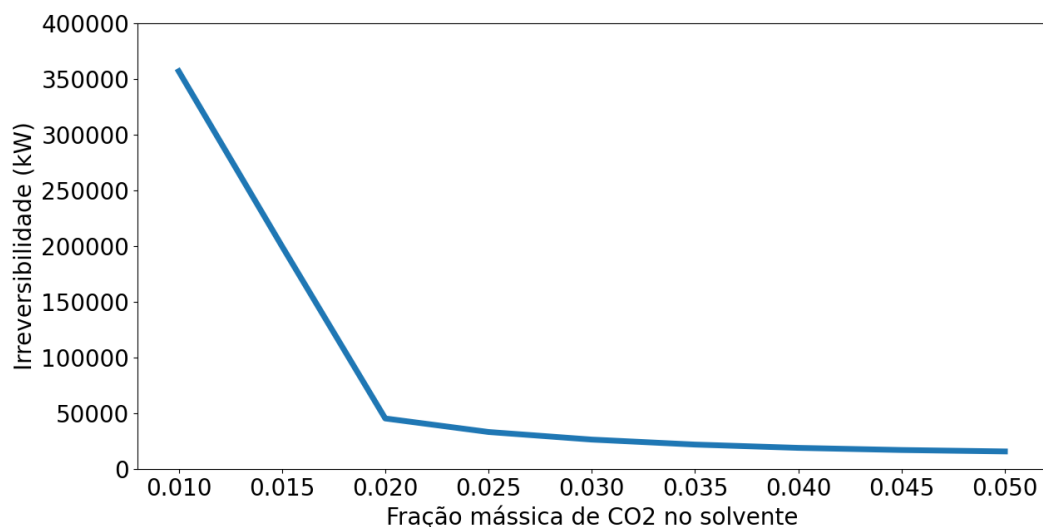


Figura 5.8: Irreversibilidade da coluna de destilação em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora.

Verifica-se, na Figura 5.8, que a irreversibilidade da coluna de destilação diminui conforme de aumenta a fração mássica de CO_2 no solvente. Isto acontece porque, ao se permitir que o solvente regenerado possua uma maior concentração de CO_2 , o refulvador da coluna de destilação precisa fornecer menos energia para regeneração do solvente, fazendo com que a irreversibilidade da coluna diminua. Assim, observa-se que a irreversibilidade da retificadora apresenta elevada sensibilidade à fração mássica de CO_2 no solvente, mostrando-se um indicador de eficiência adequado a ser utilizado nas análises exergéticas.

Quanto à Figura 5.9, esta mostra a eficiência racional da coluna de destilação em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora:

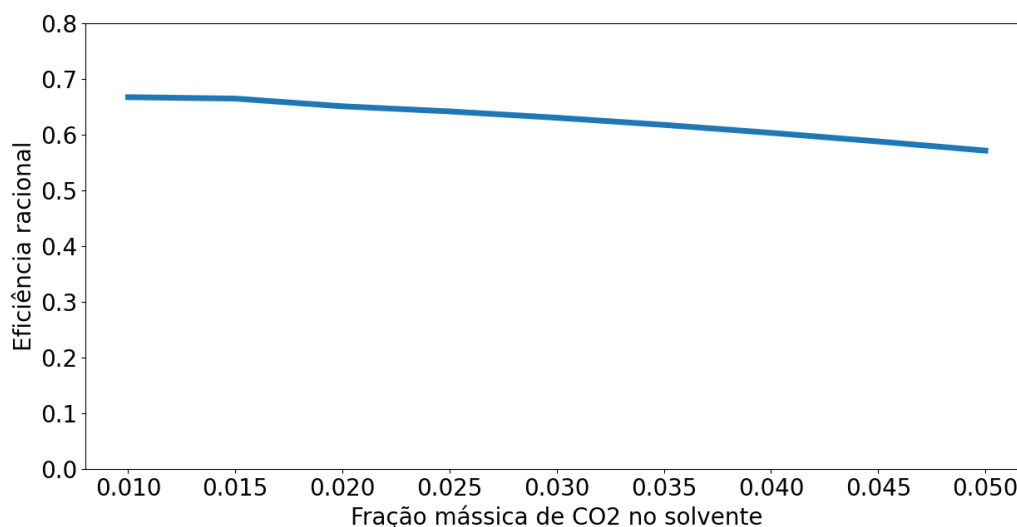


Figura 5.9: Eficiência racional da coluna de destilação em função da fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora.

Observa-se, na Figura 5.9, que a eficiência racional da coluna de destilação possui certa sensibilidade em relação à fração mássica de CO_2 no solvente. Porém, tal sensibilidade é insuficiente para que este indicador de eficiência seja utilizado em análises exergéticas.

Após os testes dos indicadores de eficiência propostos para a coluna de destilação, escolheu-se a irreversibilidade para ser o indicador utilizado nas análises exergéticas. Assim, a irreversibilidade da retificadora foi calculada no simulador de processos Aspen HYSYS por meio de variáveis do usuário, sendo a programação de tal variável realizada através de *spreadsheet*, tal qual ocorreu pro caso da absorvedora. Devido ao fato de não ser possível programar variáveis do usuário para o condensador e o refeedor da coluna de destilação no simulador de processos Aspen HYSYS, o cálculo das exergias das correntes de energia para tais equipamentos também teve de ser feito no *spreadsheet*.

5.4 Análise Exergética da Captura de Gás Carbônico para Diferentes Concentrações do Gás

De posse dos resultados obtidos na Seção 5.3, o indicador de eficiência utilizado nas análises exergéticas da presente seção foi a irreversibilidade. Tal indicador foi utilizado em sua forma intensiva, correspondendo à irreversibilidade total em um dado equipamento dividida pela vazão molar de CO_2 capturado. Isto foi feito com o intuito de verificar se o aumento da captura de CO_2 compensa o aumento da irreversibilidade em uma dada operação unitária.

5.4.1 Efeito da Razão L/G

A razão L/G corresponde à razão entre líquido e gás na coluna de absorção, ou seja, é a razão entre a vazão de solvente e a vazão de gás que entram na absorvedora, em base molar. Assim, a vazão do gás foi mantida fixa, variando-se somente a vazão de solvente. Deste modo, a Figura 5.10 apresenta a irreversibilidade da coluna de absorção em função da razão L/G, para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

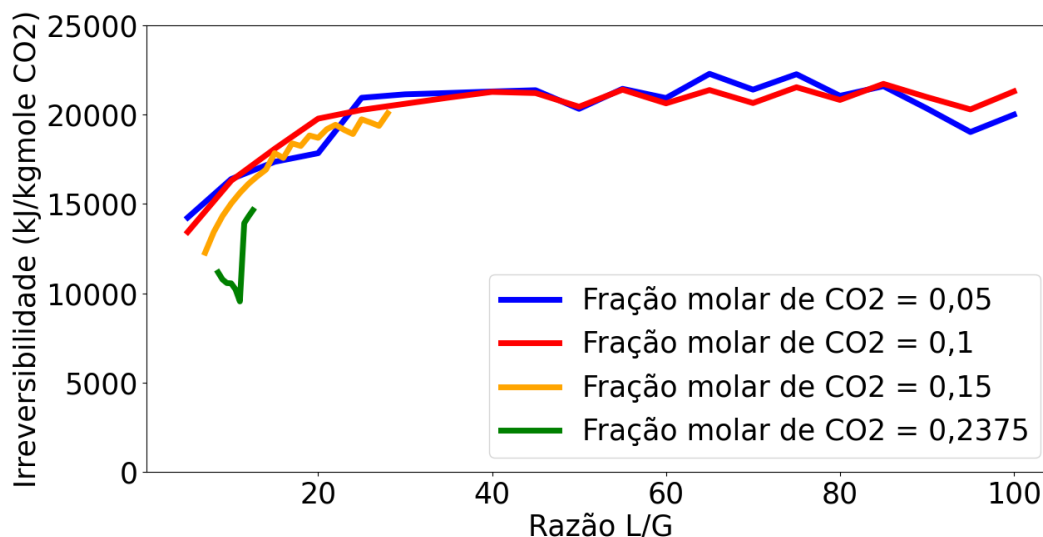


Figura 5.10: Irreversibilidade da coluna de absorção em função da razão L/G, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Na Figura 5.10 observa-se que, para as frações molares de 0,05 e 0,1, a irreversibilidade da absorvedora aumenta conforme se aumenta a razão L/G até um valor de 45, havendo uma oscilação da irreversibilidade a partir de tal valor. Constatase também que tais frações molares apresentaram o maior intervalo de variação da razão L/G. No tocante à fração molar de 0,15 verifica-se, de um modo geral, que a irreversibilidade da absorvedora aumenta ao se aumentar a razão L/G. Por fim, no tocante à fração molar de 0,2375, esta apresenta o menor intervalo de variação da razão L/G, havendo um mínimo de irreversibilidade em uma razão equivalente a 11.

As oscilações observadas na Figura 5.10 possuem como provável causa o fato de as exergias das correntes líquidas possuírem uma ordem de grandeza significativamente superior às exergias das correntes gasosas. Assim, tomando-se a fração molar de 0,05, tal discrepância pode ser observada no gráfico semilogarítmico da Figura 5.11:

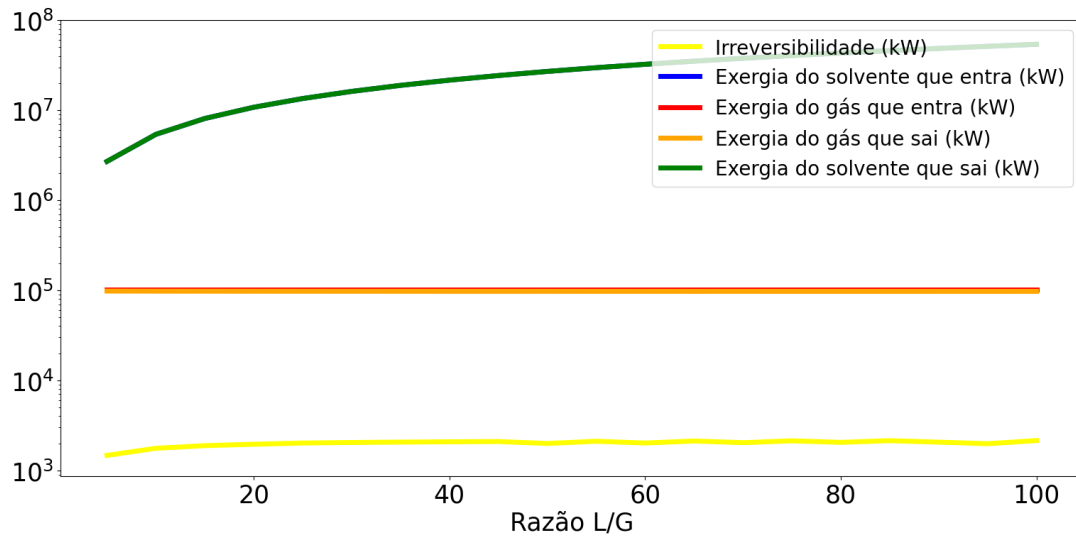


Figura 5.11: Irreversibilidade da absorvedora e exergias de suas correntes em função da razão L/G.

Conforme é possível perceber na Figura 5.11, as exergias das correntes líquidas possuem uma ordem de grandeza que varia entre 10^6 e 10^7 , enquanto as correntes gasosas possuem uma ordem de grandeza em torno de 10^5 . Com isto, as exergias das correntes líquidas impactam de forma mais expressiva a irreversibilidade da absorvedora, e como a irreversibilidade consiste simplesmente na diferença entre a exergia na entrada e a exergia na saída, tal subtração entre valores tão altos de exergia tende a provocar oscilações na irreversibilidade.

Em relação à coluna de destilação, a Figura 5.12 mostra a irreversibilidade da coluna em função da razão L/G para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

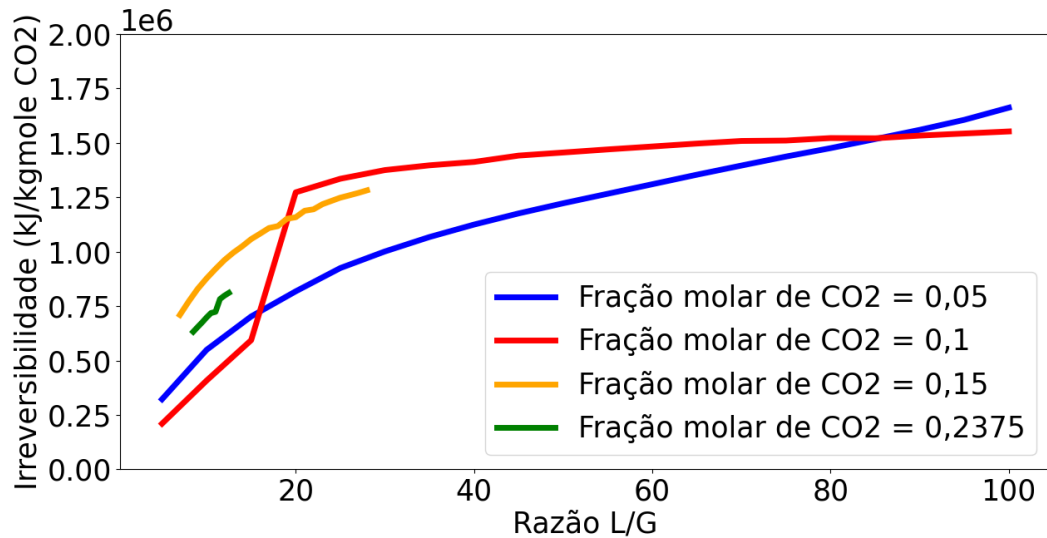


Figura 5.12: Irreversibilidade da coluna de destilação em função da razão L/G, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Nota-se, pela Figura 5.12, um aumento de irreversibilidade da coluna de destilação conforme se aumenta a razão L/G, para todas as frações molares. Isto se deve ao fato de que, ao se aumentar a razão L/G, ou seja, ao se aumentar a vazão de solvente que entra na absorvedora, mais energia o refeedor deve fornecer para regenerar o solvente na retificadora, resultando em um aumento da irreversibilidade da coluna. Além disso, verifica-se também que as frações molares de 0,05 e 0,1 apresentam o maior intervalo de variação da razão L/G, enquanto a fração molar de 0,2375 apresenta o menor.

5.4.2 Efeito da Fração Mássica de Gás Carbônico no Solvente

Outra variável analisada foi a fração mássica de CO_2 no solvente que entra na absorvedora. Assim, a Figura 5.13 mostra a irreversibilidade da coluna de absorção em função da fração mássica de CO_2 no solvente para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

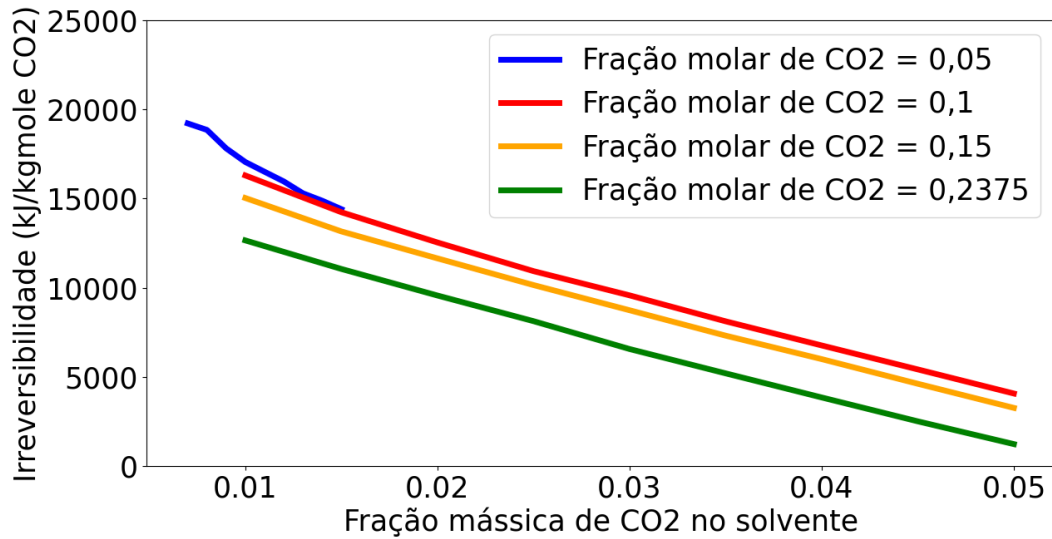


Figura 5.13: Irreversibilidade da coluna de absorção em função da fração mássica de CO_2 no solvente, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Percebe-se, pela Figura 5.13, que a irreversibilidade da coluna de absorção diminui conforme se aumenta a fração mássica de CO_2 no solvente, para todas as frações molares de CO_2 no gás que entra na absorvedora. Também é possível observar que as frações molares de 0,1, 0,15 e 0,2375 apresentam os maiores intervalos de variação da fração mássica de CO_2 no solvente, sendo que o menor intervalo corresponde à fração molar de 0,05.

Quanto à coluna de destilação, a Figura 5.14 apresenta a irreversibilidade da coluna em função da fração mássica de CO_2 no solvente, para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

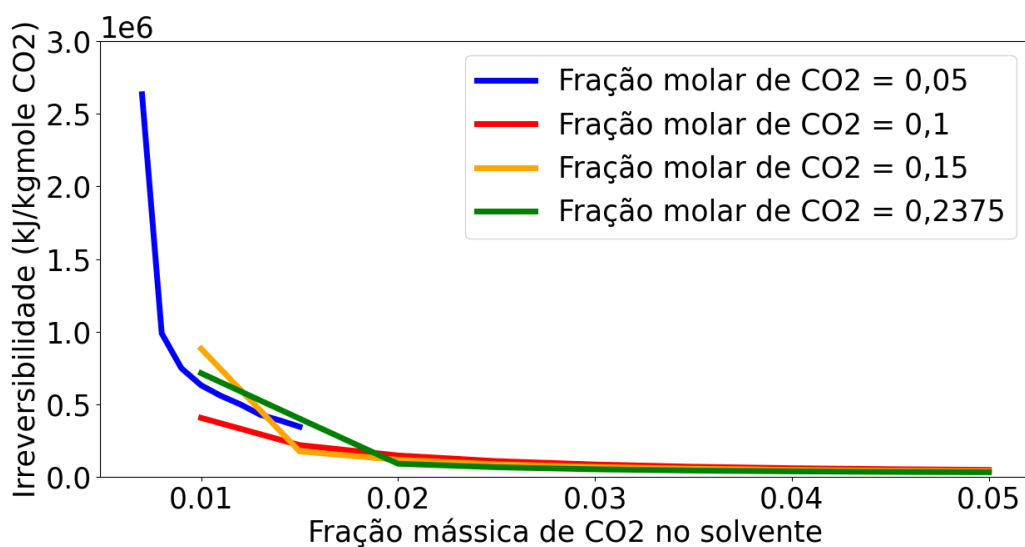


Figura 5.14: Irreversibilidade da coluna de destilação em função da fração mássica de CO_2 no solvente, para as diferentes frações molares de CO_2 .

É possível observar, na Figura 5.14, uma redução da irreversibilidade da coluna de destilação conforme se aumenta a fração mássica de CO_2 no solvente, para todas as frações molares de CO_2 no gás que entra na absorvedora. Isto se deve ao fato de que, ao se permitir uma maior concentração de CO_2 no solvente regenerado, menos energia o refeedor da retificadora precisa fornecer para regenerar o solvente, resultando em uma menor irreversibilidade da coluna. Além disso, observa-se também que as frações molares de 0,1, 0,15 e 0,2375 apresentam o maior intervalo de variação da fração mássica de CO_2 no solvente, enquanto a fração molar de 0,05 apresenta o menor.

5.4.3 Efeito da Temperatura do Solvente

Uma outra variável analisada foi a temperatura do solvente que entra na absorvedora. Desta forma, a Figura 5.15 mostra a irreversibilidade da coluna de absorção em função da temperatura do solvente para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

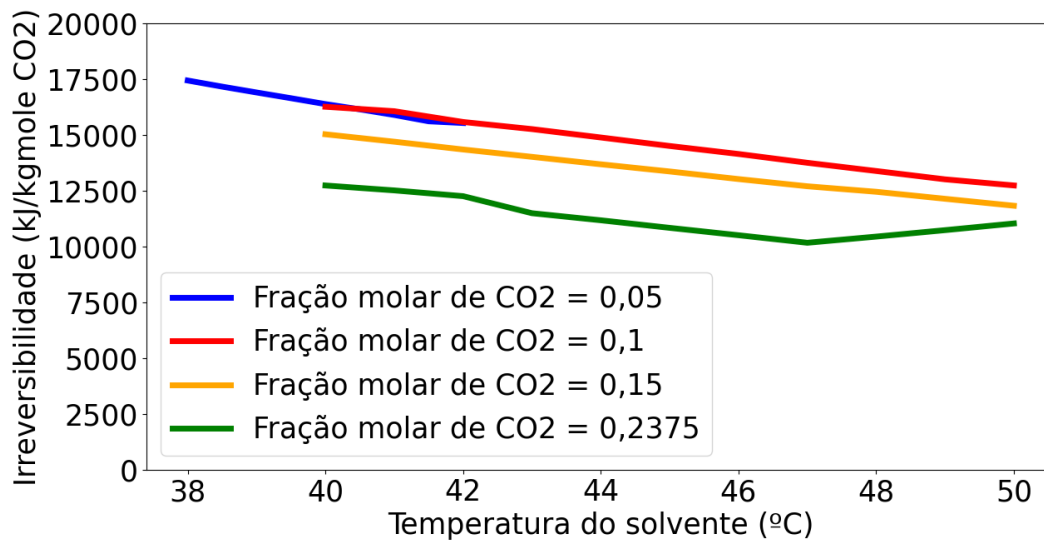


Figura 5.15: Irreversibilidade da coluna de absorção em função da temperatura do solvente, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Constata-se, pela Figura 5.15, que a irreversibilidade da coluna de absorção diminui conforme se aumenta a temperatura do solvente para as frações molares de 0,05, 0,1 e 0,15. Já para a fração molar de 0,2375, observa-se um mínimo de irreversibilidade em uma temperatura de 47°C. Além disso, as frações molares de 0,1, 0,15 e 0,2375 apresentaram o maior intervalo de variação da temperatura do solvente, enquanto a fração molar de 0,05 apresentou o menor.

No tocante à coluna de destilação, a Figura 5.16 mostra a irreversibilidade da coluna em função da temperatura do solvente para as diversas concentrações de CO_2

no gás que entra na absorvedora:

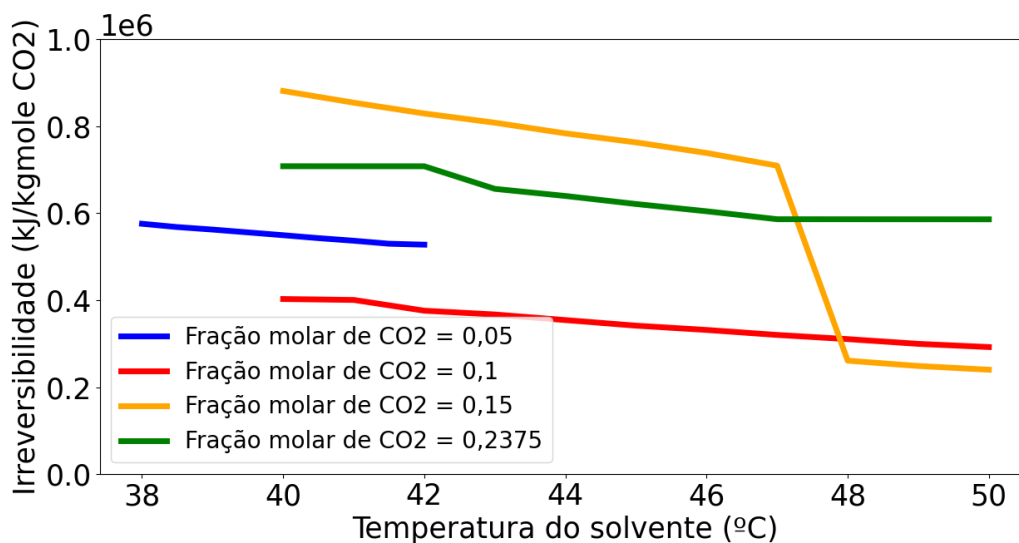


Figura 5.16: Irreversibilidade da coluna de destilação em função da temperatura do solvente, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Verifica-se, na Figura 5.16, que a irreversibilidade da coluna de destilação diminui com o aumento da temperatura do solvente para todas as frações molares, com destaque para a fração molar de 0,15, na qual ocorre queda abrupta da irreversibilidade na temperatura de $47^{\circ}C$. Tal queda abrupta se deve à redução brusca na quantidade de água que entra no refeedor, conforme será melhor detalhado na Seção 5.4.11. Além disso, o menor intervalo de variação da temperatura do solvente corresponde à fração molar de 0,05.

5.4.4 Efeito da Pressão da Absorvedora

Analisou-se também o efeito da pressão da coluna de absorção. Para isto, desprezou-se a queda de pressão na coluna. Assim, a Figura 5.17 mostra a irreversibilidade da coluna de absorção em função de sua pressão de operação para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

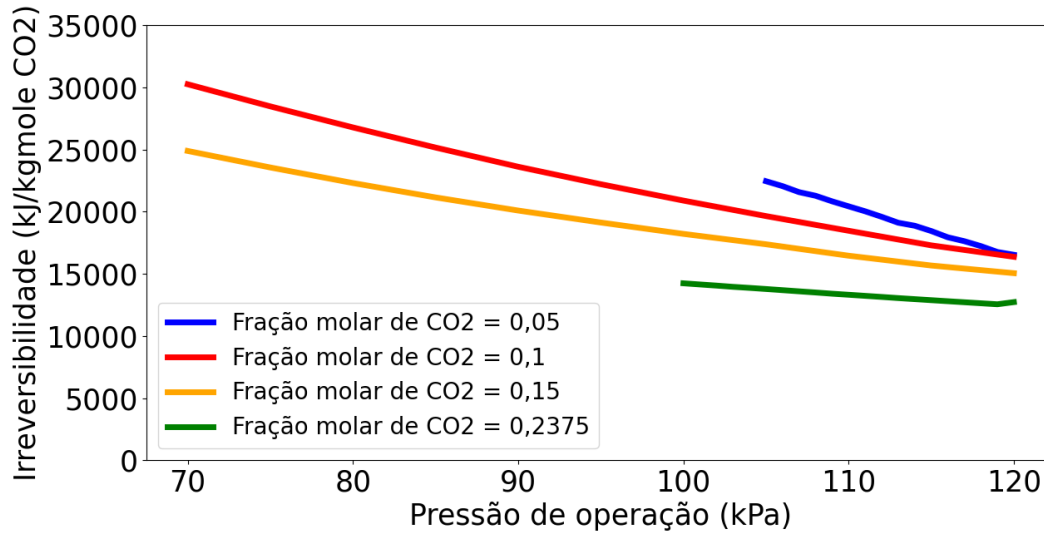


Figura 5.17: Irreversibilidade da coluna de absorção em função de sua pressão de operação, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Precebe-se, pela Figura 5.17, uma redução da irreversibilidade da coluna de absorção conforme se aumenta sua pressão de operação, para todas as frações molares de CO_2 . Isto ocorre porque uma das maiores fontes de irreversibilidade em operações unitárias é a diferença de pressão. Desta forma, uma menor diferença de pressão entre a coluna de absorção e suas correntes de entrada leva a uma redução da irreversibilidade na coluna. Além disso, observa-se também que o maior intervalo de variação da pressão de operação da absorvedora corresponde às frações molares de 0,1 e 0,15, enquanto o menor corresponde à fração molar de 0,05.

Quanto à coluna de destilação, a Figura 5.18 apresenta a irreversibilidade da coluna em função da pressão de operação da absorvedora para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na coluna de absorção:

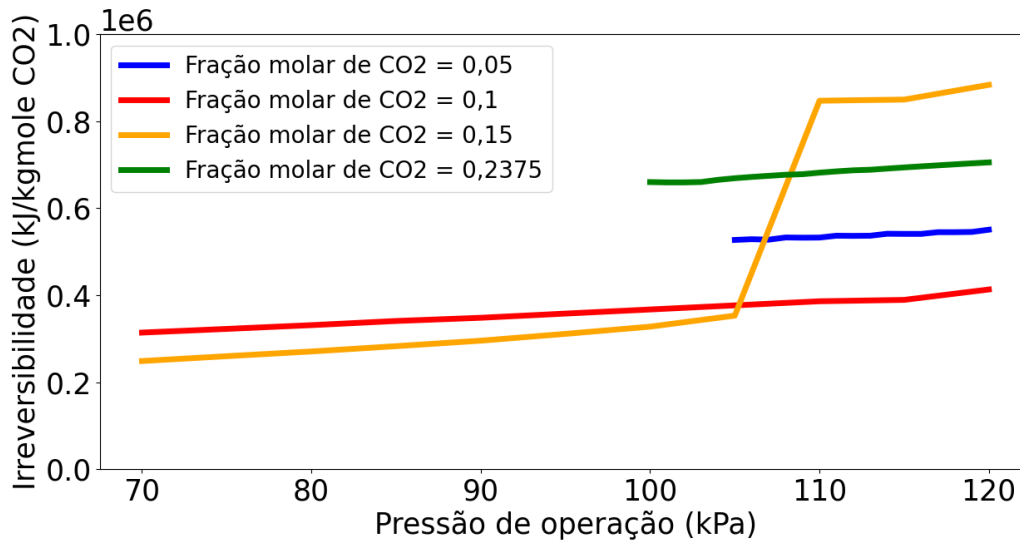


Figura 5.18: Irreversibilidade da coluna de destilação em função da pressão de operação da coluna de absorção, para as diferentes frações molares de CO_2 .

É possível observar, pela Figura 5.18, um aumento da irreversibilidade da coluna de destilação conforme se aumenta a pressão de operação da coluna de absorção, para todas as frações molares de CO_2 , com destaque para a fração molar de 0,15, na qual ocorre aumento brusco de irreversibilidade em uma pressão equivalente a 105 kPa. Tal aumento brusco se deve ao aumento abrupto na quantidade de água que entra no refeedor, conforme será melhor detalhado na Seção 5.4.11. Além disso, o intervalo de variação da pressão de operação da absorvedora foi maior para as frações molares de 0,1 e 0,15, e menor para a fração molar de 0,05.

5.4.5 Efeito do Número de Pratos da Absorvedora

A Figura 5.19 mostra a irreversibilidade da coluna de absorção em função do seu número de pratos para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

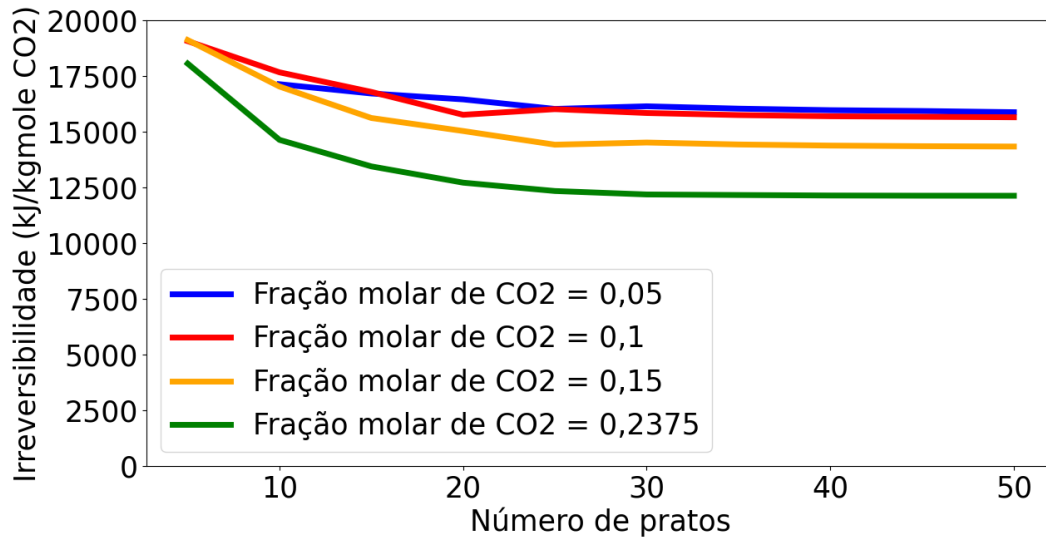


Figura 5.19: Irreversibilidade da coluna de absorção em função do seu número de pratos, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Observa-se, na Figura 5.19, uma redução da irreversibilidade da coluna de absorção conforme se aumenta o seu número de pratos, para todas as frações molares de CO_2 . Isto se deve ao fato de que um aumento do número de pratos da absorvedora leva a um aumento da captura de CO_2 . Assim, como a irreversibilidade intensiva corresponde simplesmente à irreversibilidade total em um dado equipamento dividida pela vazão molar de CO_2 capturado, um aumento na captura de CO_2 leva à redução da irreversibilidade intensiva da absorvedora.

Quanto à coluna de destilação, a Figura 5.20 apresenta a irreversibilidade da coluna em função do número de pratos da absorvedora para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na coluna de absorção:

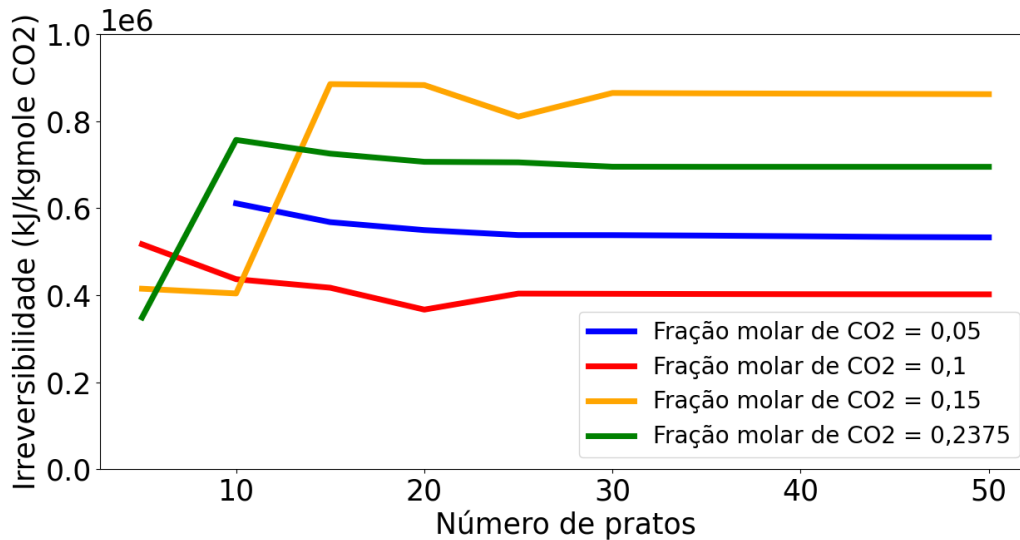


Figura 5.20: Irreversibilidade da coluna de destilação em função do número de pratos da coluna de absorção, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Na Figura 5.20 verifica-se, para a fração molar de 0,05, que a irreversibilidade da coluna de destilação diminui conforme se aumenta o número de pratos da coluna de absorção. Quanto à fração molar de 0,1, nota-se uma redução da irreversibilidade da retificadora até um número de pratos da absorvedora equivalente a 20, não havendo mudanças significativas na irreversibilidade após tal valor. No tocante à fração molar de 0,15, a irreversibilidade da coluna de destilação não se altera de forma expressiva até um número de pratos da coluna de absorção equivalente a 10, após o qual há um aumento até um número de pratos igual a 15, não havendo alterações significativas na irreversibilidade após tal valor. Por fim, em relação à fração molar de 0,2375, constata-se um aumento da irreversibilidade da retificadora até um número de pratos da absorvedora equivalente a 10, não havendo alterações expressivas na irreversibilidade após tal valor.

5.4.6 Efeito do Diâmetro da Absorvedora

A Figura 5.21 mostra a irreversibilidade da coluna de absorção em função de seu diâmetro para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

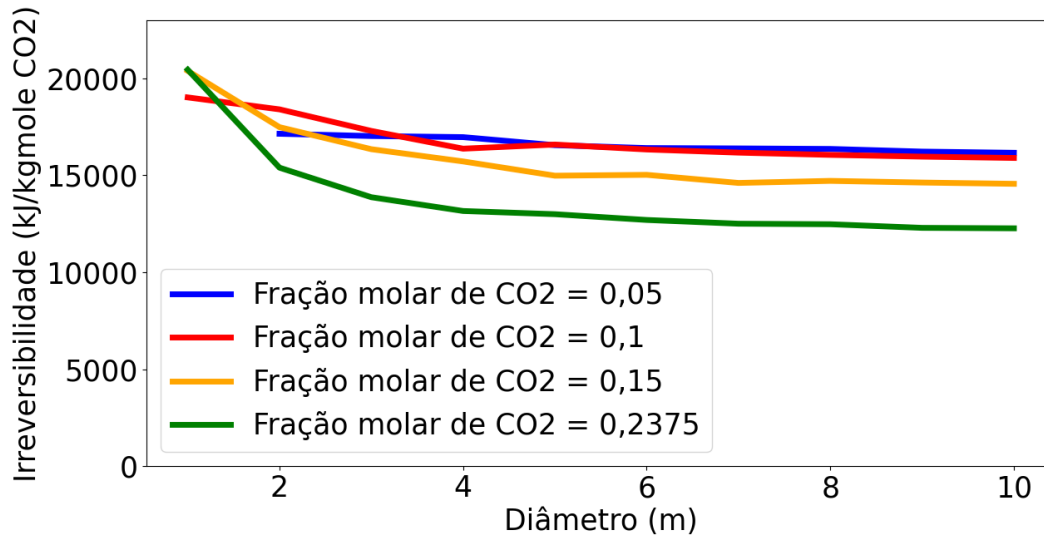


Figura 5.21: Irreversibilidade da coluna de absorção em função de seu diâmetro, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Pode-se constatar, pela Figura 5.21, que a irreversibilidade da coluna de absorção diminui conforme se aumenta seu diâmetro, para todas as frações molares de CO_2 . Isto se deve ao fato de que um aumento do diâmetro da absorvedora leva a um aumento da captura de CO_2 . Assim, como a irreversibilidade intensiva corresponde simplesmente à irreversibilidade total em um dado equipamento dividida pela vazão molar de CO_2 capturado, um aumento na captura de CO_2 leva à redução da irreversibilidade intensiva da absorvedora.

Em relação à coluna de destilação, a Figura 5.22 apresenta a irreversibilidade da coluna em função do diâmetro da absorvedora para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na coluna de absorção:

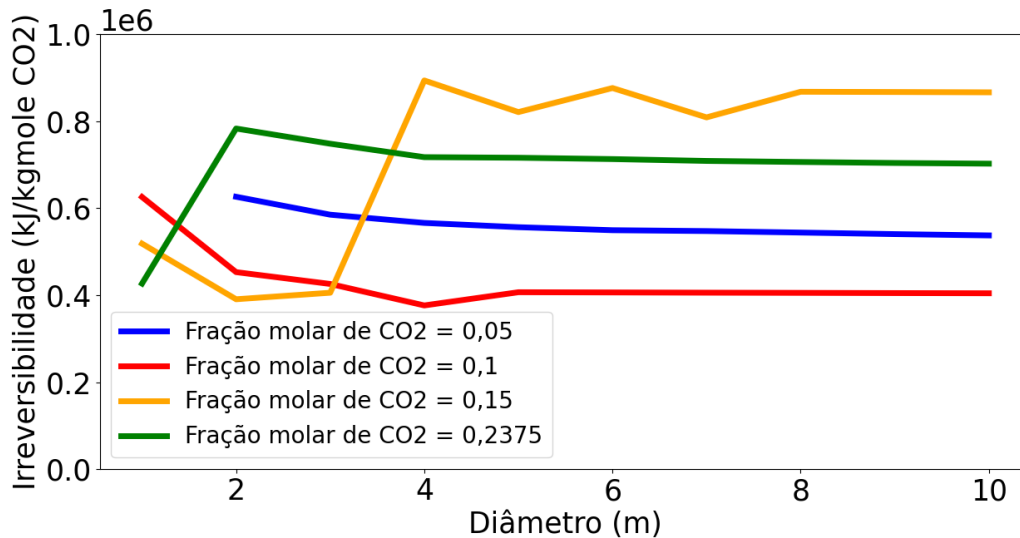


Figura 5.22: Irreversibilidade da coluna de destilação em função do diâmetro da coluna de absorção, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Na Figura 5.22 nota-se, para a fração molar de 0,05, que a irreversibilidade da coluna de destilação diminui conforme se aumenta o diâmetro da coluna de absorção. Em relação à fração molar de 0,1, observa-se que a irreversibilidade da retificadora diminui até um diâmetro da absorvedora equivalente a 4 metros, não havendo mudanças significativas na irreversibilidade após tal valor. No tocante à fração molar de 0,15, percebe-se que a irreversibilidade da coluna de destilação diminui até um diâmetro da coluna de absorção igual a 2 metros, no qual ocorre um mínimo de irreversibilidade. Após isso, a irreversibilidade aumenta até um diâmetro de 4 metros, não havendo alterações expressivas na irreversibilidade após tal valor. Por fim, quanto à fração molar de 0,2375, constata-se que a irreversibilidade da retificadora aumenta até um diâmetro da absorvedora equivalente a 2 metros, não havendo alterações significativas na irreversibilidade após tal valor.

5.4.7 Efeito da Fração Mássica de MEA no Solvente

Verificou-se também o efeito da fração mássica de MEA no solvente que entra na absorvedora. Deste modo, a Figura 5.23 mostra a irreversibilidade da coluna de absorção em função da fração mássica de MEA no solvente para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

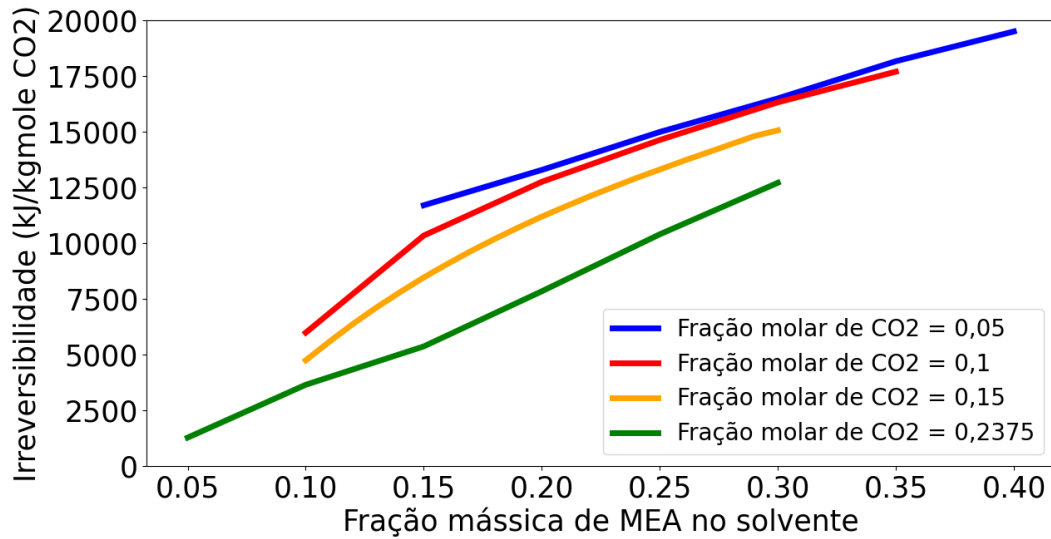


Figura 5.23: Irreversibilidade da coluna de absorção em função da fração mássica de MEA no solvente, para as diferentes frações molares de CO_2 .

É possível observar, na Figura 5.23, um aumento da irreversibilidade da coluna de absorção conforme se aumenta a fração mássica de MEA no solvente, para todas as frações molares de CO_2 .

No tocante à coluna de destilação, a Figura 5.24 apresenta a irreversibilidade da coluna em função da fração mássica de MEA no solvente para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na coluna de absorção:

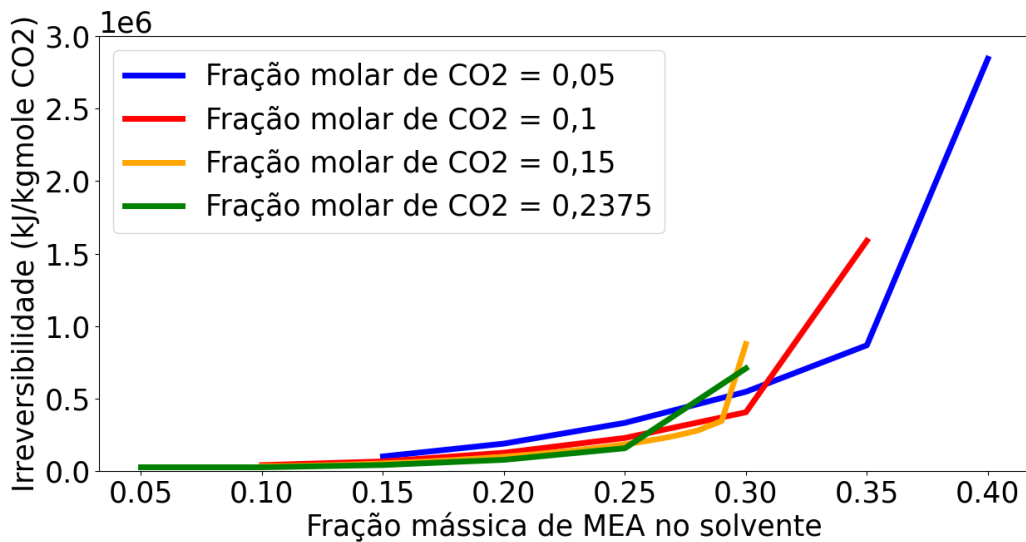


Figura 5.24: Irreversibilidade da coluna de destilação em função da fração mássica de MEA no solvente, para as diferentes frações molares de CO_2 .

É possível constatar, na Figura 5.24, um aumento da irreversibilidade da coluna de destilação conforme se aumenta a fração mássica de MEA no solvente, para todas as frações molares de CO_2 . Isto se deve ao fato de que, quanto maior a concentração

de MEA no solvente, mais energia o refeedor precisa fornecer para regenerar o solvente na retificadora, resultando em uma maior irreversibilidade na coluna.

5.4.8 Efeito da Pressão da Retificadora

Foi analisado também o efeito da pressão da coluna de destilação. Tal qual ocorreu para o caso da absorvedora, desprezou-se a queda de pressão da coluna. Desta forma, a Figura 5.25 mostra a irreversibilidade da coluna de absorção em função da pressão de operação da coluna de destilação para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

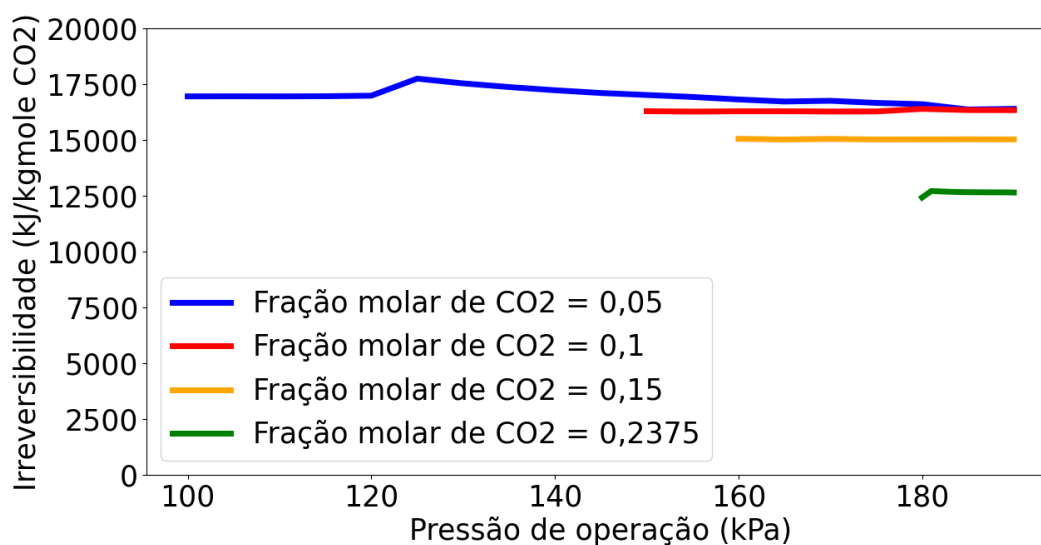


Figura 5.25: Irreversibilidade da coluna de absorção em função da pressão de operação da coluna de destilação, para as diferentes frações molares de CO_2 .

É possível perceber, na Figura 5.25, que a irreversibilidade da coluna de absorção praticamente permanece inalterada conforme se aumenta a pressão de operação da coluna de destilação, para todas as frações molares de CO_2 . Observa-se, também, que o intervalo de variação da pressão de operação da retificadora diminui conforme se aumenta a fração molar de CO_2 no gás que entra na absorvedora.

Quanto à coluna de destilação, a Figura 5.26 apresenta a irreversibilidade da coluna em função de sua pressão de operação para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

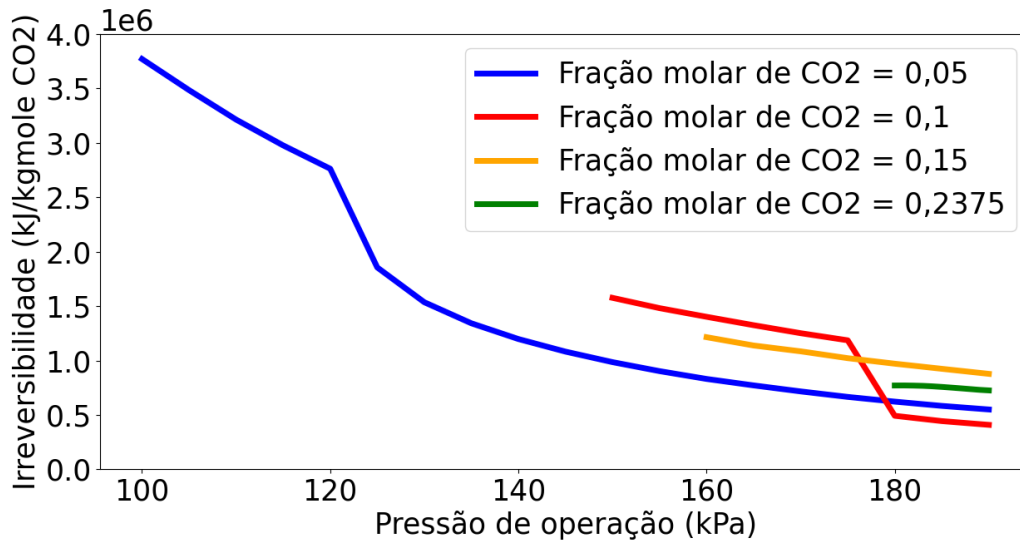


Figura 5.26: Irreversibilidade da coluna de destilação em função de sua pressão de operação, para as diferentes frações molares de CO_2 .

É possível observar, na Figura 5.26, uma redução da irreversibilidade da coluna de destilação conforme se aumenta sua pressão de operação, para todas as frações molares de CO_2 . Isto ocorre porque uma das maiores fontes de irreversibilidade em operações unitárias é a diferença de pressão. Desta forma, uma menor diferença de pressão entre a coluna de destilação e sua carga leva a uma redução da irreversibilidade na coluna. Além disso, nota-se, também, uma redução do intervalo de variação da pressão de operação da retificadora conforme se aumenta a fração molar de CO_2 no gás que entra na absorvedora.

5.4.9 Efeito da Temperatura da Carga

A temperatura da carga da coluna de destilação foi outra variável analisada. Assim, a Figura 5.27 mostra a irreversibilidade da coluna de absorção em função da temperatura da carga para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

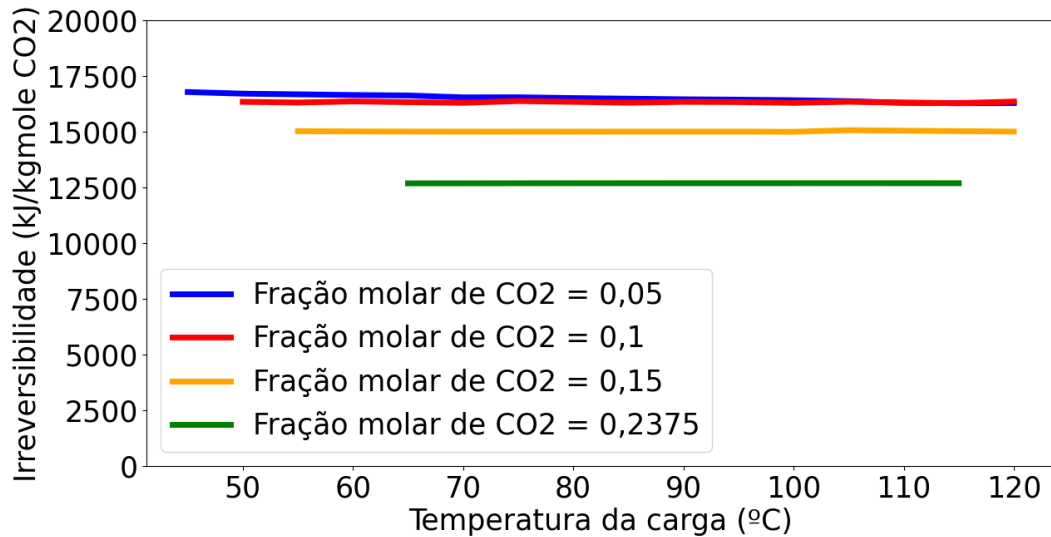


Figura 5.27: Irreversibilidade da coluna de absorção em função da temperatura da carga da coluna de destilação, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Verifica-se, na Figura 5.27, que a irreversibilidade da coluna de absorção praticamente permanece inalterada conforme se aumenta a temperatura da carga da coluna de destilação, para todas as frações molares de CO_2 . Observa-se, também, uma redução do intervalo de variação da temperatura da carga conforme se aumenta a fração molar de CO_2 no gás que entra na absorvedora.

Em relação à coluna de destilação, a Figura 5.28 apresenta a irreversibilidade da coluna em função da temperatura de sua carga para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

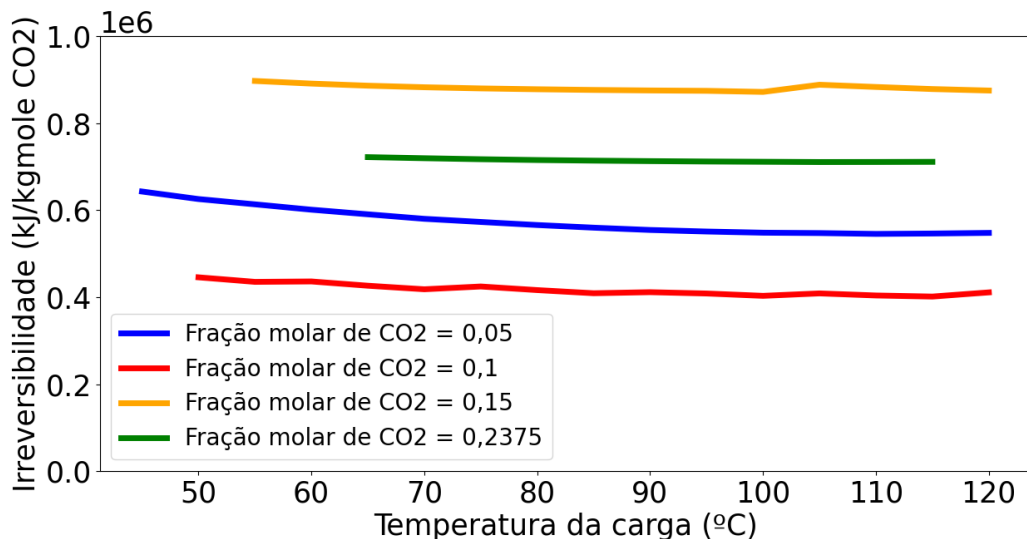


Figura 5.28: Irreversibilidade da coluna de destilação em função da temperatura de sua carga, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Nota-se, na Figura 5.28, que para as frações molares de 0,05 e 0,1 ocorre redução da irreversibilidade da coluna de destilação conforme se aumenta a temperatura de sua carga, enquanto que, para as frações molares de 0,15 e 0,2375, a irreversibilidade da coluna praticamente permanece inalterada ao se aumentar a temperatura da carga. Isto indica que, quanto maior a concentração de CO_2 no gás que entra na absorvedora, menor é a sensibilidade da retificadora à temperatura de sua carga. Assim, nos casos de maior sensibilidade, o comportamento observado se justifica porque, quanto maior a temperatura da carga da retificadora, menos energia o refeedor precisa fornecer para regenerar o solvente, resultando em uma menor irreversibilidade na coluna. Além disso, quanto maior a fração molar de CO_2 , menor o intervalo de variação da temperatura da carga.

5.4.10 Efeito do Prato de Carga

O efeito da localização do prato de carga da coluna de destilação também foi analisado. Vale ressaltar que a contagem dos pratos se inicia a partir do topo da coluna. Com isto, a Figura 5.29 mostra a irreversibilidade da coluna de absorção em função da localização do prato de carga para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

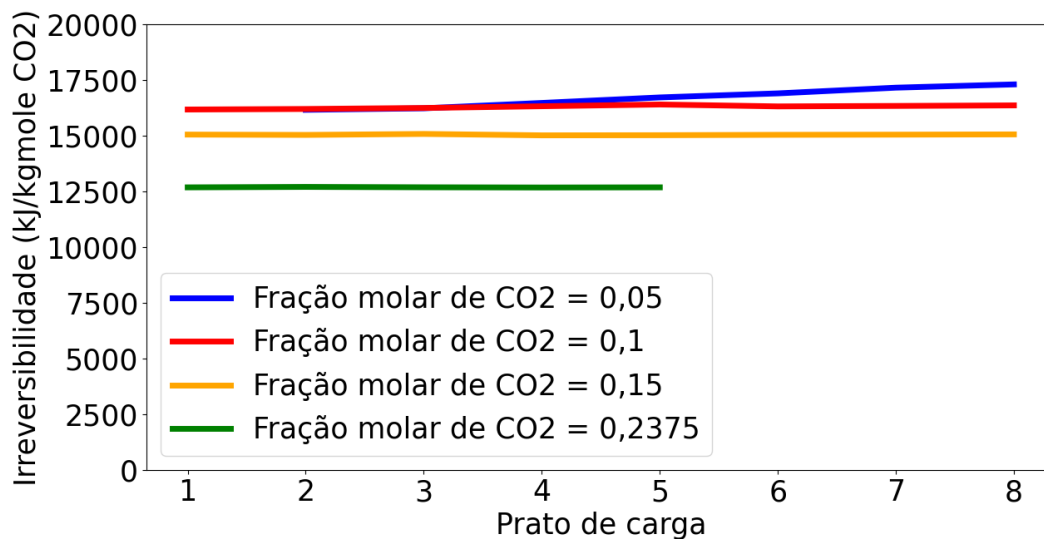


Figura 5.29: Irreversibilidade da coluna de absorção em função da localização do prato de carga da coluna de destilação, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Verifica-se, na Figura 5.29, que a irreversibilidade da coluna de absorção praticamente permanece inalterada conforme se altera a localização do prato de carga da coluna de destilação, para todas as frações molares de CO_2 .

Quanto à coluna de destilação, a Figura 5.30 apresenta a irreversibilidade da coluna em função da localização de seu prato de carga para as diversas concentrações

de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

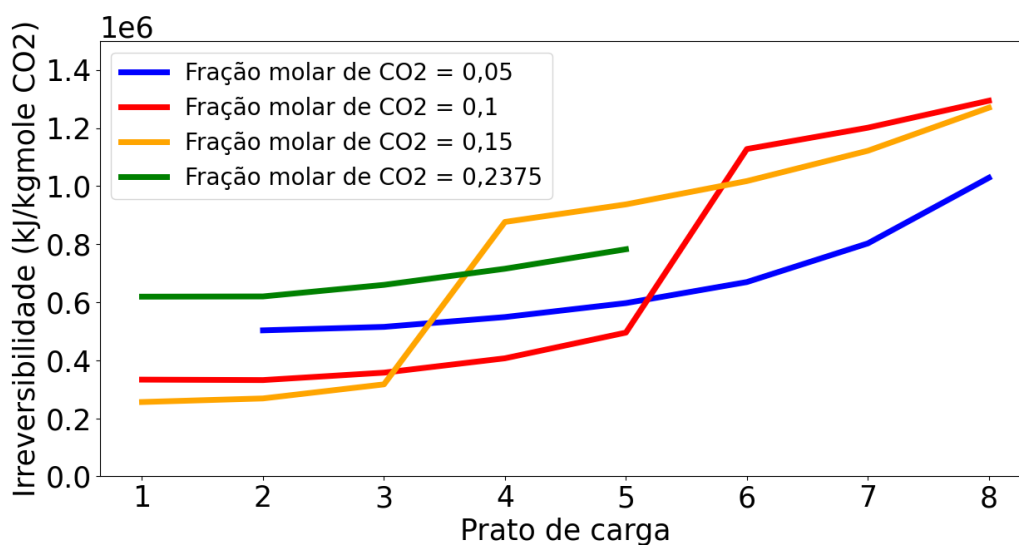


Figura 5.30: Irreversibilidade da coluna de destilação em função da localização de seu prato de carga, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Observa-se, na Figura 5.30, que quanto mais alto o prato de carga da coluna de destilação, menor é sua irreversibilidade para todas as frações molares de CO_2 no gás que entra na absorvedora. Isto se deve ao fato de que, quanto mais alto o prato de carga, maior o tempo de residência da carga dentro da coluna de destilação. O maior tempo de residência, por sua vez, leva a uma melhor separação dentro da retificadora, resultando em menos energia sendo consumida no refeedor e conseqüentemente em uma menor irreversibilidade na coluna.

5.4.11 Efeito do Número de Pratos da Retificadora

A Figura 5.31 mostra a irreversibilidade da coluna de absorção em função do número de pratos da coluna de destilação para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

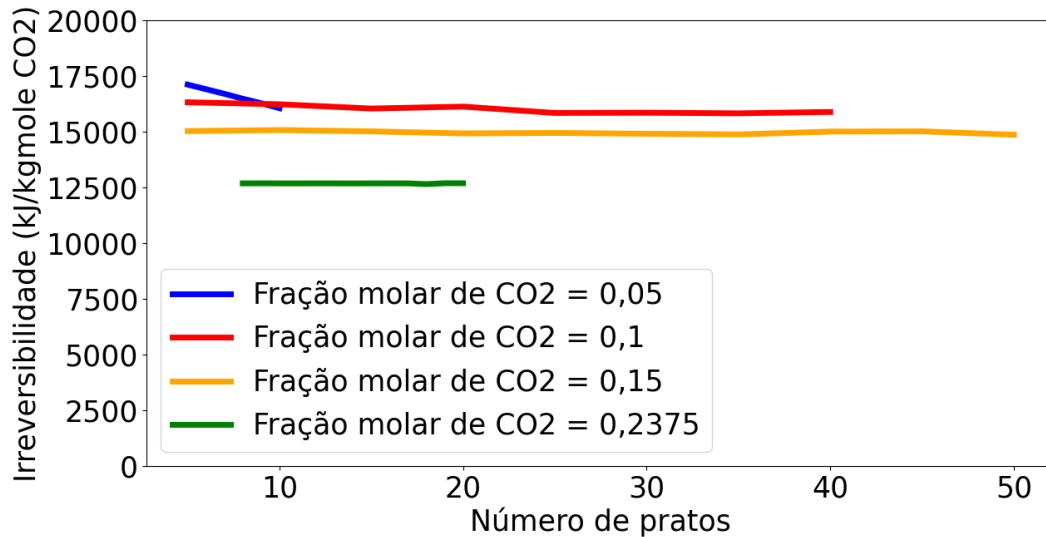


Figura 5.31: Irreversibilidade da coluna de absorção em função do número de pratos da coluna de destilação, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Percebe-se, na Figura 5.31, que a irreversibilidade da coluna de absorção praticamente permanece inalterada conforme se aumenta o número de pratos da coluna de destilação, para todas as frações molares de CO_2 . Além disso, verificam-se os maiores intervalos de variação do número de pratos da retificadora para as frações molares de 0,1 e 0,15.

Em relação à coluna de destilação, a Figura 5.32 apresenta a irreversibilidade da coluna em função do seu número de pratos para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

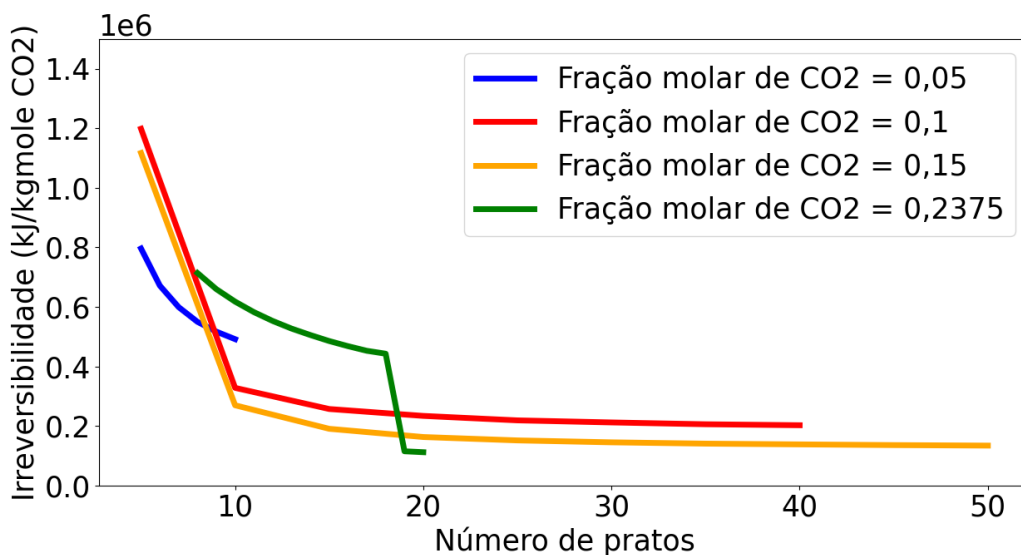


Figura 5.32: Irreversibilidade da coluna de destilação em função do seu número de pratos, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Observa-se, na Figura 5.32, uma redução da irreversibilidade da coluna de destilação conforme se aumenta seu número de pratos, para todas as frações molares de CO_2 no gás que entra na absorvedora. Verifica-se também uma queda abrupta na irreversibilidade da coluna a partir de um número de pratos equivalente a 18 para a fração molar de 0,2375. Tal comportamento se justifica porque, quanto maior o número de pratos da retificadora, maior o contato entre as fases líquida e vapor dentro da coluna. O maior contato entre as fases, por sua vez, leva a uma melhor separação, resultando em menos energia sendo consumida no refeedor e consequentemente em uma menor irreversibilidade na coluna. Além disso, nota-se que os maiores intervalos de variação do número de pratos da retificadora correspondem às frações molares de 0,1 e 0,15.

Algo que é possível perceber, a partir das variáveis analisadas até este ponto, é que a irreversibilidade da coluna de absorção diminui conforme se aumenta a fração molar de CO_2 no gás que entra na absorvedora, o que não ocorre no caso da coluna de destilação. Isto se deve ao fato de que, tanto no caso da coluna de absorção quanto da coluna de destilação, a irreversibilidade extensiva, ou seja, a irreversibilidade total do equipamento aumenta conforme se aumenta a fração molar de CO_2 no gás que entra na absorvedora, como pode ser observado na Figura 5.33, para a absorvedora, e na Figura 5.34, para a retificadora:

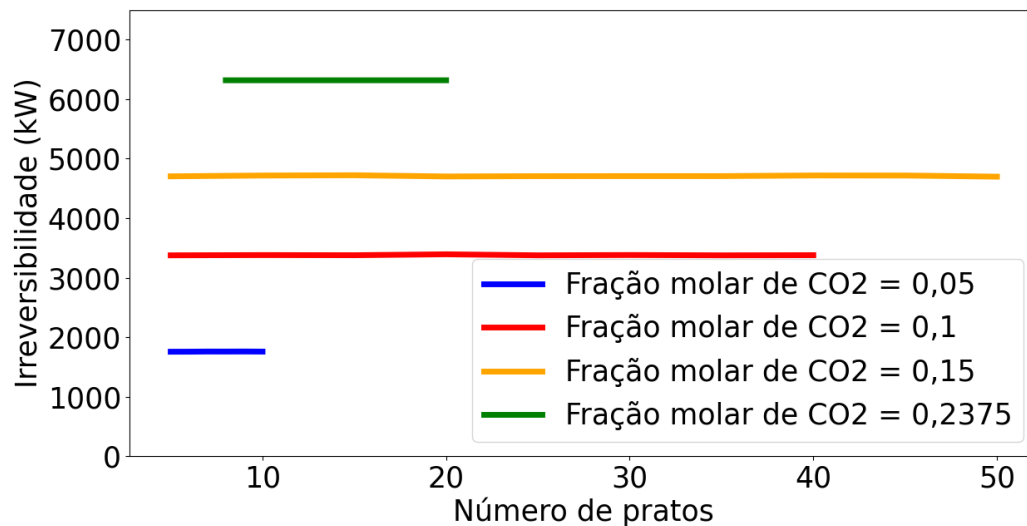


Figura 5.33: Irreversibilidade extensiva da coluna de absorção em função do número de pratos da coluna de destilação, para as diferentes frações molares de CO_2 .

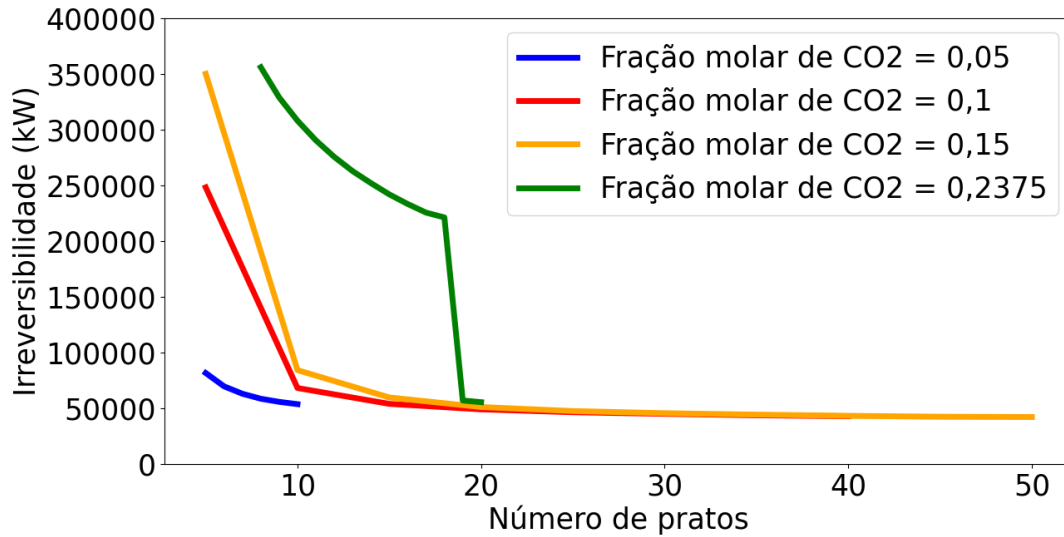


Figura 5.34: Irreversibilidade extensiva da coluna de destilação em função de seu número de pratos, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Algo que também aumenta ao se aumentar a fração molar de CO_2 no gás que entra na absorvedora é a vazão de CO_2 capturado, conforme pode ser visto na Figura 5.35:

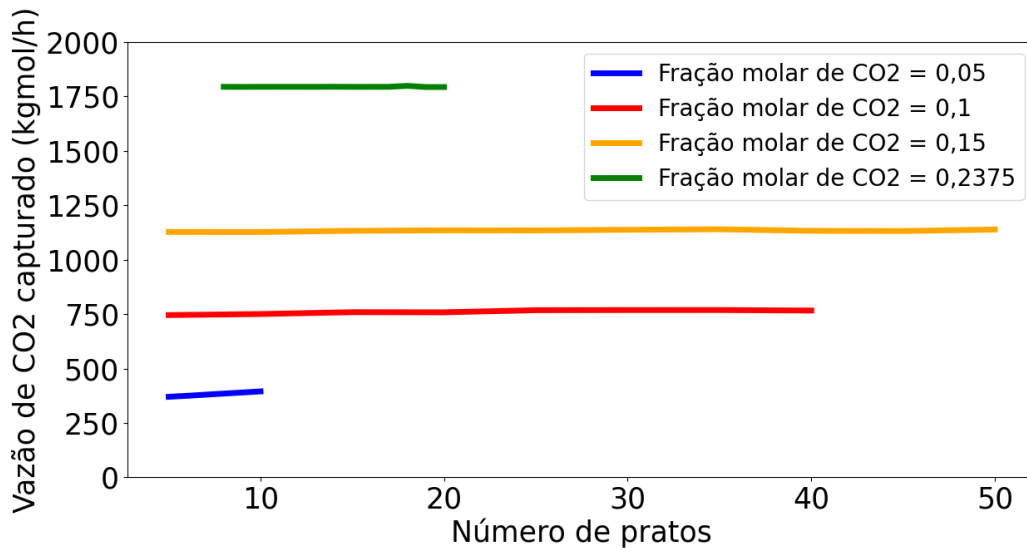


Figura 5.35: Vazão de CO_2 capturado em função do número de pratos da coluna de destilação, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Assim, ao se aumentar a fração molar de CO_2 no gás que entra na absorvedora, a vazão de CO_2 capturado sofre um aumento mais significativo do que a irreversibilidade extensiva da coluna de absorção. Isto faz com que a irreversibilidade intensiva possua comportamento oposto à extensiva ao se aumentar a fração molar de CO_2 , no caso da absorvedora. No entanto, devido à elevada irreversibilidade extensiva da coluna de destilação, tal fenômeno não é observado no equipamento.

Outro ponto importante a ser frisado é que, conforme observado na Equação 4.6, a irreversibilidade da coluna de destilação está intrinsecamente ligada à energia consumida no refeedor da coluna, o que pode ser confirmado pela Figura 5.36:

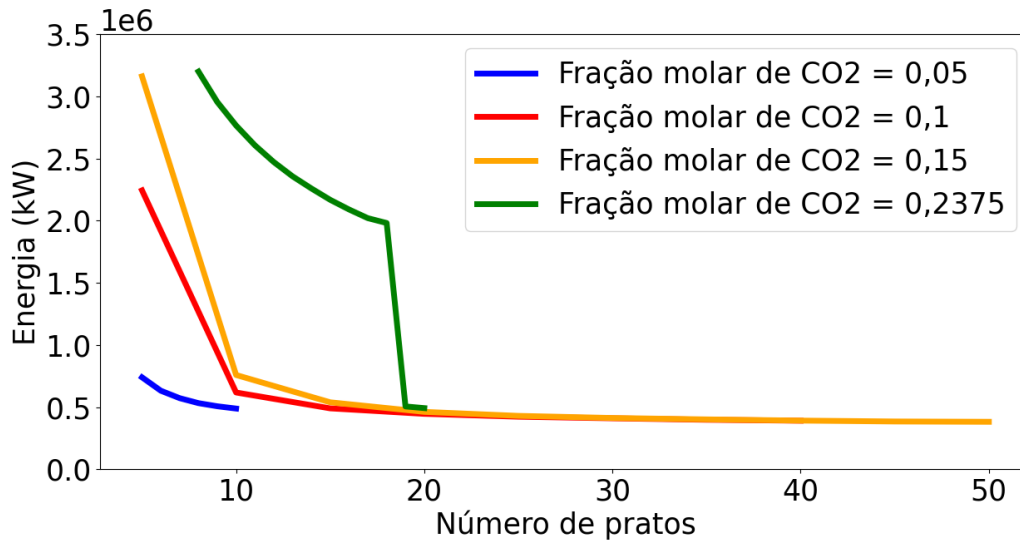


Figura 5.36: Energia consumida no refeedor da coluna de destilação em função do seu número de pratos, para as diferentes frações molares de CO_2 .

A semelhança entre a Figura 5.34 e a Figura 5.36 se deve à dependência da irreversibilidade da coluna de destilação em relação à energia consumida no refeedor da coluna. Já a energia consumida no refeedor, por sua vez, está fortemente relacionada à vazão de água que entra no refeedor, o que pode ser confirmado pela Figura 5.37:

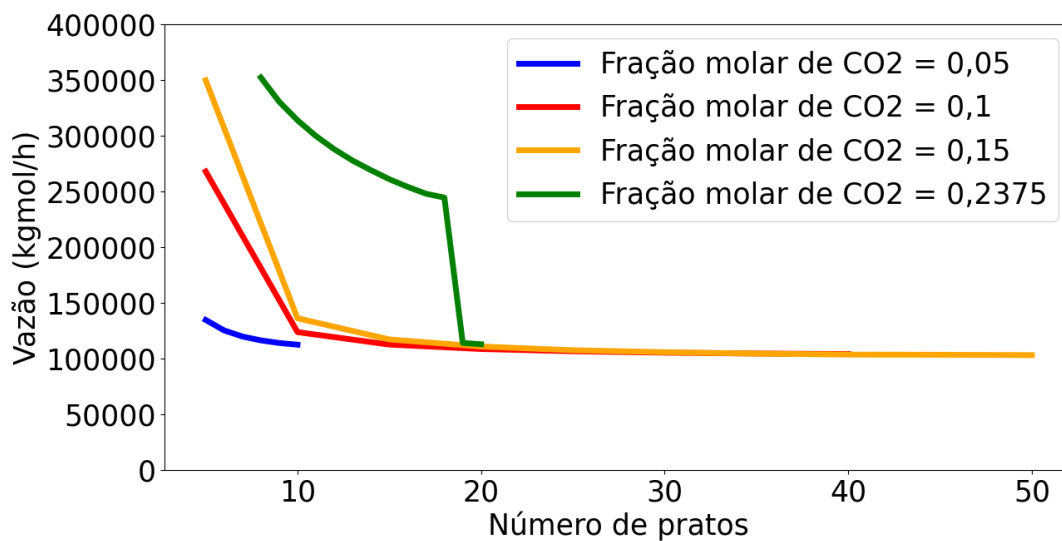


Figura 5.37: Vazão de água que entra no refeedor da coluna de destilação em função do seu número de pratos, para as diferentes frações molares de CO_2 .

A similaridade entre a Figura 5.36 e a Figura 5.37 ocorre devido à dependência da energia consumida no refeedor da retificadora em relação à vazão de água que entra no refeedor. Para corroborar este fato, tomou-se o caso base da Tabela 4.23 e a fração molar de CO_2 no gás a ser tratado como sendo 0,2375. Assim, tomou-se como valores especificados na coluna de destilação a razão de refluxo e a vazão molar de destilado, de modo que, gradativamente, reduziu-se a razão de refluxo para diminuir a quantidade de água que entra no refeedor, enquanto a vazão de destilado era reduzida para assegurar que a corrente possuísse uma fração molar de CO_2 de no mínimo 98% em base molar. Este ajuste foi realizado sem que o processo tivesse reciclo, e os valores de vazão de destilado, razão de refluxo e fração molar de CO_2 no destilado podem ser conferidos na Tabela 5.4:

Tabela 5.4: Valores registrados de vazão de destilado, razão de refluxo e fração molar de CO_2 no destilado.

Vazão de destilado [kgmol/h]	Razão de refluxo [-]	Fração molar de CO_2 no destilado [-]
$1,86 \cdot 10^3$	145	0,98
$1,85 \cdot 10^3$	140	0,98
$1,84 \cdot 10^3$	135	0,98
$1,82 \cdot 10^3$	130	0,98
$1,81 \cdot 10^3$	125	0,98
$1,80 \cdot 10^3$	120	0,98
$1,78 \cdot 10^3$	115	0,98
$1,77 \cdot 10^3$	110	0,98

Já a Figura 5.38 mostra a vazão de água que entra no refeedor em função da razão de refluxo:

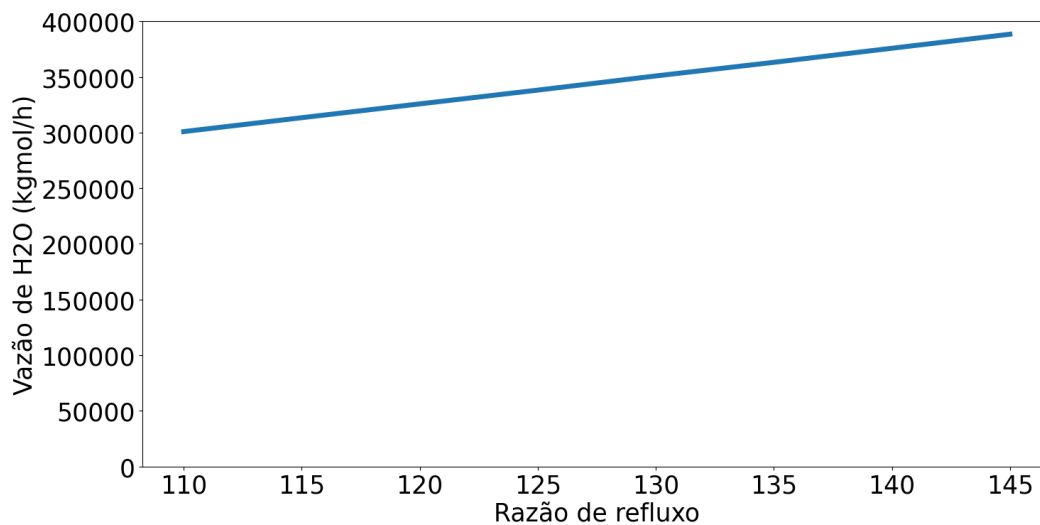


Figura 5.38: Vazão de água que entra no refeedor em função da razão de refluxo.

Nota-se, na Figura 5.38, que a vazão de água que entra no refeedor diminui conforme se reduz a razão de refluxo. Quanto à Figura 5.39, esta mostra a energia consumida no processo em função da razão de refluxo:

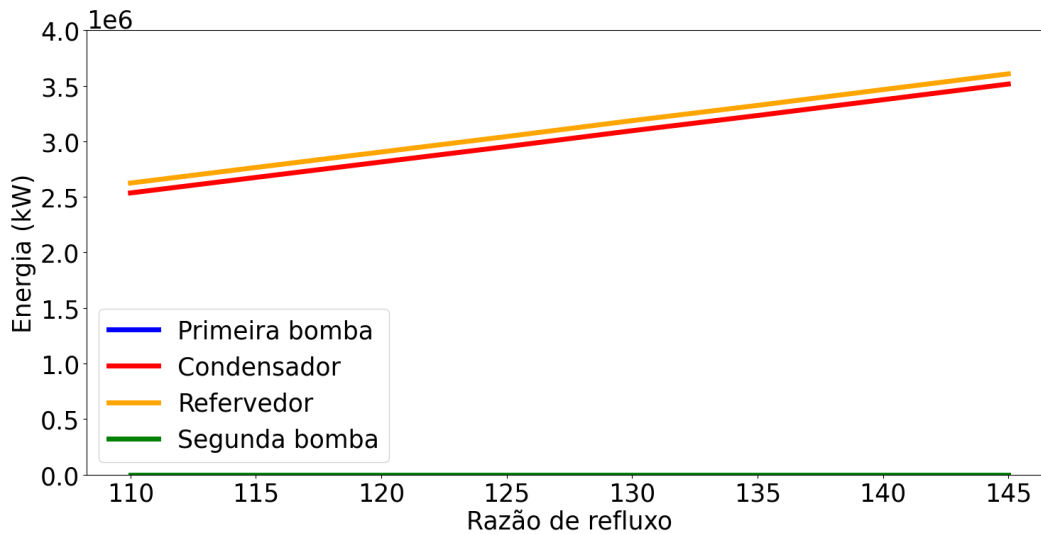


Figura 5.39: Energia consumida no processo em função da razão de refluxo.

Observa-se, na Figura 5.39, que a energia consumida no refeedor também diminui conforme se diminui a razão de refluxo. Logo, constata-se que a energia consumida no refeedor da retificadora diminui conforme se reduz a vazão de água que entra no refeedor, de acordo com o que foi mencionado anteriormente. Com isto, é possível verificar que uma redução na vazão de água que entra no refeedor leva a uma redução na energia consumida no refeedor e, como consequência, a uma redução na irreversibilidade da coluna de destilação.

5.4.12 Efeito do Diâmetro da Retificadora

A Figura 5.40 mostra a irreversibilidade da coluna de absorção em função do diâmetro da coluna de destilação para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

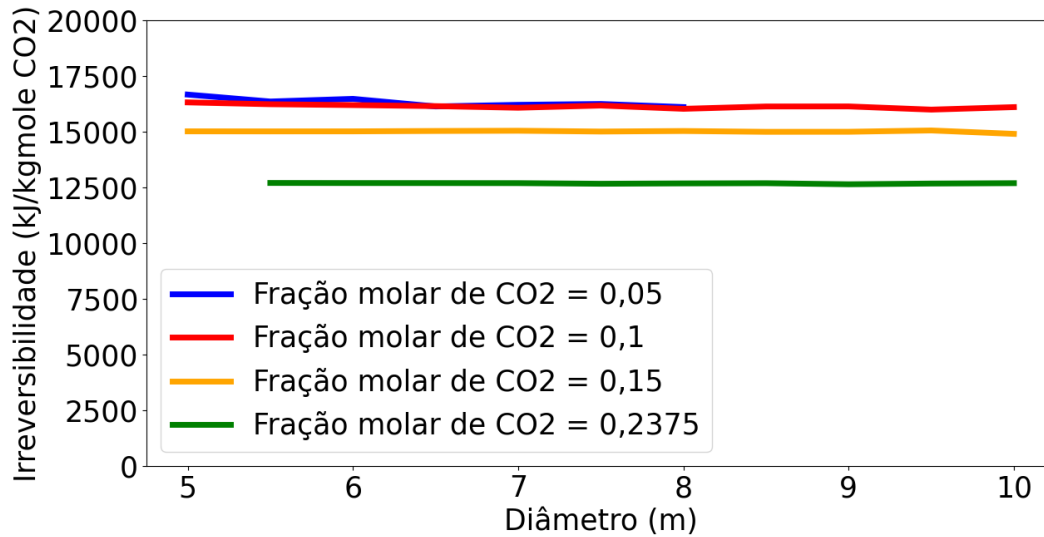


Figura 5.40: Irreversibilidade da coluna de absorção em função do diâmetro da coluna de destilação, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Pode-se observar, na Figura 5.40, que a irreversibilidade da coluna de absorção permanece praticamente inalterada conforme se aumenta o diâmetro da coluna de destilação, para todas as frações molares de CO_2 . Percebe-se também que o menor intervalo de variação do diâmetro da retificadora corresponde à fração molar de 0,05.

Quanto à coluna de destilação, a Figura 5.41 apresenta a irreversibilidade da coluna em função do seu diâmetro para as diversas concentrações de CO_2 no gás que entra na absorvedora:

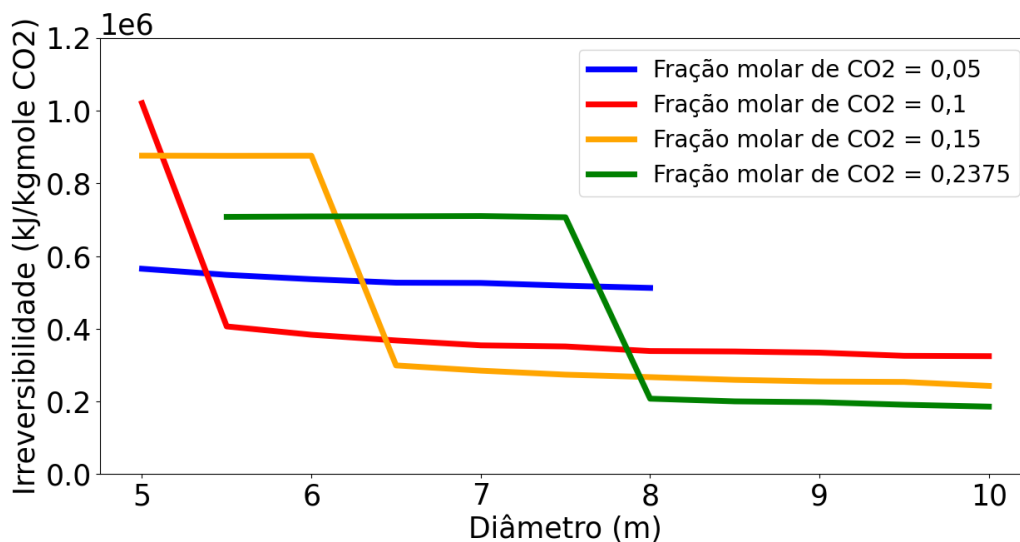


Figura 5.41: Irreversibilidade da coluna de destilação em função do seu diâmetro, para as diferentes frações molares de CO_2 .

Conforme pode-se perceber na Figura 5.41, a irreversibilidade da coluna de destilação diminui conforme se aumenta seu diâmetro, para todas as frações molares de

CO_2 . Verifica-se também uma queda abrupta na irreversibilidade na coluna de destilação a partir de um diâmetro equivalente a 6 metros para a fração molar de 0,15 e a partir de um diâmetro equivalente a 7,5 metros para a fração molar de 0,2375. Isto se deve ao fato de que, para altas concentrações de CO_2 na carga, quanto maior o diâmetro da retificadora, maior o contato entre as fases líquida e vapor dentro da coluna. O maior contato entre as fases, por sua vez, leva a uma melhor separação, resultando em menos energia sendo consumida no refeedor e conseqüentemente em uma menor irreversibilidade na coluna. Além disso, nota-se que o menor intervalo de variação do diâmetro da retificadora corresponde à fração molar de 0,05.

5.4.13 Observações Gerais

A partir das análises exergéticas da presente seção, foi possível constatar que o processo de absorção de CO_2 é sensível a determinadas variáveis operacionais, sendo que tal sensibilidade depende da concentração de CO_2 no gás a ser tratado. Além disso, notou-se um elevado impacto das variáveis relativas à coluna de absorção sobre a coluna de destilação, cuja recíproca não é verdadeira, uma vez que as variáveis relativas à retificadora não impactam de forma expressiva a absorvedora. Verificou-se também que, no processo de absorção de CO_2 , podem haver variáveis que quando têm seu valor aumentado reduzem a irreversibilidade da absorvedora mas aumentam a da retificadora, a exemplo da pressão de operação da absorvedora.

Notou-se que, para algumas variáveis operacionais, o intervalo de variação da variável apresentou discrepância entre os diferentes valores de concentração de CO_2 no gás a ser tratado. Isto se deve ao fato de as análises exergéticas terem sido realizadas utilizando reciclo no processo de absorção de CO_2 . Porém, dado que o objetivo de tal análise foi simplesmente avaliar o impacto das variáveis operacionais sobre a ineficiência do processo, a diferença entre os intervalos de variação não representa um problema. Também constatou-se que a irreversibilidade da coluna de destilação está fortemente atrelada ao consumo de energia no refeedor da coluna, o qual por sua vez é altamente dependente da vazão de água que entra no refeedor.

Por fim, foi possível a identificação das variáveis operacionais com maior influência na ineficiência do processo de absorção de CO_2 , bem como os meios através dos quais tais variáveis provocam tal ineficiência. Assim, observou-se que a eficiência do processo pode ser melhorada através de um aumento na captura de CO_2 ou por meio da redução do consumo de energia no refeedor da coluna de destilação, sendo que as variáveis com maior impacto na captura de CO_2 são o número de pratos e o diâmetro da coluna de absorção. Já as variáveis que mais impactam no consumo de energia no refeedor são: vazão de solvente (ou concentração de MEA no solvente), prato de carga da retificadora, número de pratos da retificadora e diâmetro

da retificadora.

5.5 Avaliação da Captura de Gás Carbônico do Ar Atmosférico

Foram obtidos os resultados da Tabela 5.5 para o caso base da indústria do cimento:

Tabela 5.5: Resultados para o caso base da indústria do cimento.

Variável	Valor
Vazão molar de CO_2 no solvente que entra na coluna de absorção [kgmol/h]	413,23
Vazão molar de CO_2 no gás que entra na coluna de absorção [kgmol/h]	1.876,25
Vazão molar de CO_2 no gás que deixa a coluna de absorção [kgmol/h]	30,36
Vazão molar de CO_2 no solvente que deixa a coluna de absorção [kgmol/h]	2.259,12
Vazão molar de CO_2 na carga da coluna de destilação [kgmol/h]	2.259,12
Vazão molar de CO_2 no gás que deixa a coluna de destilação [kgmol/h]	1.830,42
Vazão molar de CO_2 no solvente que deixa a coluna de destilação [kgmol/h]	428,70
Energia consumida na bomba após a coluna de absorção [kW]	54,14
Energia retirada no condensador [kW]	$3,10 \cdot 10^6$
Energia consumida no refeedor [kW]	$3,19 \cdot 10^6$
Energia consumida na bomba após a coluna de destilação [kW]	7,03
Energia retirada no resfriador [kW]	99.065,41

Deste modo, a Tabela 5.6 mostra os resultados para o caso base do ar atmosférico seco:

Tabela 5.6: Resultados para o caso base do ar atmosférico seco.

Variável	Valor
Vazão molar de CO_2 no solvente que entra na coluna de absorção [kgmol/h]	0
Vazão molar de CO_2 no gás que entra na coluna de absorção [kgmol/h]	3,16
Vazão molar de CO_2 no gás que deixa a coluna de absorção [kgmol/h]	0,12
Vazão molar de CO_2 no solvente que deixa a coluna de absorção [kgmol/h]	3,04
Vazão molar de CO_2 na carga da coluna de destilação [kgmol/h]	3,04
Vazão molar de CO_2 no gás que deixa a coluna de destilação [kgmol/h]	3,02
Vazão molar de CO_2 no solvente que deixa a coluna de destilação [kgmol/h]	$1,38 \cdot 10^{-2}$
Energia consumida na bomba após a coluna de absorção [kW]	52,86
Energia retirada no condensador [kW]	$1,38 \cdot 10^8$
Energia consumida no refeedor [kW]	$1,39 \cdot 10^8$
Energia consumida na bomba após a coluna de destilação [kW]	5,26
Energia retirada no resfriador [kW]	20.411,95

Finalmente, a Tabela 5.7 apresenta os resultados para o caso base do ar atmosférico úmido:

Tabela 5.7: Resultados para o caso base do ar atmosférico úmido.

Variável	Valor
Vazão molar de CO_2 no solvente que entra na coluna de absorção [kgmol/h]	0
Vazão molar de CO_2 no gás que entra na coluna de absorção [kgmol/h]	3,10
Vazão molar de CO_2 no gás que deixa a coluna de absorção [kgmol/h]	0,12
Vazão molar de CO_2 no solvente que deixa a coluna de absorção [kgmol/h]	2,98
Vazão molar de CO_2 na carga da coluna de destilação [kgmol/h]	2,98
Vazão molar de CO_2 no gás que deixa a coluna de destilação [kgmol/h]	2,98
Vazão molar de CO_2 no solvente que deixa a coluna de destilação [kgmol/h]	$8,57 \cdot 10^{-3}$
Energia consumida na bomba após a coluna de absorção [kW]	52,96
Energia retirada no condensador [kW]	$1,38 \cdot 10^8$
Energia consumida no refeedor [kW]	$1,39 \cdot 10^8$
Energia consumida na bomba após a coluna de destilação [kW]	5,27
Energia retirada no resfriador [kW]	22.184,78

Assim, a Tabela 5.8 reúne as métricas calculadas para cada caso base em questão:

Tabela 5.8: Métricas calculadas para cada caso base.

Métrica	Indústria do cimento	Ar atmosférico seco	Ar atmosférico úmido
Eficiência de captura de CO_2 [-]	0,98	0,96	0,96
Fração molar de CO_2 no gás tratado [-]	$1,14 \cdot 10^{-2}$	$2,63 \cdot 10^{-5}$	$2,55 \cdot 10^{-5}$
Consumo de energia no processo [kJ/kgmol de CO_2 capturado]	$6,27 \cdot 10^6$	$1,65 \cdot 10^{11}$	$1,68 \cdot 10^{11}$

É possível constatar, pela Tabela 5.8, que para todos os casos a eficiência de captura de CO_2 foi superior a 0,95, não havendo uma diferença significativa de tais métricas entre os casos. Em relação à fração molar de CO_2 no gás tratado, o caso base da indústria do cimento apresentou o maior valor. Isto se deve à maior concentração de CO_2 no gás que entra na coluna de absorção para tal caso. Por fim, no que se refere ao consumo de energia no processo, pode-se observar que tal métrica

Primeiramente, ajustou-se a vazão de solvente de modo que se pudesse haver uma captura completa de CO_2 na absorvedora utilizando a menor vazão de solvente possível e com uma quantidade de pratos na absorvedora equivalente a 50. A busca pela menor vazão de solvente se justifica porque, quanto menor a vazão de solvente, menor é a quantidade de energia necessária para regenerar o solvente na coluna de destilação. Tal vazão foi de 25.000 kgmol/h, como pode ser observado na Figura 5.43:

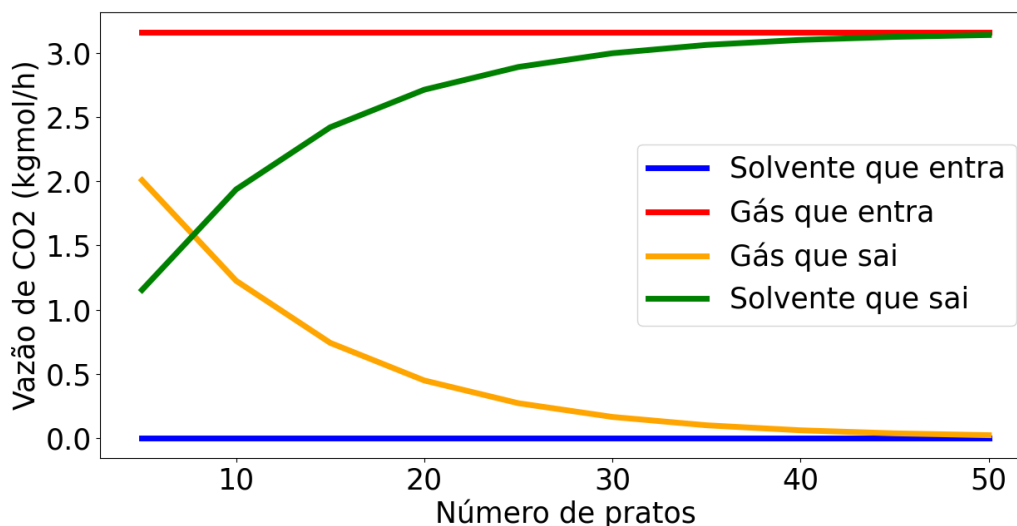


Figura 5.43: Vazão de CO_2 nas correntes da absorvedora em função do seu número de pratos para o ar seco.

Na Figura 5.43, para a qual foi utilizada a vazão de solvente de 25.000 kgmol/h, observa-se que, conforme se aumenta o número de pratos da coluna de absorção, a vazão de CO_2 no gás que sai da coluna (gás tratado) diminui, tendendo a zero para um número de pratos equivalente a 50, o que indica uma captura de CO_2 próxima à captura completa. Com isto, fixou-se a vazão de solvente em 25.000 kgmol/h e o número de pratos da absorvedora em 50.

Após o ajuste da vazão de solvente e do número de pratos da coluna de absorção, ajustou-se as variáveis da coluna de destilação, sendo o prato de carga e o número de pratos as primeiras variáveis a serem ajustadas. O ajuste das variáveis em questão se justifica pelo seu impacto no consumo de energia no refeedor conforme o exposto na Seção 5.4. Deste modo, em relação ao prato de carga, este foi escolhido como sendo o do topo, uma vez que, quanto mais alto o prato de carga, maior o tempo de residência da carga dentro da coluna de destilação, resultando em um menor consumo de energia no refeedor para promover uma separação adequada. Quanto ao número de pratos da coluna de destilação, escolheu-se 20 pratos na coluna, pois, quanto maior o número de pratos, maior o contato entre as fases líquida e vapor dentro da coluna, resultando em um menor consumo de energia no refeedor para

promover uma separação adequada.

Depois do ajuste do prato de carga e do número de pratos da retificadora, ajustou-se a vazão de destilado e a razão de refluxo. Inicialmente, a vazão de destilado foi ajustada de modo a ser a maior possível e, com isto, retirar a maior quantidade possível de CO_2 no topo da coluna, mas sem resultar em problemas de cruzamento de temperatura no trocador de calor interno. Em seguida, a razão de refluxo foi ajustada de modo a ser a menor possível, mas assegurando uma eficiência de captura de CO_2 de no mínimo 99%. Assim, a Tabela 5.9 mostra os valores registrados de vazão de destilado, razão de refluxo e vazão de CO_2 no destilado:

Tabela 5.9: Valores registrados de vazão de destilado, razão de refluxo e vazão de CO_2 no destilado para o ar seco.

Vazão de destilado [kgmol/h]	Razão de refluxo [-]	Vazão de CO_2 no destilado [kgmol/h]
$7 \cdot 10^3$	500	3,16
$7 \cdot 10^3$	450	3,16
$7 \cdot 10^3$	400	3,16
$7 \cdot 10^3$	350	3,16
$7 \cdot 10^3$	300	3,16
$7 \cdot 10^3$	250	3,16
$7 \cdot 10^3$	200	3,16
$7 \cdot 10^3$	150	3,16
$7 \cdot 10^3$	100	3,15
$7 \cdot 10^3$	50	3,09

Já a Figura 5.44 mostra a vazão de água que entra no refeedor em função da razão de refluxo, enquanto a Figura 5.45 mostra a energia consumida no processo em função da razão de refluxo:

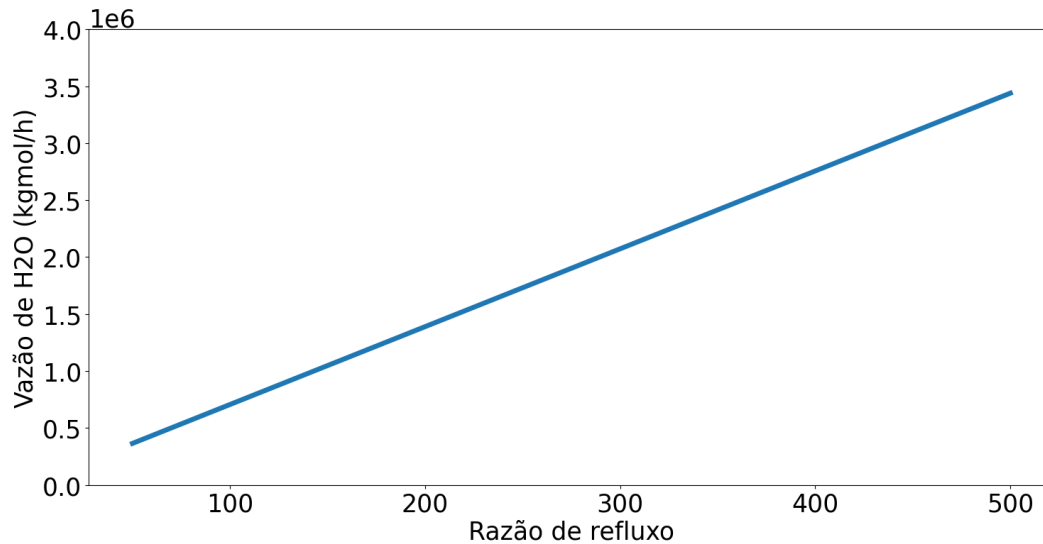


Figura 5.44: Vazão de água que entra no refervedor em função da razão de refluxo para o ar seco.

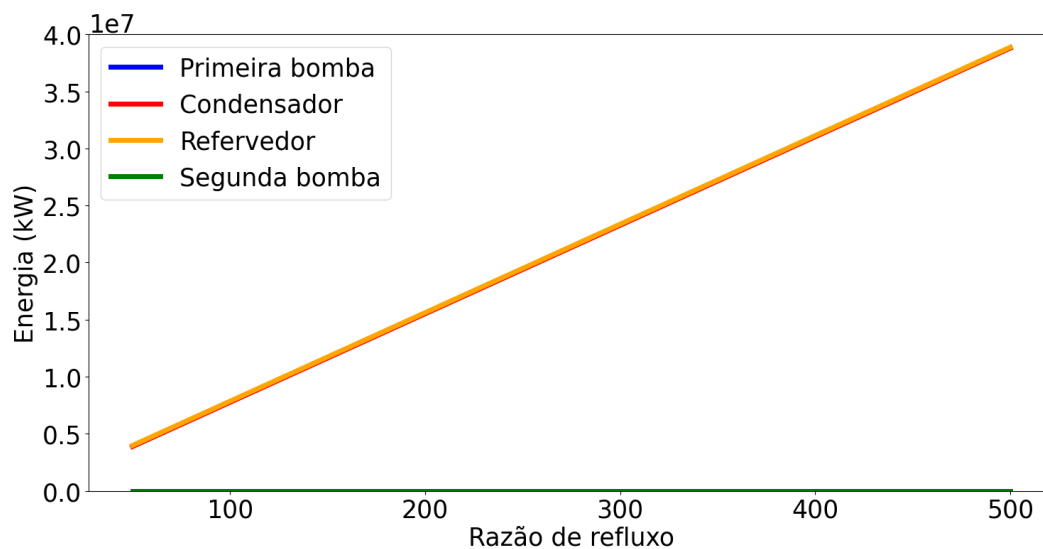


Figura 5.45: Energia consumida no processo em função da razão de refluxo para o ar seco.

Percebe-se, nas Figuras 5.44 e 5.45, que, ao se manter fixa a vazão de destilado, diminuindo-se a razão de refluxo, foi possível reduzir a quantidade de água que entra no refervedor e, conseqüentemente, a energia consumida no refervedor. Isto está de acordo com o que foi pontuado na Seção 5.4.11. Assim, fixou-se a vazão de destilado como sendo igual a 7.000 kgmol/h, e a razão de refluxo como sendo equivalente a 100, uma vez que, abaixo de tal valor da razão de refluxo, a eficiência de captura de CO_2 torna-se inferior a 99%, e então implementou-se o reciclo no processo.

Após o ajuste das variáveis operacionais e implementação do reciclo, registrou-se os valores das métricas para as novas condições do processo. Deste modo, a Tabela

5.10 mostra tais valores, bem como outras informações:

Tabela 5.10: Resultados relativos às novas condições do processo de absorção para a captura de CO_2 do ar seco.

Variável	Valor
Vazão de CO_2 no solvente que entra na absorvedora [kgmol/h]	0
Vazão de CO_2 no gás que entra na absorvedora [kgmol/h]	3,16
Vazão de CO_2 no gás que deixa a absorvedora [kgmol/h]	$9,34 \cdot 10^{-4}$
Vazão de CO_2 no solvente que deixa a absorvedora [kgmol/h]	3,16
Vazão de CO_2 no solvente que entra na coluna de destilação [kgmol/h]	3,16
Vazão de CO_2 no gás que deixa a coluna de destilação [kgmol/h]	3,14
Vazão de CO_2 no solvente que deixa a coluna de destilação [kgmol/h]	$1,98 \cdot 10^{-2}$
Energia consumida na primeira bomba [kW]	16,50
Energia retirada no condensador [kW]	$7,75 \cdot 10^6$
Energia consumida no refeedor [kW]	$7,85 \cdot 10^6$
Energia consumida na segunda bomba [kW]	1,71
Energia retirada no resfriador [kW]	2.733,45
Eficiência de captura de CO_2 [-]	0,99
Fração molar de CO_2 no gás tratado [-]	$2,62 \cdot 10^{-6}$
Consumo de energia no processo [kJ/kgmol de CO_2 capturado]	$9,00 \cdot 10^9$

Verifica-se, na Tabela 5.10, que após o ajuste das variáveis operacionais do processo de absorção para o ar seco, o consumo de energia no processo foi 1.435,41 vezes superior ao da indústria do cimento. Apesar da melhoria da métrica em relação ao caso sem ajustes, a captura de CO_2 do ar seco por meio do processo de absorção ainda mostra-se dispendiosa em termos de energia, sendo preferível a captura em fontes mais concentradas em CO_2 , como é o caso das indústrias.

5.5.2 Ajuste das Variáveis Operacionais para o Ar Úmido

Como uma tentativa de reduzir o consumo de energia no processo para o caso base do ar úmido, tomou-se novamente as condições das Tabelas 4.24, 4.25 e 4.26, e ajustou-se as variáveis operacionais sem reciclo, conforme pode ser observado na Figura 5.46:

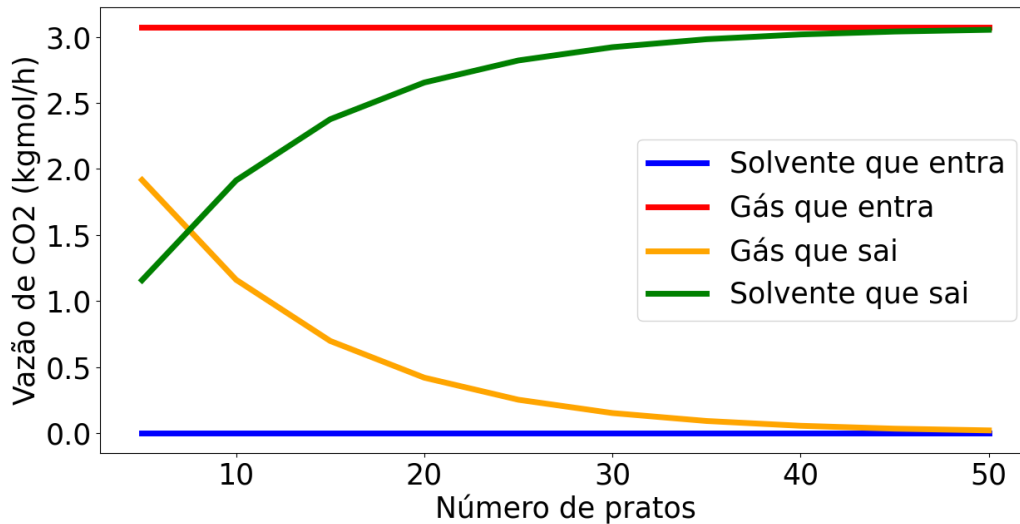


Figura 5.47: Vazão de CO_2 nas correntes da absorvedora em função do seu número de pratos para o ar úmido.

Na Figura 5.47, para a qual foi utilizada a vazão de solvente de 25.000 kgmol/h, observa-se que, conforme se aumenta o número de pratos da coluna de absorção, a vazão de CO_2 no gás que sai da coluna (gás tratado) diminui, tendendo a zero para um número de pratos equivalente a 50, o que indica uma captura de CO_2 próxima à captura completa. Com isto, fixou-se a vazão de solvente em 25.000 kgmol/h e o número de pratos da absorvedora em 50.

Depois do ajuste da vazão de solvente e do número de pratos da coluna de absorção, foi realizado o ajuste das variáveis da coluna de destilação, sendo o prato de carga e o número de pratos as primeiras variáveis a serem ajustadas. O ajuste das variáveis em questão se justifica devido ao seu impacto no consumo de energia no refeedor conforme o exposto na Seção 5.4. Deste modo, no tocante ao prato de carga, este foi escolhido como sendo o do topo, uma vez que, quanto mais alto o prato de carga, maior o tempo de residência da carga dentro da coluna de destilação, resultando em um menor consumo de energia no refeedor para promover uma separação adequada. No que diz respeito ao número de pratos da coluna de destilação, escolheu-se 20 pratos na coluna, pois, quanto maior o número de pratos, maior o contato entre as fases líquida e vapor dentro da coluna, resultando em um menor consumo de energia no refeedor para promover uma separação adequada.

Após o ajuste do prato de carga e do número de pratos da retificadora, ajustou-se a vazão de destilado e a razão de refluxo. Inicialmente, a vazão de destilado foi ajustada de modo a ser a maior possível e, conseqüentemente, retirar a maior quantidade possível de CO_2 no topo da coluna, mas sem resultar em problemas de cruzamento de temperatura no trocador de calor interno. Posteriormente, a razão de refluxo foi ajustada de modo a ser a menor possível, mas assegurando uma eficiência

de captura de CO_2 de no mínimo 99%. Desta forma, a Tabela 5.11 mostra os valores registrados de vazão de destilado, razão de refluxo e vazão de CO_2 no destilado:

Tabela 5.11: Valores registrados de vazão de destilado, razão de refluxo e vazão de CO_2 no destilado para o ar úmido.

Vazão de destilado [kgmol/h]	Razão de refluxo [-]	Vazão de CO_2 no destilado [kgmol/h]
$7 \cdot 10^3$	500	3,10
$7 \cdot 10^3$	450	3,10
$7 \cdot 10^3$	400	3,10
$7 \cdot 10^3$	350	3,10
$7 \cdot 10^3$	300	3,10
$7 \cdot 10^3$	250	3,10
$7 \cdot 10^3$	200	3,10
$7 \cdot 10^3$	150	3,10
$7 \cdot 10^3$	100	3,10
$7 \cdot 10^3$	50	3,05

Já a Figura 5.48 mostra a vazão de água que entra no refeedor em função da razão de refluxo, enquanto a Figura 5.49 mostra a energia consumida no processo em função da razão de refluxo:

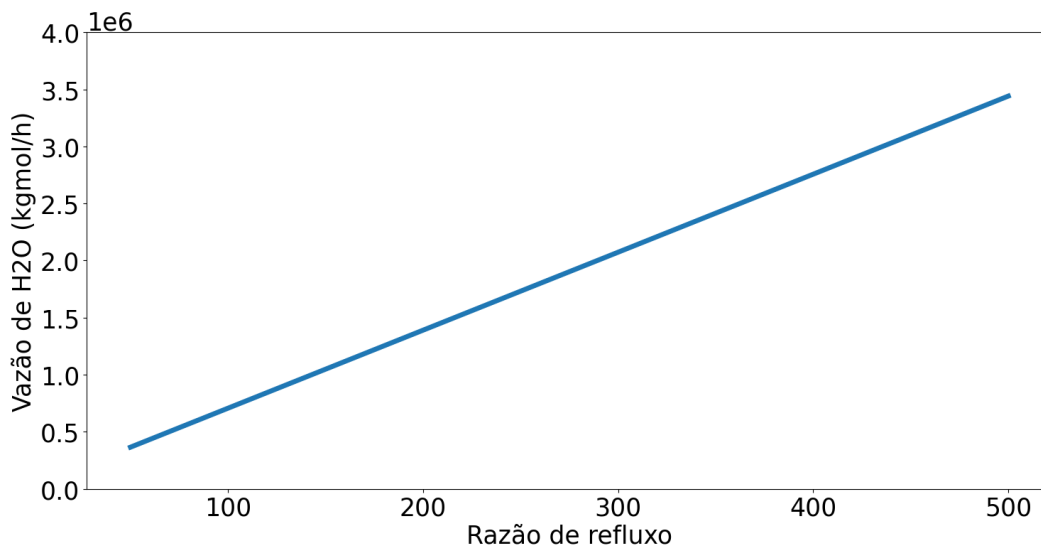


Figura 5.48: Vazão de água que entra no refeedor em função da razão de refluxo para o ar úmido.

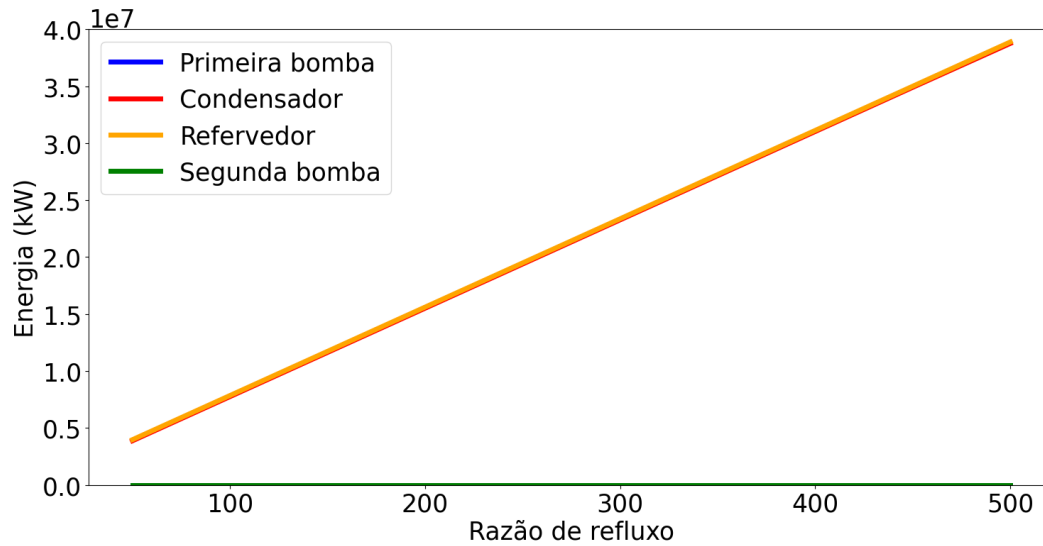


Figura 5.49: Energia consumida no processo em função da razão de refluxo para o ar úmido.

Verifica-se, nas Figuras 5.48 e 5.49 que, ao se manter fixa a vazão de destilado, diminuindo-se a razão de refluxo, foi possível reduzir a quantidade de água que entra no refervedor e, conseqüentemente, a energia consumida no refervedor. Isto está de acordo com o que foi pontuado na Seção 5.4.11. Assim, fixou-se a vazão de destilado como sendo igual a 7.000 kgmol/h, e a razão de refluxo como sendo equivalente a 100, uma vez que, abaixo de tal valor da razão de refluxo, a eficiência de captura de CO_2 torna-se inferior a 99%, e então implementou-se o reciclo no processo.

Após o ajuste das variáveis operacionais e implementação do reciclo, registrou-se os valores das métricas para as novas condições do processo. Deste modo, a Tabela 5.12 mostra tais valores, bem como outras informações:

Tabela 5.12: Resultados relativos às novas condições do processo de absorção para a captura de CO_2 do ar úmido.

Variável	Valor
Vazão de CO_2 no solvente que entra na absorvedora [kgmol/h]	0
Vazão de CO_2 no gás que entra na absorvedora [kgmol/h]	3,10
Vazão de CO_2 no gás que deixa a absorvedora [kgmol/h]	$9,18 \cdot 10^{-4}$
Vazão de CO_2 no solvente que deixa a absorvedora [kgmol/h]	3,10
Vazão de CO_2 no solvente que entra na coluna de destilação [kgmol/h]	3,10
Vazão de CO_2 no gás que deixa a coluna de destilação [kgmol/h]	3,08
Vazão de CO_2 no solvente que deixa a coluna de destilação [kgmol/h]	$1,96 \cdot 10^{-2}$
Energia consumida na primeira bomba [kW]	16,61
Energia retirada no condensador [kW]	$7,75 \cdot 10^6$
Energia consumida no refeedor [kW]	$7,85 \cdot 10^6$
Energia consumida na segunda bomba [kW]	1,72
Energia retirada no resfriador [kW]	4.513,96
Eficiência de captura de CO_2 [-]	0,99
Fração molar de CO_2 no gás tratado [-]	$2,45 \cdot 10^{-6}$
Consumo de energia no processo [kJ/kgmol de CO_2 capturado]	$9,16 \cdot 10^9$

Observa-se, na Tabela 5.12, que após o ajuste das variáveis operacionais do processo de absorção para o ar úmido, o consumo de energia no processo foi 1.460,92 vezes superior ao da indústria do cimento. Apesar da melhoria da métrica em relação ao caso sem ajustes, a captura de CO_2 do ar úmido por meio do processo de absorção ainda mostra-se dispendiosa em termos de energia, sendo preferível a captura em fontes mais concentradas em CO_2 , como é o caso das indústrias.

5.6 Estudo de Caso para a Indústria do Cimento

Na realização do estudo de caso relativo à indústria do cimento, primeiramente ajustou-se a vazão de solvente de modo que se pudesse haver uma captura completa de CO_2 na absorvedora utilizando a menor vazão de solvente possível e com uma quantidade de pratos na absorvedora equivalente a 50. A busca pela menor vazão de solvente se justifica porque, quanto menor a vazão de solvente, menor é a quantidade de energia necessária para regenerar o solvente na coluna de destilação. Tal vazão foi de 35.000 kgmol/h, como pode ser visto na Figura 5.50:

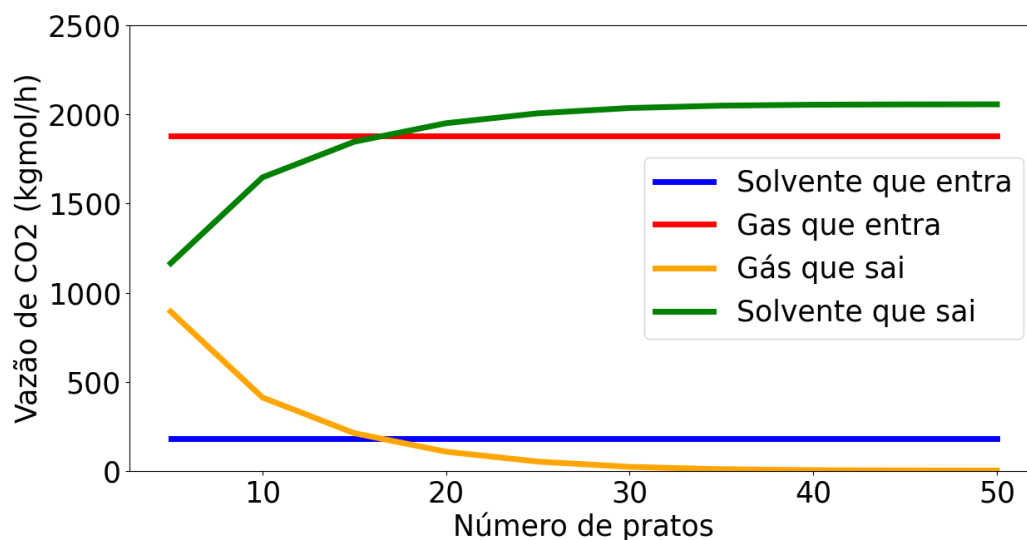


Figura 5.50: Vazão de CO_2 nas correntes da absorvedora em função do seu número de pratos para a indústria do cimento.

Na Figura 5.50, para a qual foi utilizada a vazão de solvente de 35.000 kgmol/h, observa-se que, conforme se aumenta o número de pratos da coluna de absorção, a vazão de CO_2 no gás que sai da coluna (gás tratado) diminui, tendendo a zero para um número de pratos equivalente a 50, o que indica uma captura de CO_2 próxima à captura completa. Com isto, fixou-se a vazão de solvente em 35.000 kgmol/h.

Vale destacar que, para a realização do estudo de caso relativo à indústria do cimento, o prato de carga da coluna de destilação foi previamente fixado como sendo o do topo, pois, quanto mais alto o prato de carga, maior o tempo de residência da carga dentro da coluna, resultando em um menor consumo de energia no refeedor para promover uma separação adequada. Já em relação ao número de pratos da coluna de destilação, este foi previamente fixado como sendo 20, uma vez que, quanto maior o número de pratos, maior o contato entre as fases líquida e vapor dentro da coluna, resultando em um menor consumo de energia no refeedor para promover uma separação adequada.

Após o ajuste da vazão de solvente, aumentou-se gradativamente o número de pratos da coluna de absorção, dado o seu impacto na captura de CO_2 conforme o exposto na Seção 5.4.5. Além disso, tomou-se como valores especificados na coluna de destilação os valores da vazão de destilado e da razão de refluxo. Assim, para cada valor do número de pratos da absorvedora, primeiramente ajustou-se a vazão de destilado de modo que esta fosse a maior possível e, conseqüentemente, retirar a maior quantidade possível de CO_2 no topo da retificadora, mas sem resultar em problemas de cruzamento de temperatura no trocador de calor interno. Em seguida, para o mesmo número de pratos, ajustou-se a razão de refluxo de modo a ser a menor possível, mas assegurando que a vazão de CO_2 saindo no fundo da retificadora

fosse equivalente à vazão de CO_2 no solvente que entra na absorvedora. Isto foi feito com a finalidade de garantir a igualdade de tais vazões em uma posterior implementação do reciclo. Deste modo, para cada valor do número de pratos da absorvedora, foi possível minimizar a quantidade de água que entra no refeedor da retificadora e, como consequência, a quantidade de energia consumida no refeedor, em conformidade com o que foi visto na Seção 5.4.11.

A Tabela 5.13 mostra os valores registrados para o número de pratos da absorvedora, a vazão de destilado e a razão de refluxo:

Tabela 5.13: Valores registrados para o número de pratos da absorvedora, a vazão de destilado e a razão de refluxo durante a realização do estudo de caso.

Número de pratos [-]	Vazão de destilado [kgmol/h]	Razão de refluxo [-]
5	$1,50 \cdot 10^4$	0,20
10	$1,50 \cdot 10^4$	0,20
15	$1,50 \cdot 10^4$	0,20
20	$1,00 \cdot 10^4$	0,70
25	$1,00 \cdot 10^4$	0,70
30	$1,00 \cdot 10^4$	0,75
35	$1,00 \cdot 10^4$	0,75
40	$1,00 \cdot 10^4$	0,75
45	$1,00 \cdot 10^4$	0,75
50	$1,00 \cdot 10^4$	0,75

Com isto, foram gerados os gráficos das Figuras 5.51 e 5.52:

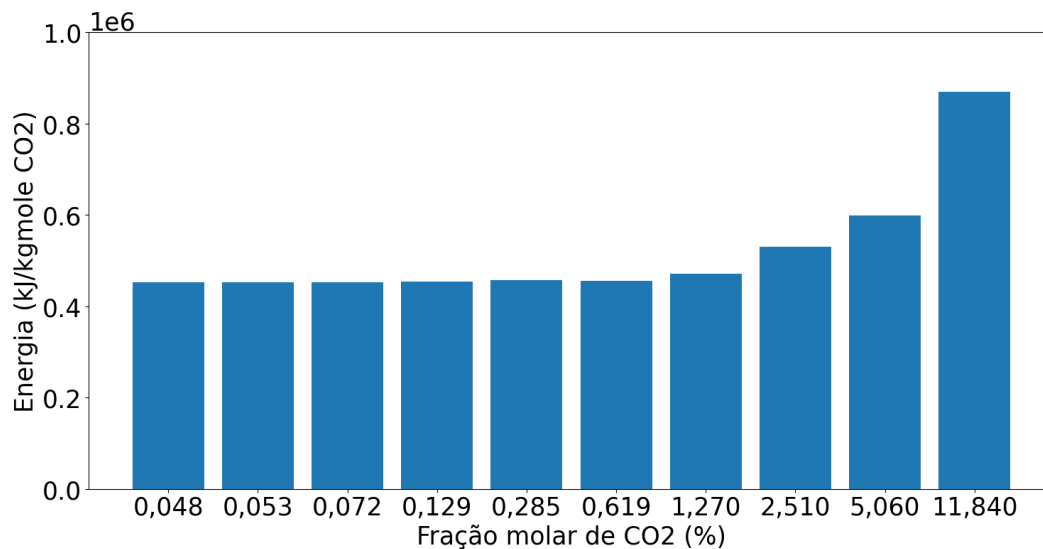


Figura 5.51: Consumo de energia no processo em função da fração molar de CO_2 no gás tratado.

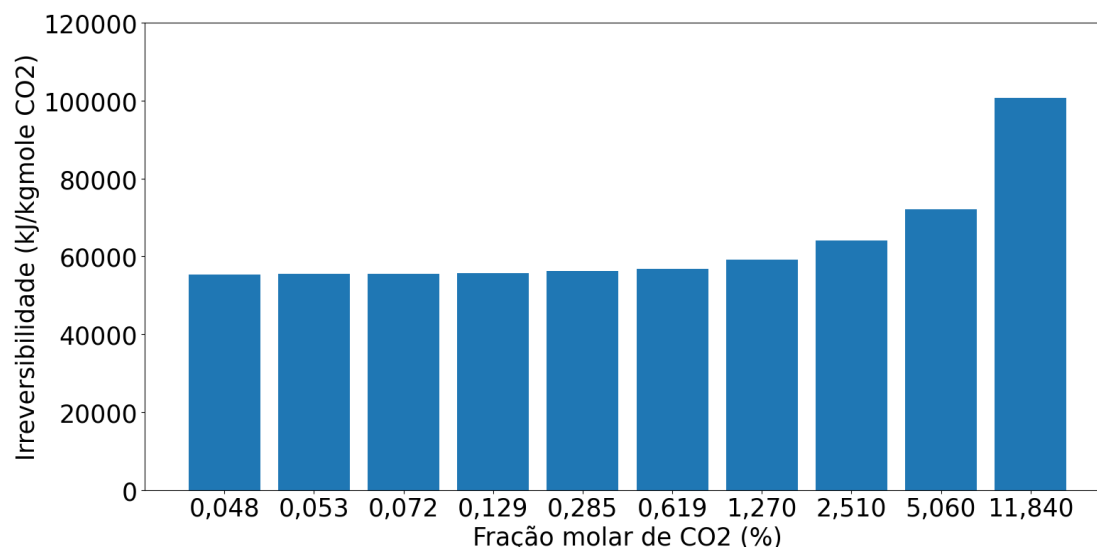


Figura 5.52: Irreversibilidade total do processo em função da fração molar de CO_2 no gás tratado.

Nas Figuras 5.51 e 5.52, o aumento do número de pratos da absorvedora corresponde à redução da fração molar de CO_2 no gás tratado, ou seja, da direita para a esquerda. Desta forma, percebe-se que o aumento do número de pratos da coluna de absorção leva a uma redução tanto do consumo de energia no processo quanto da irreversibilidade total do processo. Isto indica que uma melhoria na captura de CO_2 leva a uma diminuição no consumo de energia e na irreversibilidade total.

Constata-se, pelas Figuras 5.51 e 5.52, que o menor consumo de energia no processo e a menor irreversibilidade total do processo correspondem ao número de pratos da absorvedora equivalente a 50 (fração molar de CO_2 igual a 0,048%). Sendo assim, fixou-se o número de pratos em 50 e, após, implementou-se o reciclo no processo. Para estas condições, o consumo de energia foi de 452.220,06 kJ/kgmol de CO_2 capturado. Comparando-se este valor com do caso base da indústria do cimento na Tabela 5.8 ($6,27 \cdot 10^6$ kJ/kgmol de CO_2 capturado), percebe-se que o consumo de energia para as condições em questão é 13,86 vezes menor do que o da tabela, o que indica o quão expressiva pode ser a economia de energia caso o processo seja ajustado para as condições adequadas.

Capítulo 6

Conclusões

Foi possível validar tanto o cálculo da exergia quanto o consumo de energia do processo de absorção de CO_2 no simulador de processos Aspen HYSYS. No caso do cálculo da exergia, a validação apresentou erros inferiores a 1%. Já no caso do consumo de energia, a validação mostrou erros superiores a 1%, sendo significativamente maiores do que no caso do cálculo da exergia. Tal diferença se deve ao fato de que, para o cálculo da exergia, as simulações envolveram somente correntes de processo, enquanto que no caso do consumo de energia as simulações envolveram o processo como um todo, havendo uma maior quantidade de condições operacionais envolvidas e, deste modo, resultando em um erro relativo maior. Porém, visto que os resultados apresentaram um erro relativo inferior a 10%, foi possível validar o consumo de energia do processo nas simulações.

Constatou-se que a temperatura média termodinâmica e a eficiência de Carnot do vapor d'água praticamente mantiveram-se inalteradas na faixa de pressão adotada. Assim, dada a baixa sensibilidade da temperatura média termodinâmica em relação à pressão, foi possível adotar para a mesma um valor constante e equivalente a 447,6468 K para as condições adotadas, sendo este o valor da temperatura média termodinâmica utilizado em todos os trocadores de calor que usam vapor d'água de média pressão como utilidade no presente trabalho. Deste modo, foi possível contornar o problema de não haver acesso às propriedades das correntes de utilidade no simulador de processos Aspen HYSYS.

Os equipamentos que mais contribuem para a irreversibilidade do processo de absorção de CO_2 são a coluna de absorção e a coluna de destilação. Devido ao fato de tais equipamentos representarem as maiores fontes de irreversibilidade no processo, são adequados para serem utilizados na análise exergética, tendo sido usados nas análises do presente trabalho.

A eficiência racional e, sobretudo, a eficiência exergética mostraram-se inadequadas para serem utilizadas na análise exergética do processo de absorção de CO_2 . Isto se deve à elevada exergia química das correntes líquidas, principalmente no

que diz respeito à contribuição de reação. Assim, a irreversibilidade se mostrou o indicador mais adequado, sendo que, nas análises exergéticas do presente trabalho utilizou-se a irreversibilidade intensiva para averiguar se o aumento da captura de CO_2 compensa o aumento da irreversibilidade em um dado equipamento.

O processo de absorção de CO_2 mostrou-se sensível a determinadas variáveis operacionais, sendo a sensibilidade do processo a tais variáveis dependente da concentração de CO_2 no gás a ser tratado. Notou-se também um elevado impacto das variáveis operacionais relativas à absorvedora sobre a coluna de destilação, cuja recíproca não é verdadeira, uma vez que as variáveis relativas à coluna de destilação pouco influenciam a absorvedora. Além disso, verificou-se que no processo de absorção de CO_2 podem haver variáveis que, quando têm seu valor aumentado, reduzem a irreversibilidade da absorvedora mas aumentam a da retificadora, a exemplo da pressão de operação da absorvedora.

Um ponto de destaque foi que, diferentemente do que ocorre com a irreversibilidade extensiva, a irreversibilidade intensiva da coluna de absorção diminui conforme se aumenta a concentração de CO_2 no gás a ser tratado. Isto ocorre porque a vazão de CO_2 capturado aumenta mais consideravelmente do que a irreversibilidade extensiva da coluna, o que faz com que as irreversibilidades extensiva e intensiva possuam comportamentos opostos. Tal fenômeno não é observado na coluna de destilação devido à sua elevada irreversibilidade extensiva.

A irreversibilidade da coluna de destilação está fortemente atrelada ao consumo de energia no refeedor da coluna, o qual por sua vez é altamente dependente da vazão de água que entra no refeedor. Com isto, uma redução na vazão de água que entra no refeedor leva a uma redução na energia consumida no refeedor e, como consequência, a uma redução na irreversibilidade da retificadora.

Por meio das análises exergéticas, foi possível identificar as variáveis operacionais com maior influência na ineficiência do processo de absorção de CO_2 , assim como os meios através dos quais tais variáveis causam esta ineficiência. Deste modo, verificou-se que a eficiência do processo pode ser melhorada por dois meios: aumento da captura de CO_2 e redução do consumo de energia no refeedor. No tocante à captura de CO_2 , as variáveis que desempenham maior influência são o número de pratos e o diâmetro da coluna de absorção. Já as variáveis que mais impactam no consumo de energia no refeedor são a vazão de solvente (ou concentração de MEA no solvente), o prato de carga da retificadora, o número de pratos da retificadora e o diâmetro da retificadora. Assim, foi possível selecionar as variáveis operacionais a serem ajustadas nas seções seguintes.

Constatou-se que, apesar de possível, a aplicação do processo de absorção para a captura de CO_2 diretamente do ar atmosférico é dispendiosa em termos de energia. No caso do ar seco, o menor consumo de energia encontrado foi 1.435,41 vezes

superior ao do caso base da indústria do cimento, enquanto no caso do ar úmido foi 1.460,92 vezes superior. Assim sendo, a captura de CO_2 por meio do processo de absorção mostra-se mais vantajosa em fontes mais concentradas do gás, como é o caso das indústrias.

Após a realização do estudo de caso relativo à indústria do cimento, percebeu-se que o aumento do número de pratos da coluna de absorção levou não somente a uma redução na fração molar de CO_2 no gás tratado, como também a uma diminuição do consumo de energia e da irreversibilidade total do processo de absorção de CO_2 . Isto indica que uma melhoria na captura de CO_2 leva a uma redução no consumo de energia e na irreversibilidade total do processo.

Por fim, o menor consumo de energia encontrado após a realização do estudo de caso relativo à indústria do cimento foi de 452.220,06 kJ/kgmol de CO_2 capturado. Desta forma, comparou-se este valor com o valor obtido antes dos ajustes das variáveis operacionais ($6,27 \cdot 10^6$ kJ/kgmol de CO_2 capturado). Tal comparação permitiu constatar que o consumo de energia após os ajustes foi 13,86 vezes menor do que o registrado antes dos ajustes, o que indica o quão significativa pode ser a economia de energia caso o processo seja ajustado para as condições adequadas.

Capítulo 7

Sugestões para Trabalhos Futuros

- Aplicar a análise exergética ao processo de absorção de CO_2 utilizando outras variáveis operacionais;
- Aplicar a análise exergética a outras configurações do processo de absorção de CO_2 além da configuração clássica;
- Aplicar a análise exergética à compressão, transporte e armazenamento de CO_2 ;
- Utilizar outras ferramentas na análise exergética do processo de absorção de CO_2 , como outros simuladores de processos e linguagens de programação;
- Utilizar, na análise exergética do processo de absorção de CO_2 , colunas com diferentes recheios;
- Incluir outros indicadores de eficiência na análise exergética do processo de absorção de CO_2 ;
- Buscar outras equações de eficiência exergética para a coluna de absorção além da eficiência exergética simples;
- Aplicar a análise exergética ao processo de absorção de CO_2 utilizando outros solventes além do MEA;
- Aplicar a análise exergética a outros processos além do processo de absorção de CO_2 ;
- Aplicar a análise exergética ao processo de absorção de CO_2 utilizando inteligência artificial.

Referências Bibliográficas

- [1] AVELAR, A. M. *Cálculo de disponibilidade em simulador de processos*. Dissertação (mestrado), Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2013.
- [2] CHOE, C., HAIDER, J., LIM, H. “Carbon capture and liquefaction from methane steam reforming unit: 4E’s analysis (energy, exergy, economic, and environmental)”, *Applied Energy*, v. 332, 2023.
- [3] GHANNADZADEH, A., THERY-HETREUX, R., BAUDOIN, O., et al. “General methodology for exergy balance in ProSimPlus process simulator”, *Energy*, v. 44, pp. 38–59, 2012.
- [4] FERRARA, G., LANZINI, A., LEONE, P., et al. “Exergetic and exergoeconomic analysis of post-combustion CO_2 capture using MEA-solvent chemical absorption”, *Energy*, v. 130, pp. 113–128, 2017.
- [5] YULIA, F., SOFIANITA, R., PRAYOGO, K., et al. “Optimization of post combustion CO_2 absorption system monoethanolamine (MEA) based for 320 MW coal-fired power plant application - exergy and exergoenvironmental analysis”, *Case Studies in Thermal Engineering*, v. 26, 2021.
- [6] YU, Y. S., LI, Y., LI, Q., et al. “An innovative process for simultaneous removal of CO_2 and SO_2 from flue gas of a power plant by energy integration”, *Energy Conversion and Management*, v. 50, pp. 2885–2892, 2009.
- [7] DUBOIS, L., THOMAS, D. “Comparison of various configurations of the absorption-regeneration process using different solvents for the post-combustion CO_2 capture applied to cement plant flue gases”, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, v. 69, pp. 20–35, 2018.
- [8] GERVASI, J., DUBOIS, L., THOMAS, D. “Simulation of the post-combustion CO_2 capture with Aspen HYSYS software: study of different configurations of an absorption-regeneration process for the application to cement flue gases”, *Energy Procedia*, v. 63, pp. 1018–1028, 2014.

- [9] SALIMI, M., KARIMI, V., HOSSEINIFARD, F., et al. “Techno-economic study of different process configurations of CO_2 capture by MEA absorption and utilization of an MCDM method for their ranking”, *Energy Reports*, v. 12, pp. 593–607, 2024.
- [10] AGHDAM, A. H., SHALTOUKI, S. H., NIKPEY, A. H. “Comprehensive evaluation of a novel indirect hybrid solar dryer: conventional and advanced exergy analysis”, *Thermal Science and Engineering Progress*, v. 53, 2024.
- [11] SZARGUT, J. *Exergy method: technical and ecological applications*. Southampton, Boston, WIT Press, 2005.
- [12] TAO, S., YU, Q., DUAN, W., et al. “Optimization of exergy destruction minimization in moving bed heat exchanger with airflow-assisted cooling”, *Chemical Engineering Science*, v. 300, 2024.
- [13] ØYEN, S., JAKOBSEN, H., HAUG-WARBERG, T., et al. “Differential Gibbs and Helmholtz reactor models for ideal and non-ideal gases: applications to the SMR and methanol processes”, *Chemical Engineering Science*, v. 234, 2021.
- [14] SAFARI, A. “Automation of control degrees of freedom in Aspen Hysys”, *IFAC Journal of Systems and Control*, v. 19, 2022.
- [15] MAO, J., LI, C., YUN, Y., et al. “Biphasic solvents based on dual-functionalized ionic liquid for enhanced post-combustion CO_2 capture and corrosion inhibition during the absorption process”, *Chemical Engineering Journal*, v. 481, 2024.
- [16] GREEN, D. W., SOUTHARD, M. Z. *Perry’s chemical engineer’s handbook*. 9 ed. , McGraw-Hill Education, 2019.
- [17] LEMOS, P. R. *Avaliação do processo de absorção de CO_2 com aminas Utilizando HYSYS*. Dissertação (mestrado), Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2011.
- [18] STRUCHTRUP, H., ROSEN, M. A. “How much work is lost in an irreversible turbine?” *Exergy, an International Journal*, v. 2, pp. 152–158, 2002.
- [19] SMITH, J. M., NESS, H. C. V., ABBOTT, M. M., et al. *Introduction to chemical engineering thermodynamics*. 8 ed. Nova Iorque, McGraw-Hill Education, 2018.

- [20] NAG, P. K. *Basic and applied thermodynamics*. Nova Delhi, Tata McGraw-Hill, 2002.
- [21] NAG, P. K. *Engineering thermodynamics*. 5 ed. Nova Delhi, McGraw Hill Education, 2013.
- [22] ZHAO, Y., WANG, T., ZHOU, B., et al. “Exergy analysis of a novel ironmaking process combining coal gasification with the smelting reduction of iron ore”, *Fuel*, v. 372, 2024.
- [23] SZARGUT, J., MORRIS, D., STEWARD, F. *Exergy analysis of thermal, chemical, and metallurgical processes*. Nova Iorque, Hemisphere Publishing Corporation, 1988.
- [24] ABDOLLAHI-DEMNEH, F., MOOSAVIAN, M. A., OMIDKHAH, M. R., et al. “Calculating exergy in flowsheeting simulators: a HYSYS implementation”, *Energy*, v. 36, pp. 5320–5327, 2011.
- [25] ZHANG, Y., CHEN, H., CHEN, C. C., et al. “Rate-based process modeling study of CO_2 capture with aqueous monoethanolamine solution”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 48, pp. 9233–9246, 2009.
- [26] SONG, Y., CHEN, C. C. “Symmetric electrolyte nonrandom two-liquid activity coefficient model”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 48, pp. 7788–7797, 2009.
- [27] ZHANG, Y., CHEN, C. C. “Thermodynamic modeling for CO_2 absorption in aqueous MDEA solution with electrolyte NRTL model”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 50, pp. 163–175, 2011.
- [28] ZHANG, Y., QUE, H., CHEN, C. C. “Thermodynamic modeling for CO_2 absorption in aqueous MEA solution with electrolyte NRTL model”, *Fluid Phase Equilibria*, v. 311, pp. 68–76, 2011.
- [29] MATSUKAWA, H., OTAKE, K. “Estimation of the interaction parameters between carbon dioxide and an organic solvent by the Peng–Robinson equation of state via an artificial neural network”, *Fluid Phase Equilibria*, v. 585, 2024.
- [30] YANG, S., WANG, Y., GAO, J., et al. “Performance analysis of a novel cascade absorption refrigeration for low-grade waste heat recovery”, *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, v. 6, pp. 8350–8363, 2018.

- [31] GALDINO, L. T. *Termodinâmica da precipitação de sais utilizando o modelo NRTL-eletrólitos*. Dissertação (mestrado), Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2021.
- [32] GEUZEBROEK, F. H., SCHNEIDERS, L. H. J. M., KRAAIJVELD, G. J. C., et al. “Exergy analysis of alkanolamine-based CO_2 removal unit with Aspen Plus”, *Energy*, v. 29, pp. 1241–1248, 2004.
- [33] AMROLLAHI, Z., ERTESVAG, I. S., BOLLAND, O. “Optimized process configurations of post-combustion CO_2 capture for natural-gas-fired power plant - exergy analysis”, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, v. 5, pp. 1393–1405, 2011.
- [34] WANG, B., JIN, H., ZHENG, D. “Recovery of CO_2 with MEA and K_2CO_3 absorption in the IGCC system”, *International Journal of Energy Research*, v. 28, pp. 521–535, 2004.
- [35] ROCHELLE, G., CHEN, E., FREEMAN, S., et al. “Aqueous piperazine as the new standard for CO_2 capture technology”, *Chemical Engineering Journal*, v. 171, pp. 725–733, 2011.
- [36] VALENTI, G., BONALUMI, D., MACCHI, E. “Energy and exergy analysis for the carbon capture with the chilled ammonia process (CAP)”, *Energy Procedia*, v. 1, pp. 1059–1066, 2009.
- [37] ZHANG, G., YANG, Y., XU, G., et al. “ CO_2 capture by chemical absorption in coal-fired power plants: energy-saving mechanism, proposed methods, and performance analysis”, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, v. 39, pp. 449–462, 2015.
- [38] FEYZI, V., BEHESHTI, M. “Exergy analysis and optimization of reactive distillation column in acetic acid production process”, *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification*, v. 120, pp. 161–172, 2017.
- [39] EBRAHIMI, A., GHORBANI, B., ZIABASHARHAGH, M. “Exergy and economic analysis of an innovative integrated system for cogeneration of treated biogas and liquid carbon dioxide using absorption-compression refrigeration system and ORC/Kalina power cycles through geothermal energy”, *Process Safety and Environmental Protection*, v. 158, pp. 257–281, 2022.
- [40] ESMAEILI, M. S., MEHRPOOYA, M. “Modeling and exergy analysis of an integrated cryogenic refrigeration system and superconducting magnetic energy storage”, *Journal of Energy Storage*, v. 73, 2023.

- [41] HAJIALIGOL, N., FATTAHI, A., KARIMI, N., et al. “Hybridized power-hydrogen generation using various configurations of Brayton-organic flash Rankine cycles fed by a sustainable fuel: exergy and exergoeconomic analysis with ANN prediction”, *Energy*, v. 290, 2024.
- [42] SEZER, S., ÖZVEREN, U. “Investigation of syngas exergy value and hydrogen concentration in syngas from biomass gasification in a bubbling fluidized bed gasifier by using machine learning”, *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 46, pp. 20377–20396, 2021.
- [43] HASSAN, S. M. N. *Techno-economic study of CO₂ capture process for cement plants*. Dissertação (mestrado), Universidade de Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada, 2005.
- [44] MOHAMADI-BAGHMOLAEI, M., HAJIZADEH, A., ZENDEHBOUDI, S., et al. “Advanced exergy analysis of an acid gas removal plant to explore operation improvement potential toward cleaner production”, *Energy & Fuels*, v. 35, pp. 9570–9588, 2021.
- [45] YOUNG, A. F., VILLARDI, H. G. D., ARAUJO, L. S., et al. “Detailed design and economic evaluation of a cryogenic air separation unit with recent literature solutions”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 60, pp. 14830–14844, 2021.

Apêndice A

Código da Variável do Usuário Temperatura Ambiente

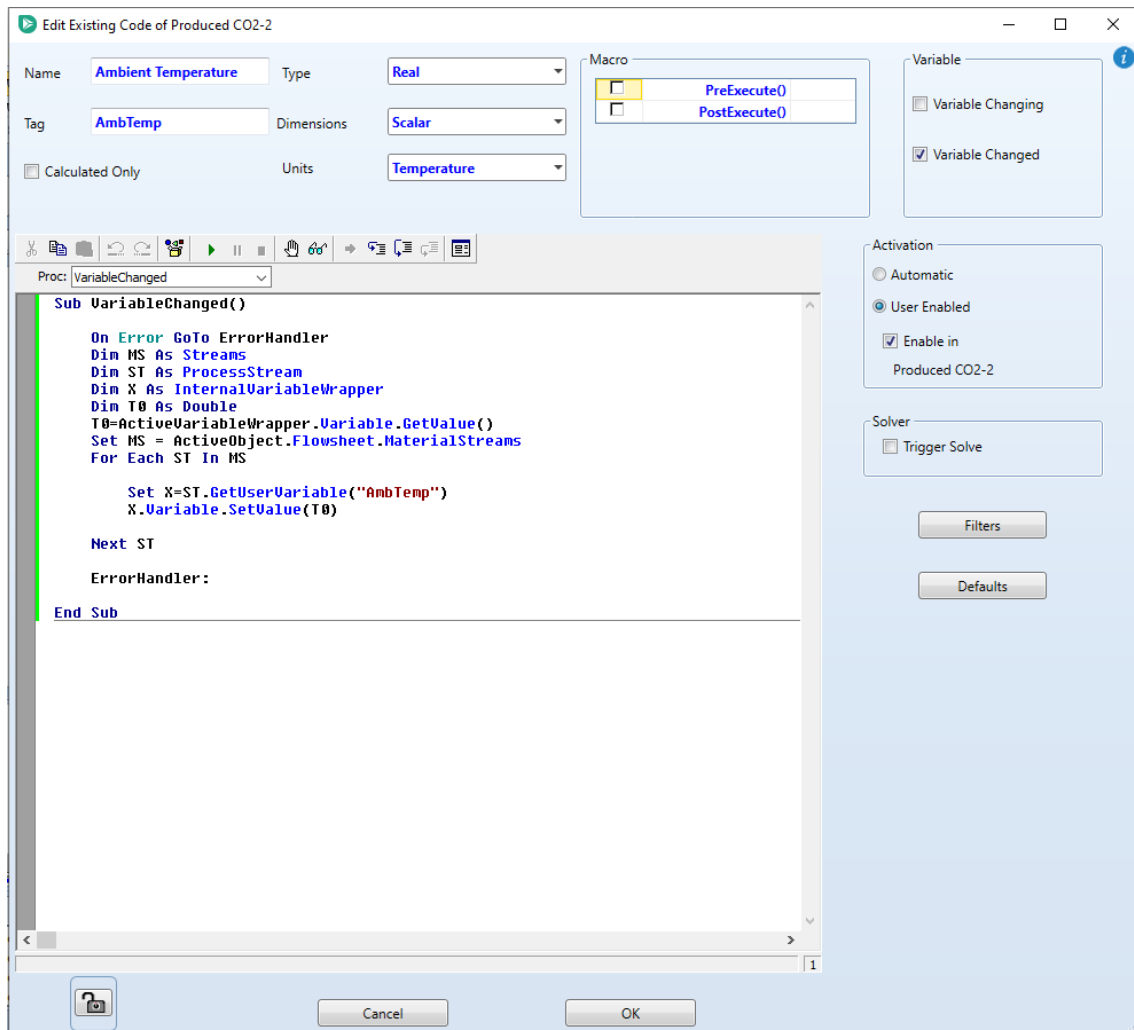


Figura A.1: Código relativo à variável do usuário temperatura ambiente.

Apêndice B

Código da Variável do Usuário Pressão Ambiente

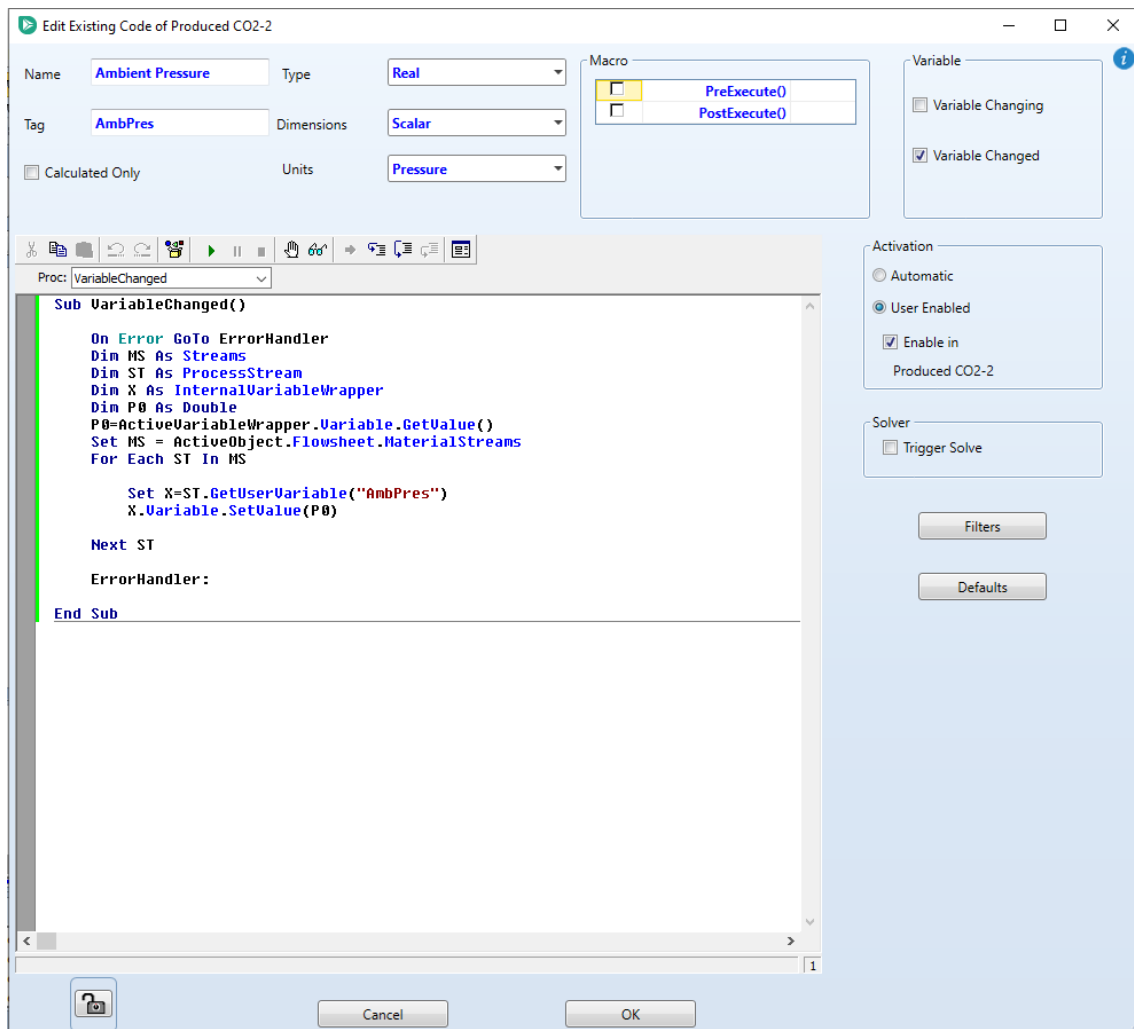


Figura B.1: Código relativo à variável do usuário pressão ambiente.

Apêndice C

Código da Variável do Usuário

Pressão Parcial de

Xenônio/Oxigênio/Neônio/ Nitrogênio/
Criptônio/Hélio/Água/Óxido de
Deutério/Dióxido de

Carbono/Argônio no Estado Morto
de Referência

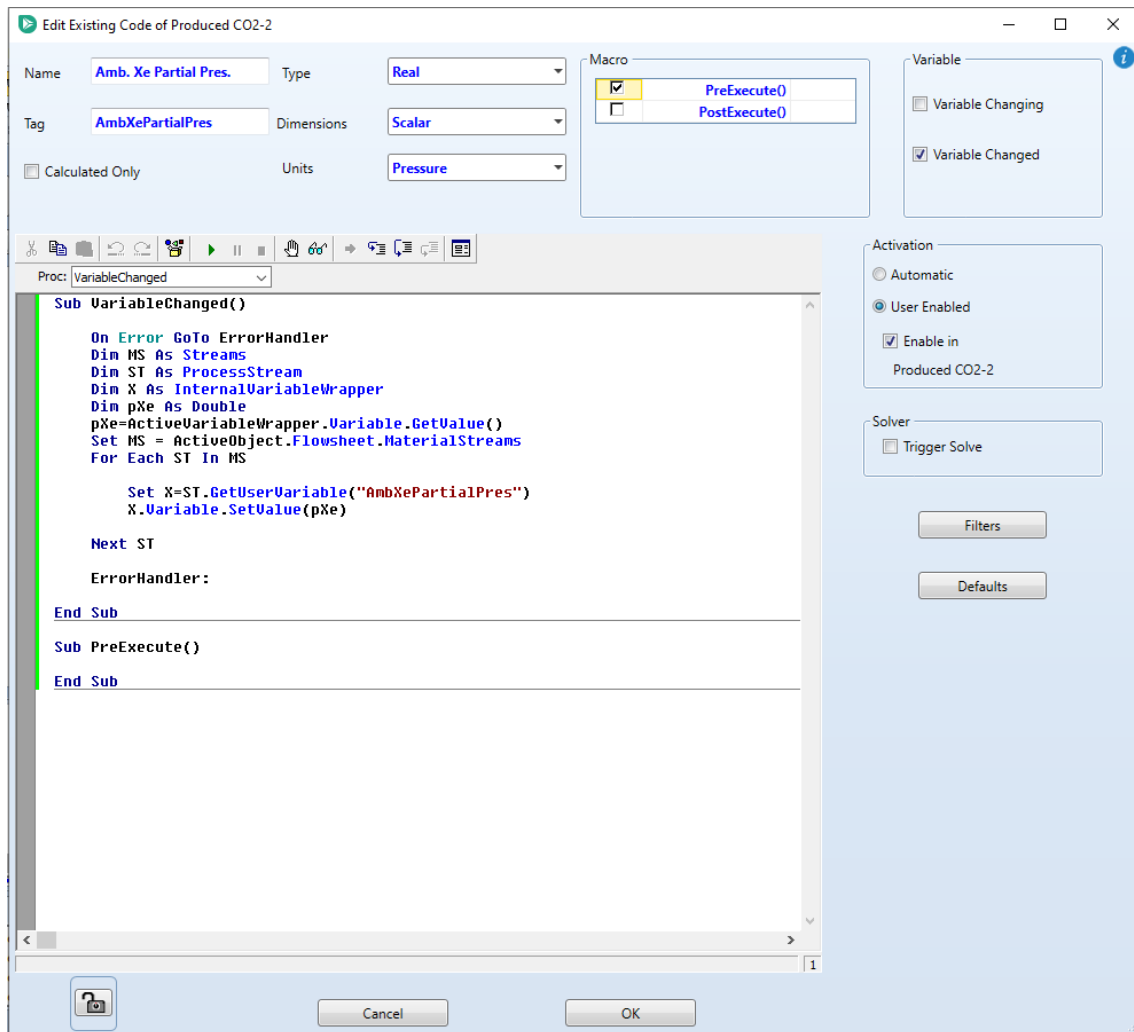


Figura C.1: Código relativo à variável do usuário pressão parcial de xenônio/oxigênio/neônio/nitrogênio/criptônio/hélio/água/óxido de deutério/dióxido de carbono/argônio no estado morto de referência.

Apêndice D

Código da Variável do Usuário
Exergia Física em Unidade de
Potência

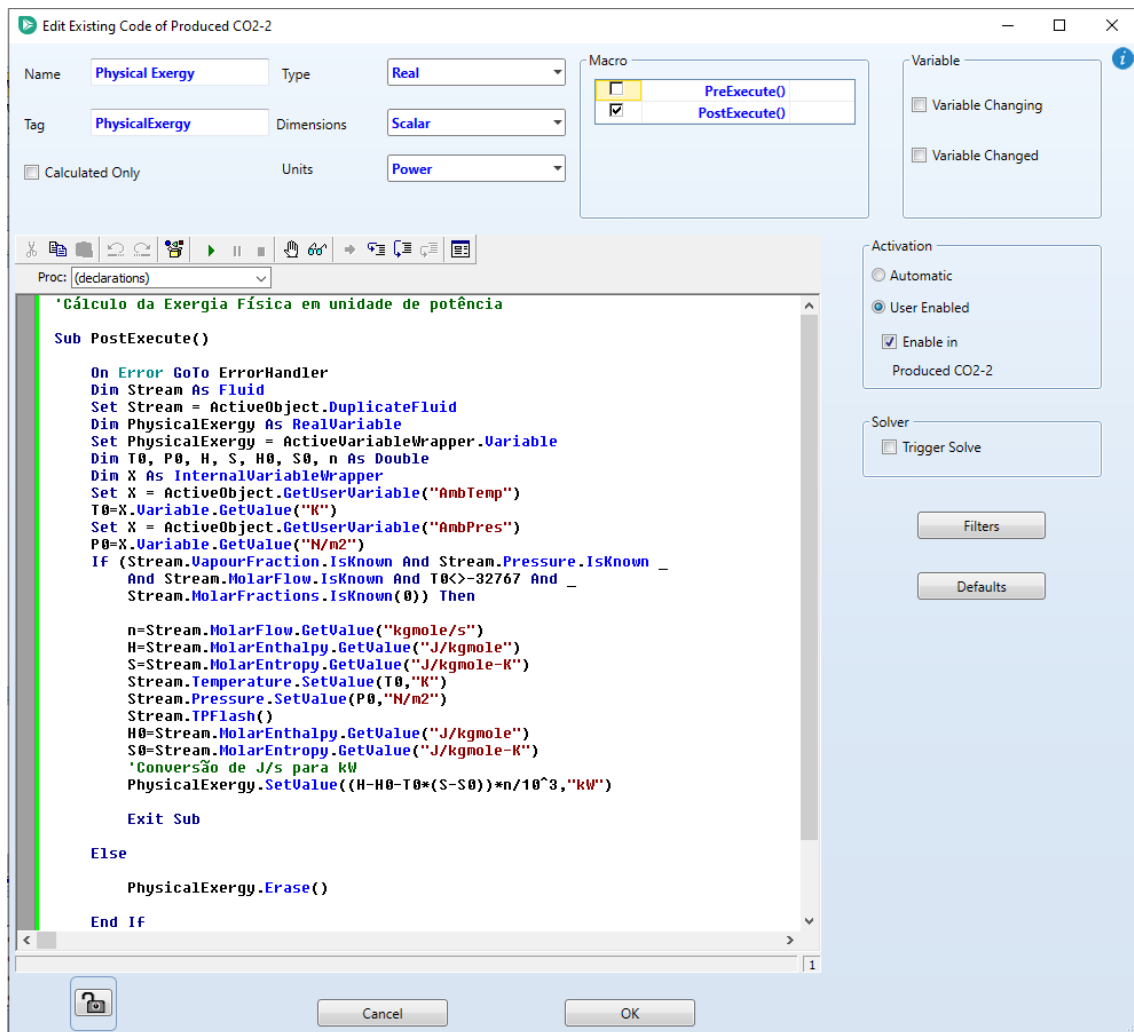


Figura D.1: Código relativo à variável do usuário exergia física em unidade de potência - parte a.

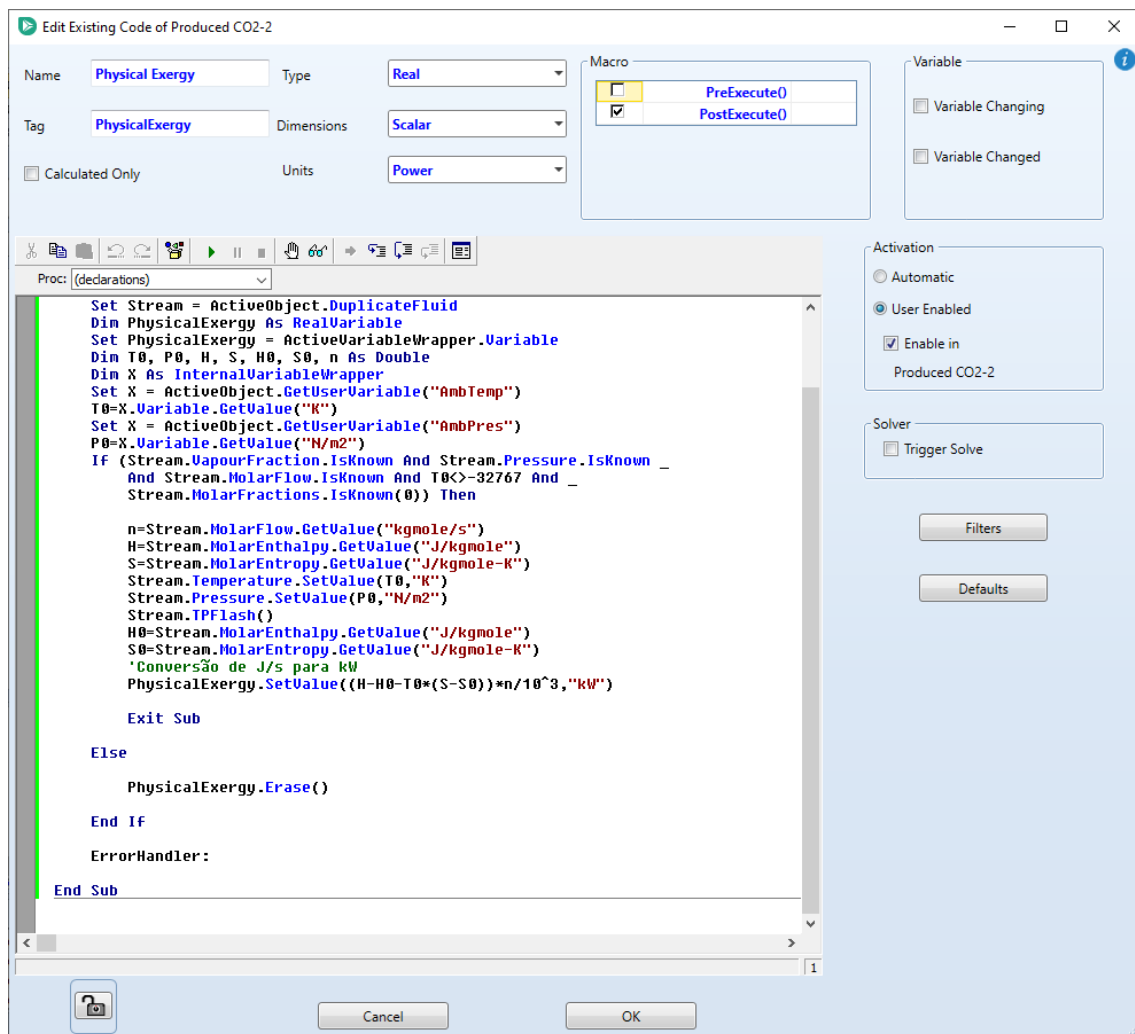


Figura D.2: Código relativo à variável do usuário exergia física em unidade de potência - parte b.

Apêndice E

Código da Variável do Usuário

Exergia Química em Unidade de

Potência

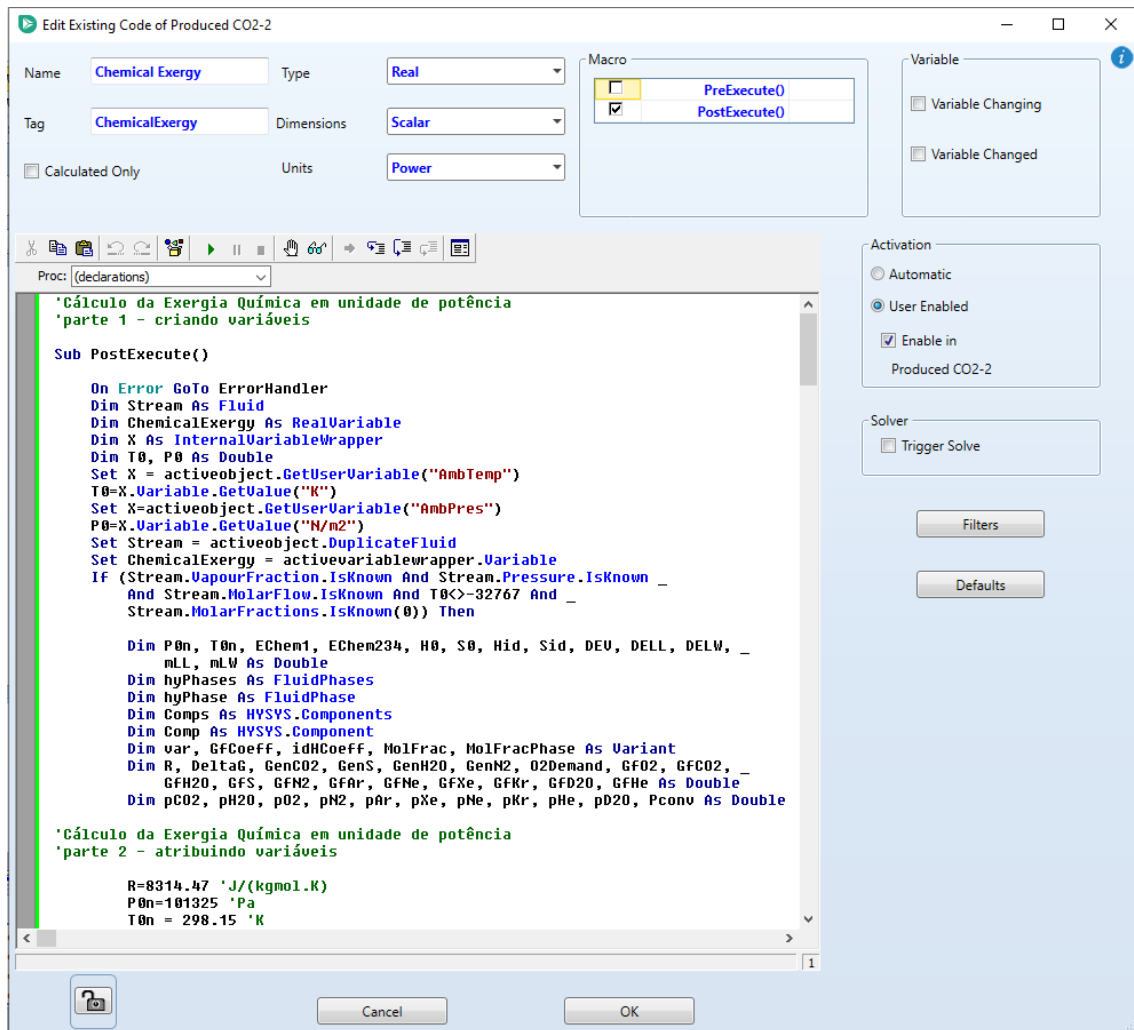


Figura E.1: Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte a.

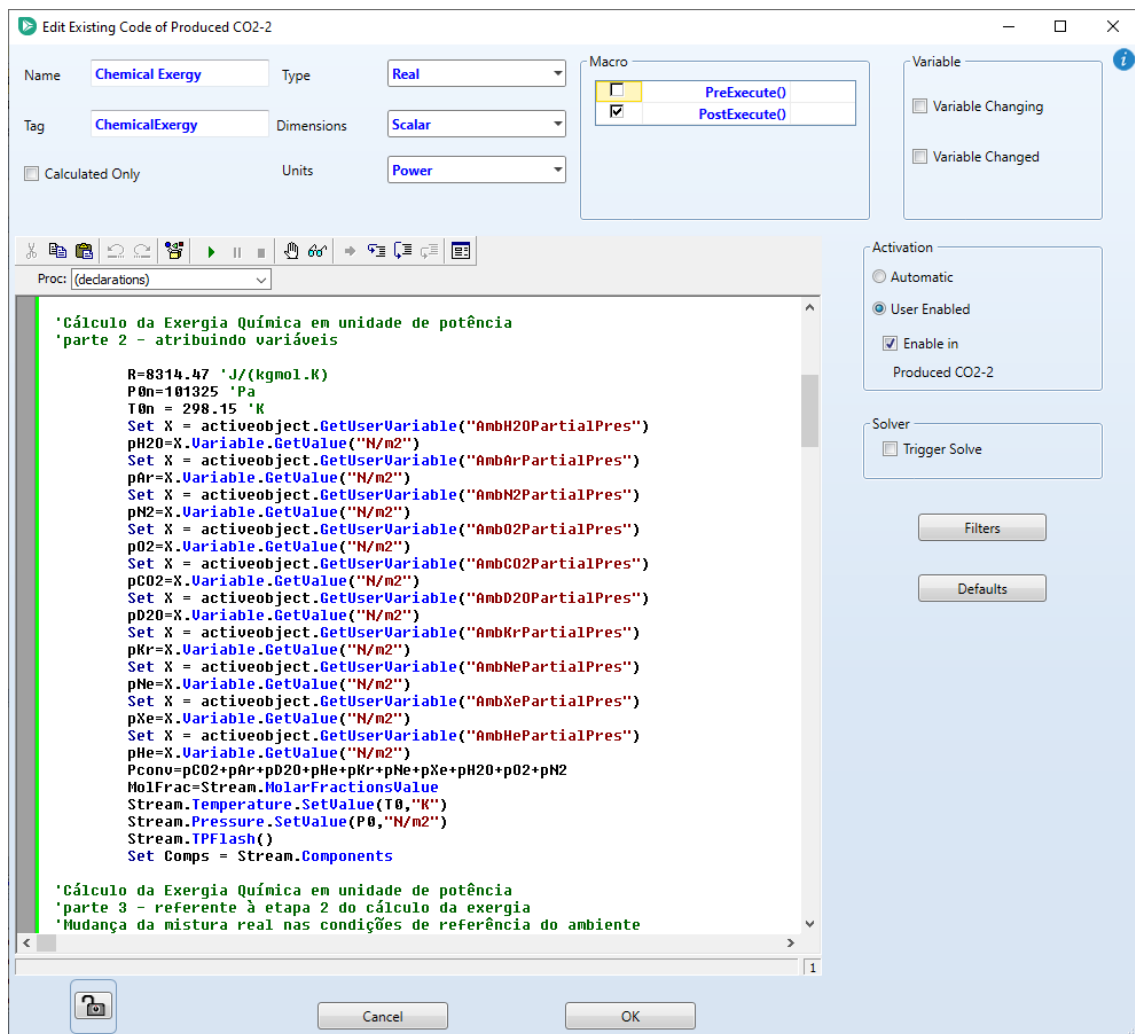


Figura E.2: Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte b.

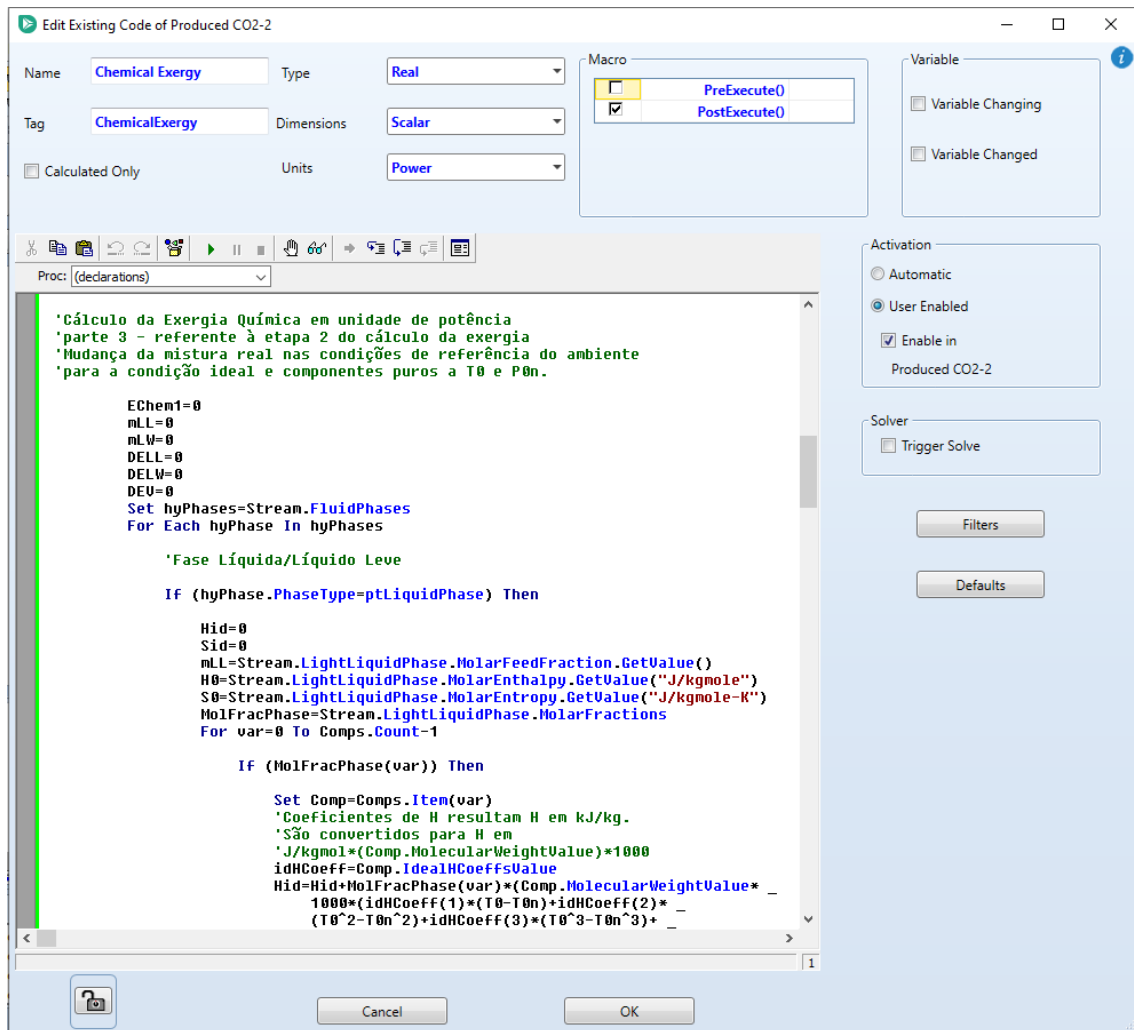


Figura E.3: Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte c.

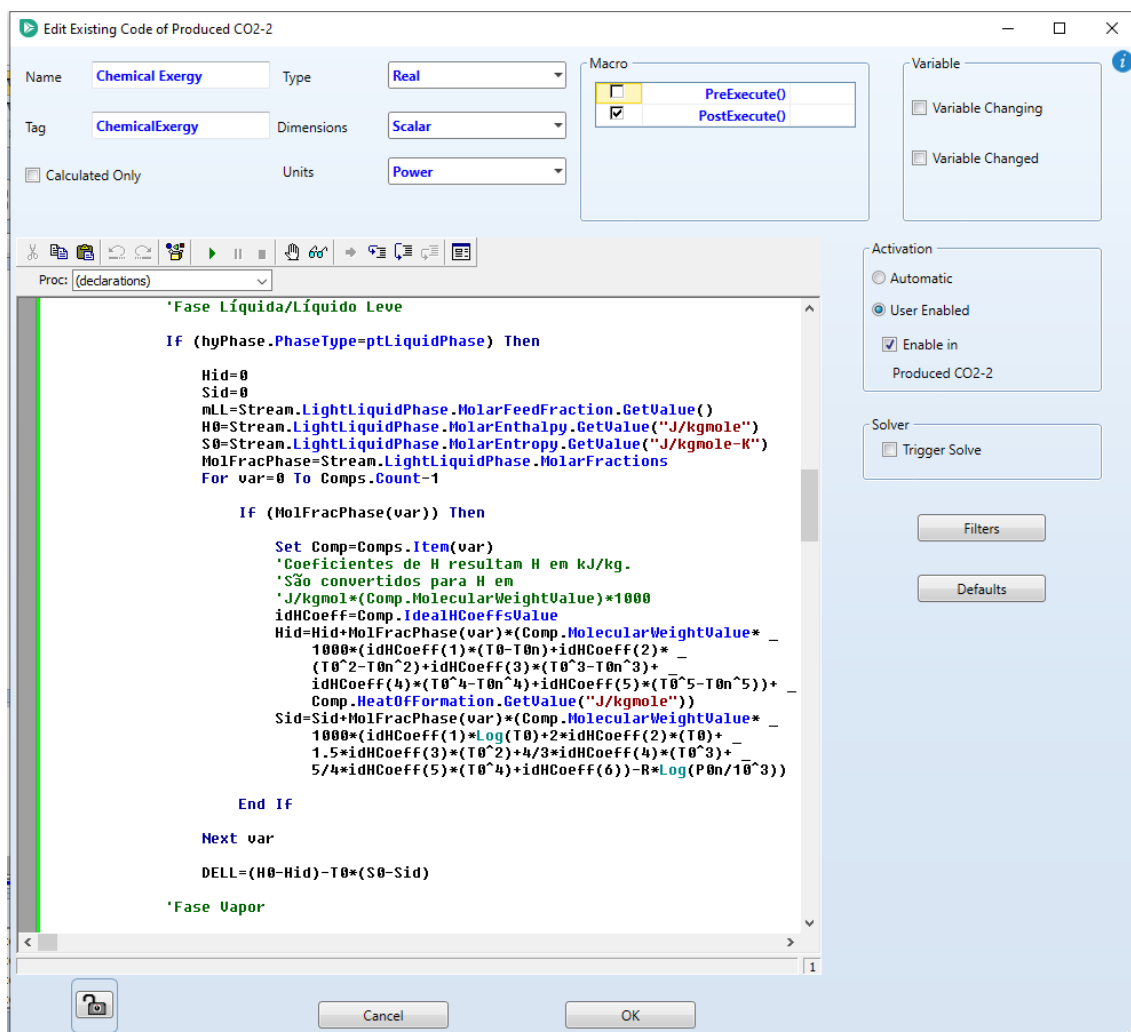


Figura E.4: Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte d.

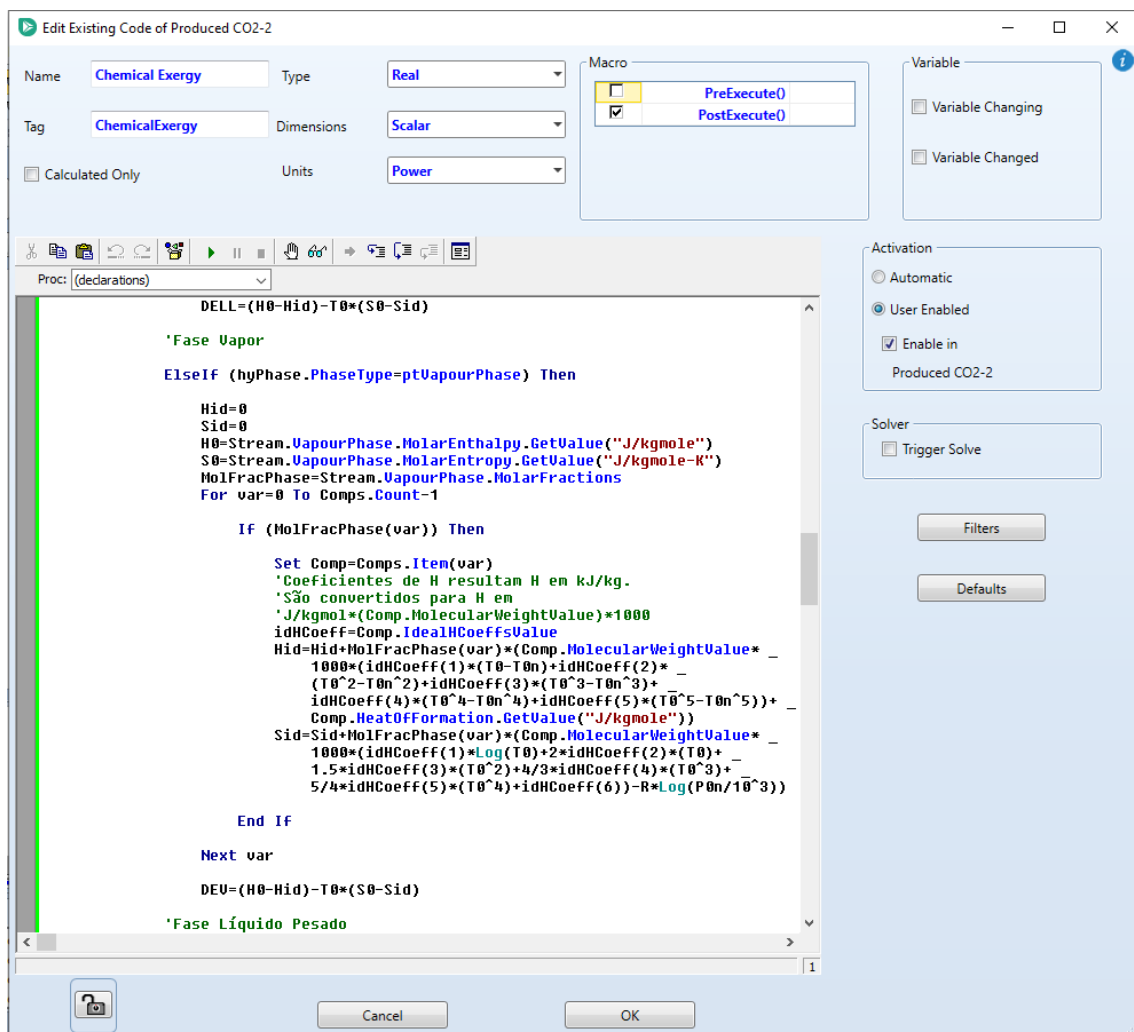


Figura E.5: Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte e.

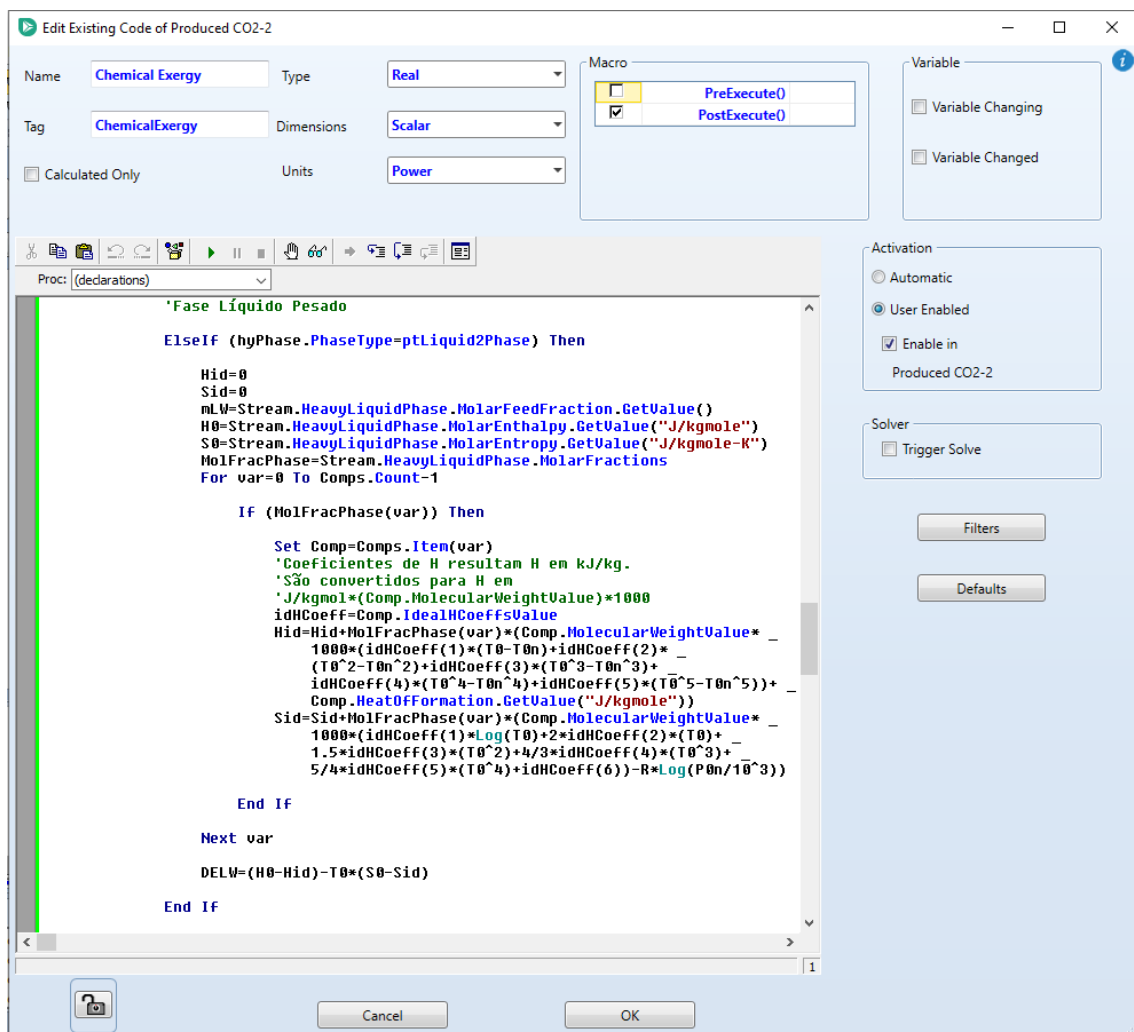


Figura E.6: Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte f.

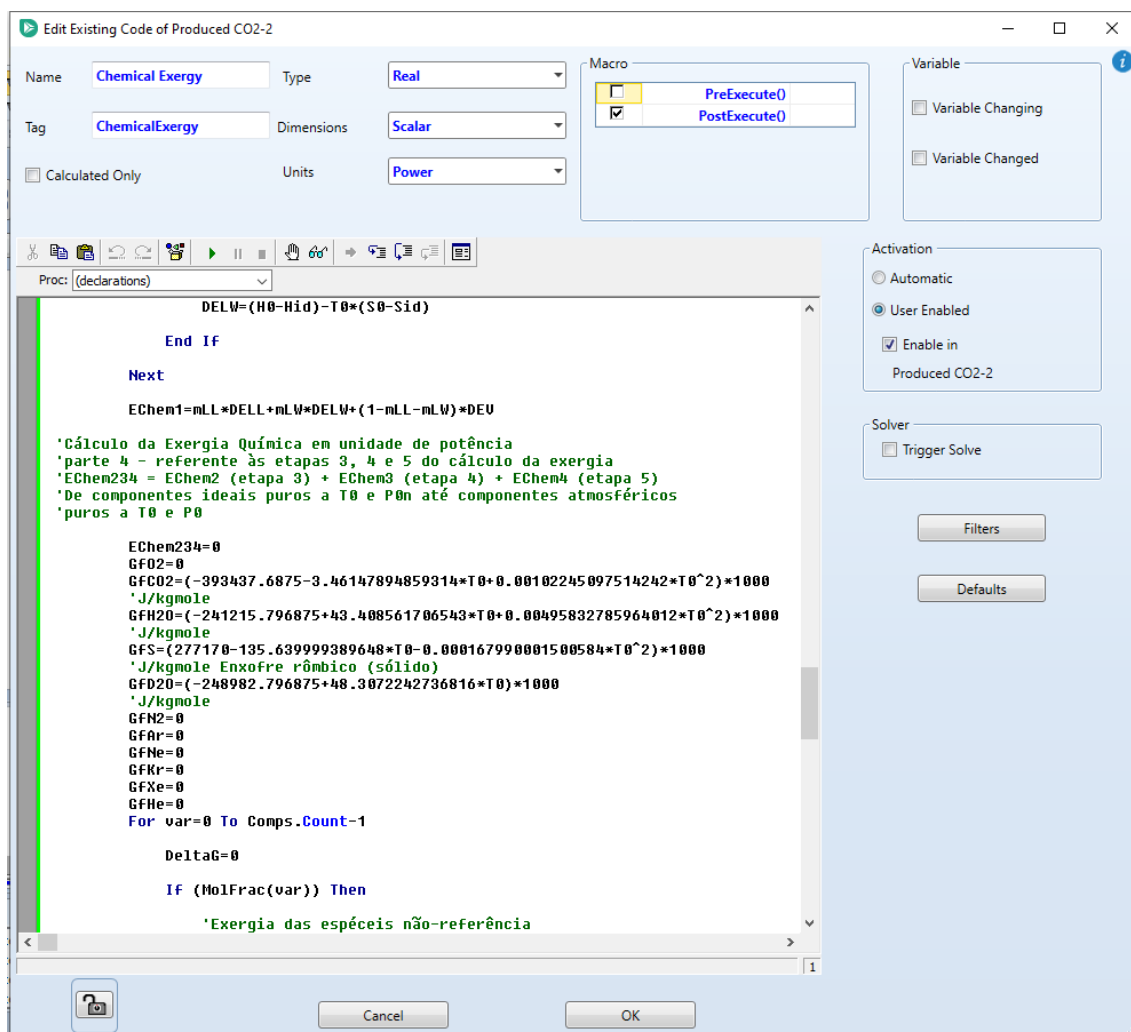


Figura E.7: Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte g.

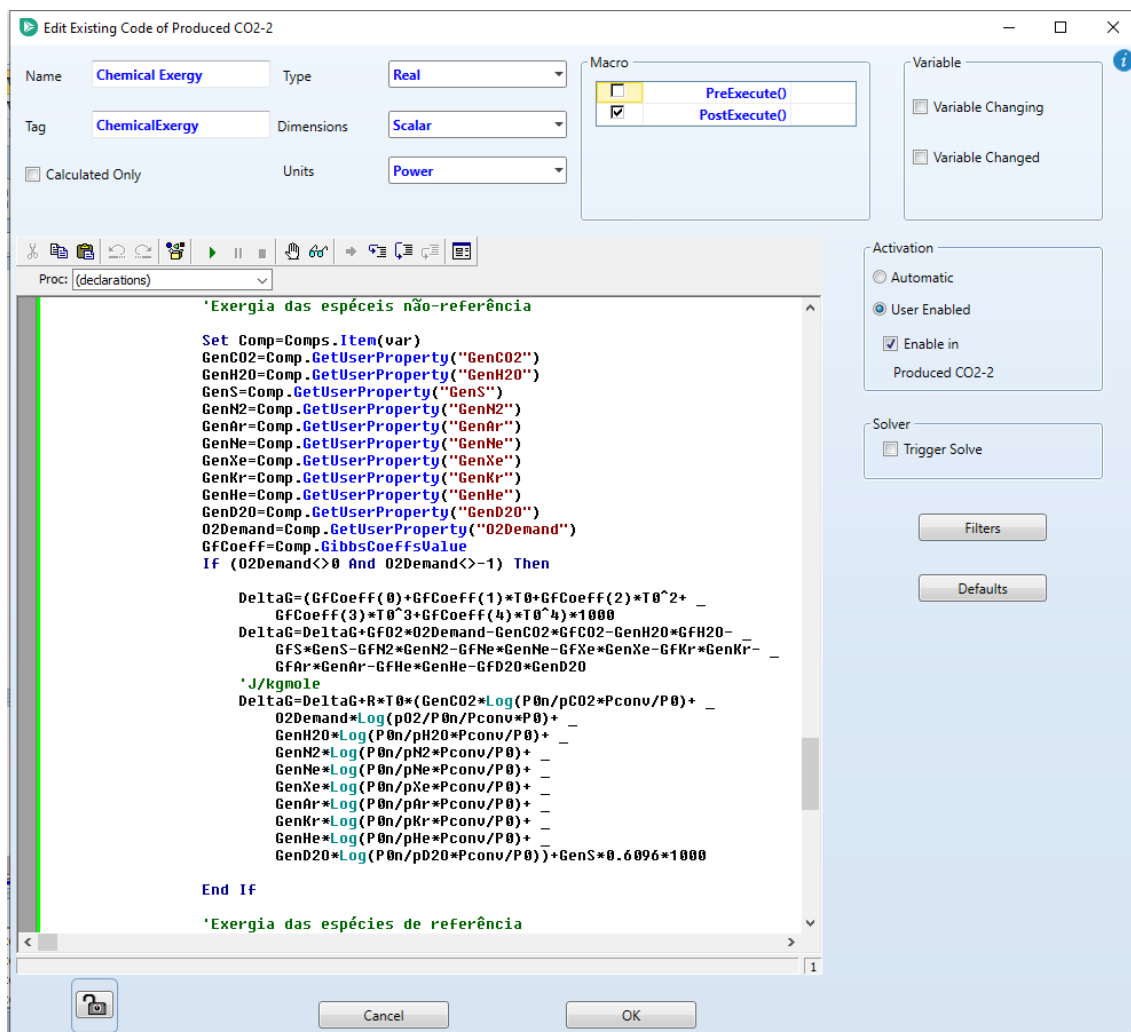


Figura E.8: Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte h.

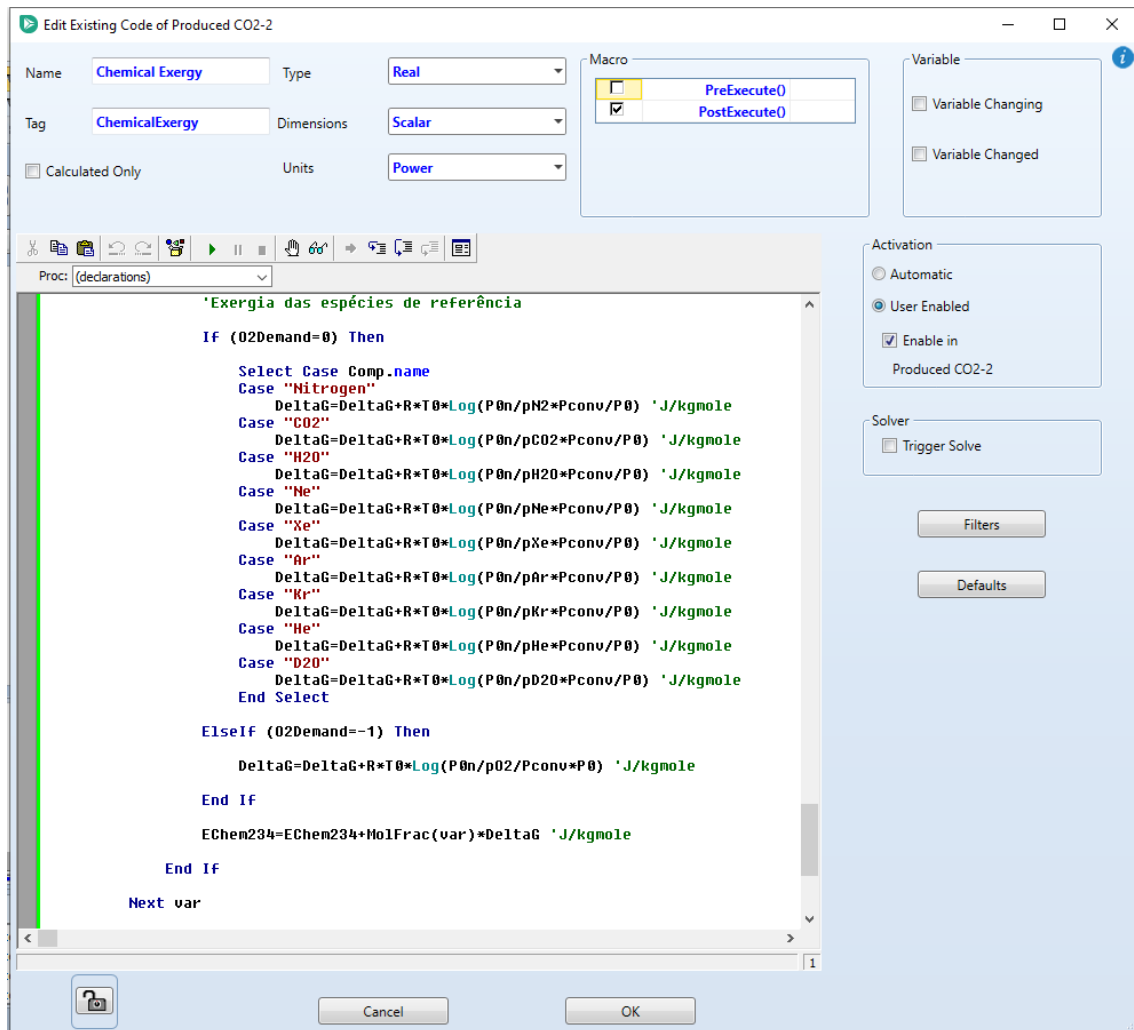


Figura E.9: Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte i.

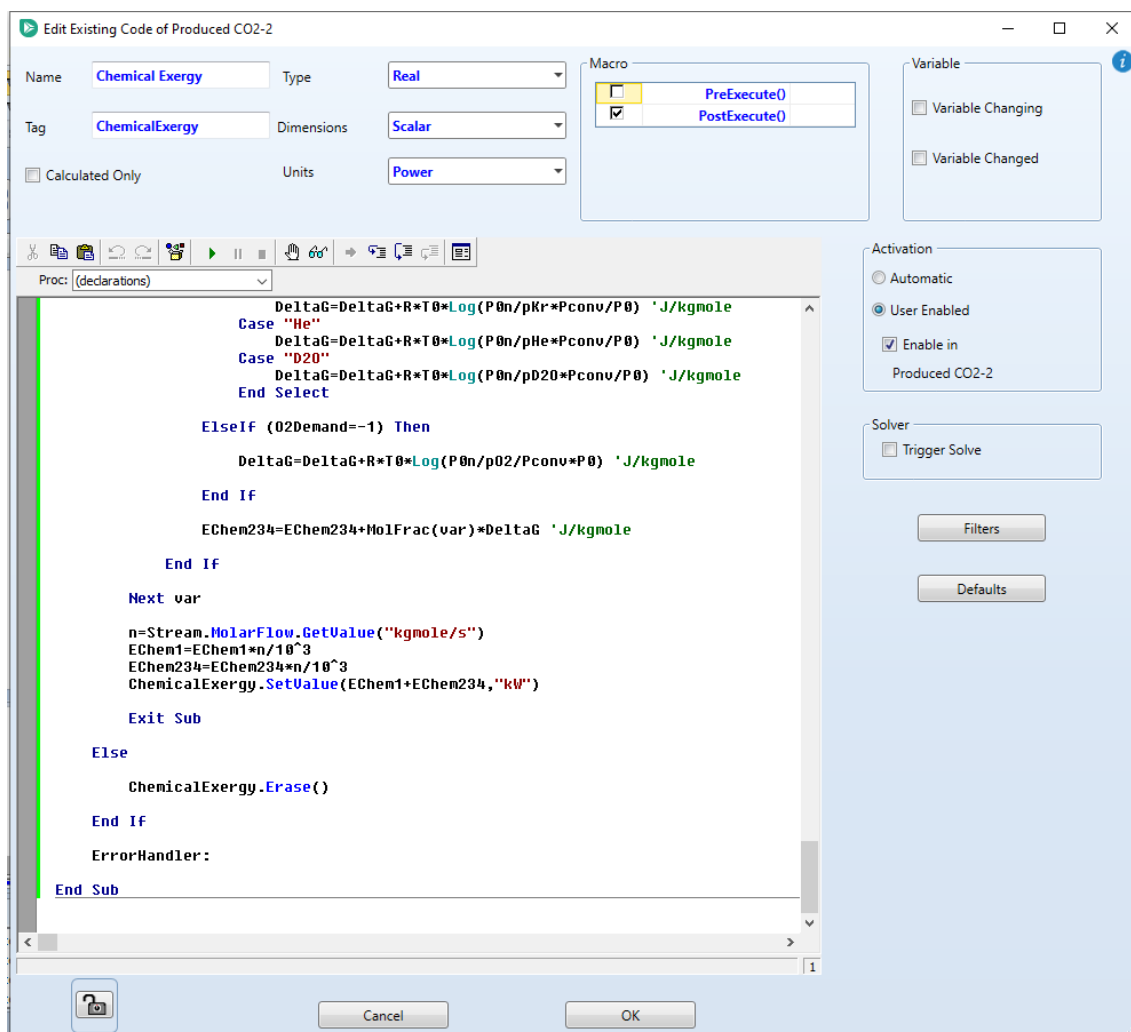


Figura E.10: Código relativo à variável do usuário exergia química em unidade de potência - parte j.

Apêndice F

Código da Variável do Usuário Exergia em Unidade de Potência

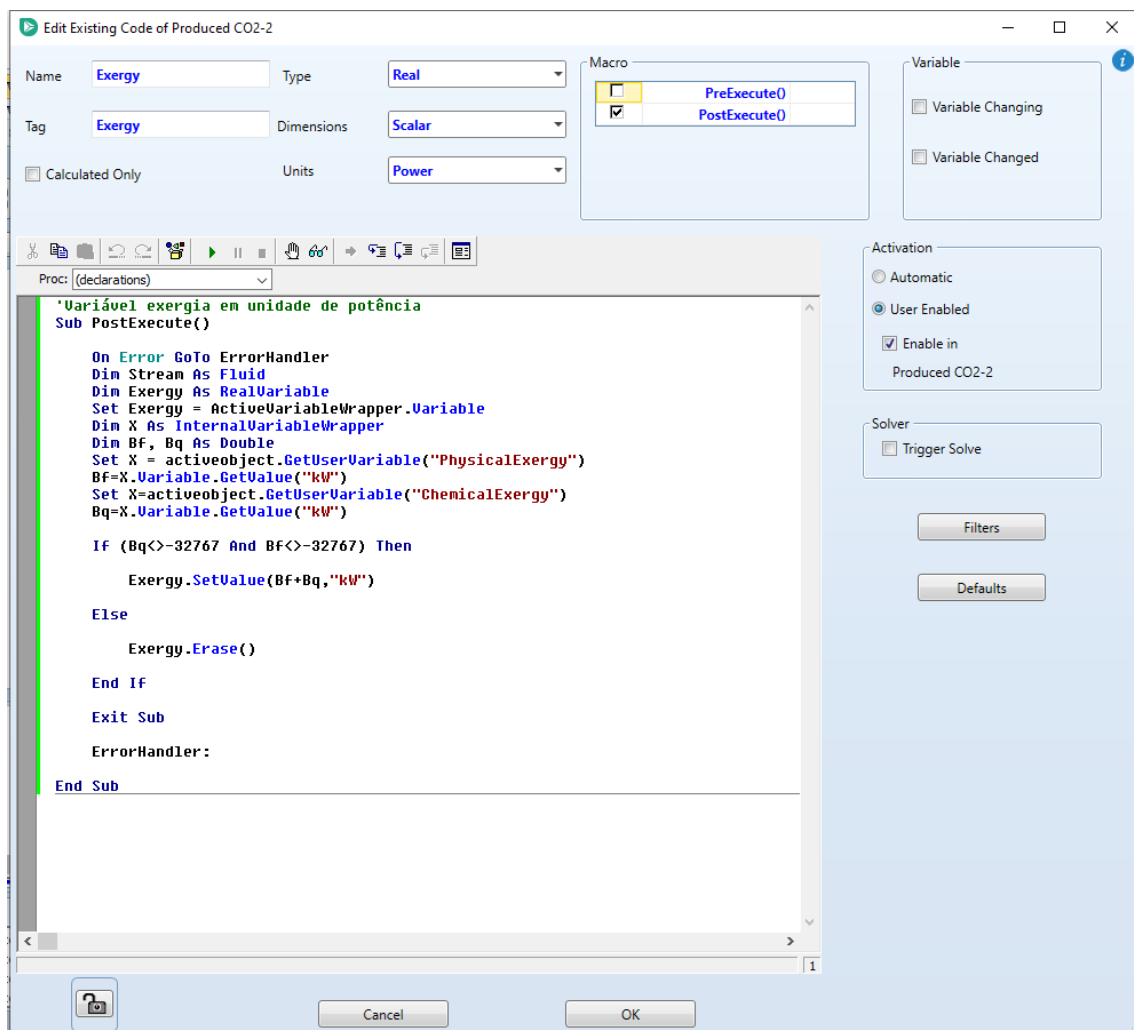


Figura F.1: Código relativo à variável do usuário exergia em unidade de potência.

Apêndice G

Código da Variável do Usuário

Temperatura Média Termodinâmica

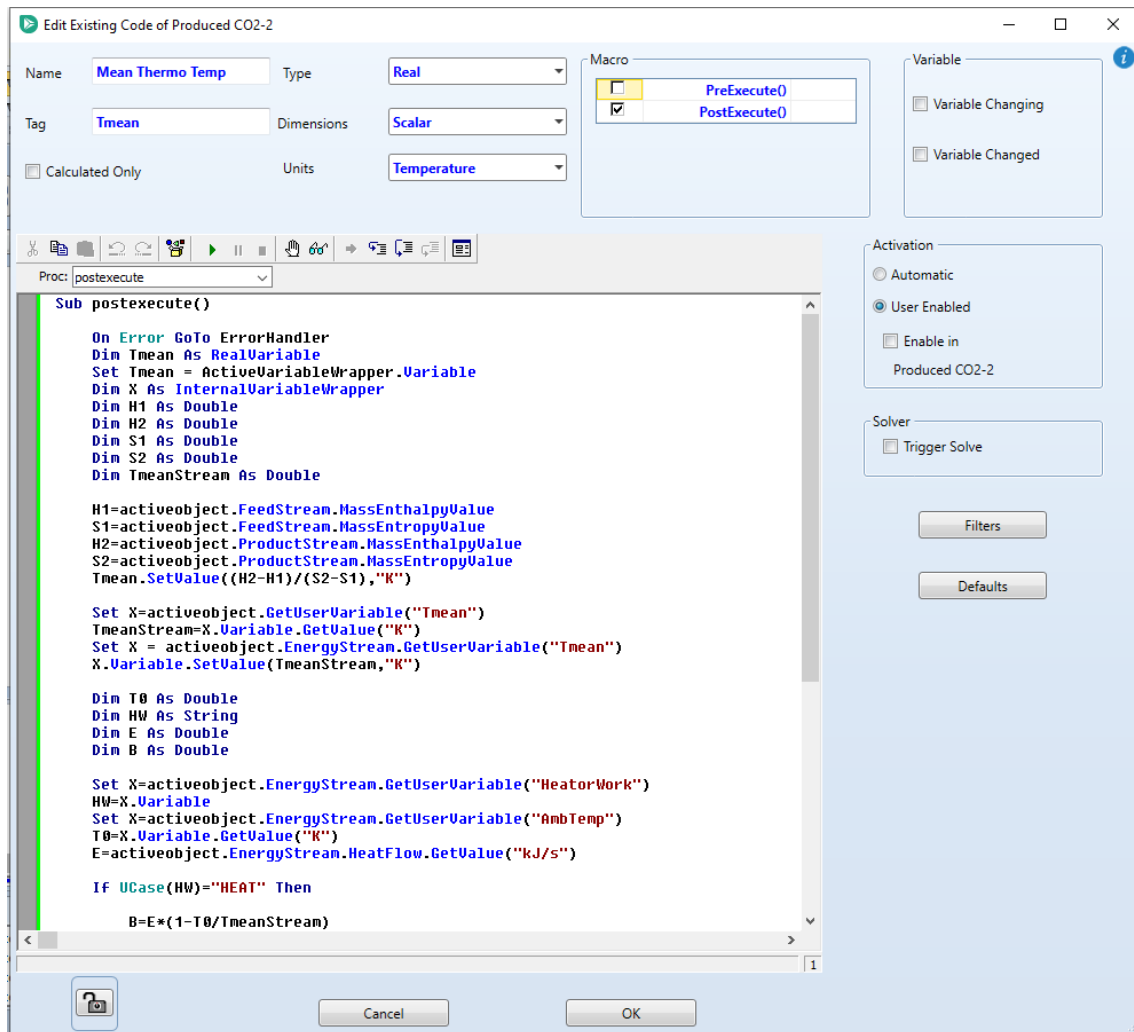


Figura G.1: Código relativo à variável do usuário temperatura média termodinâmica. Tal variável também identifica o tipo de corrente de energia em questão, calcula e atribui o valor da exergia contida na corrente de energia, sendo utilizada em trocadores de calor - parte a.

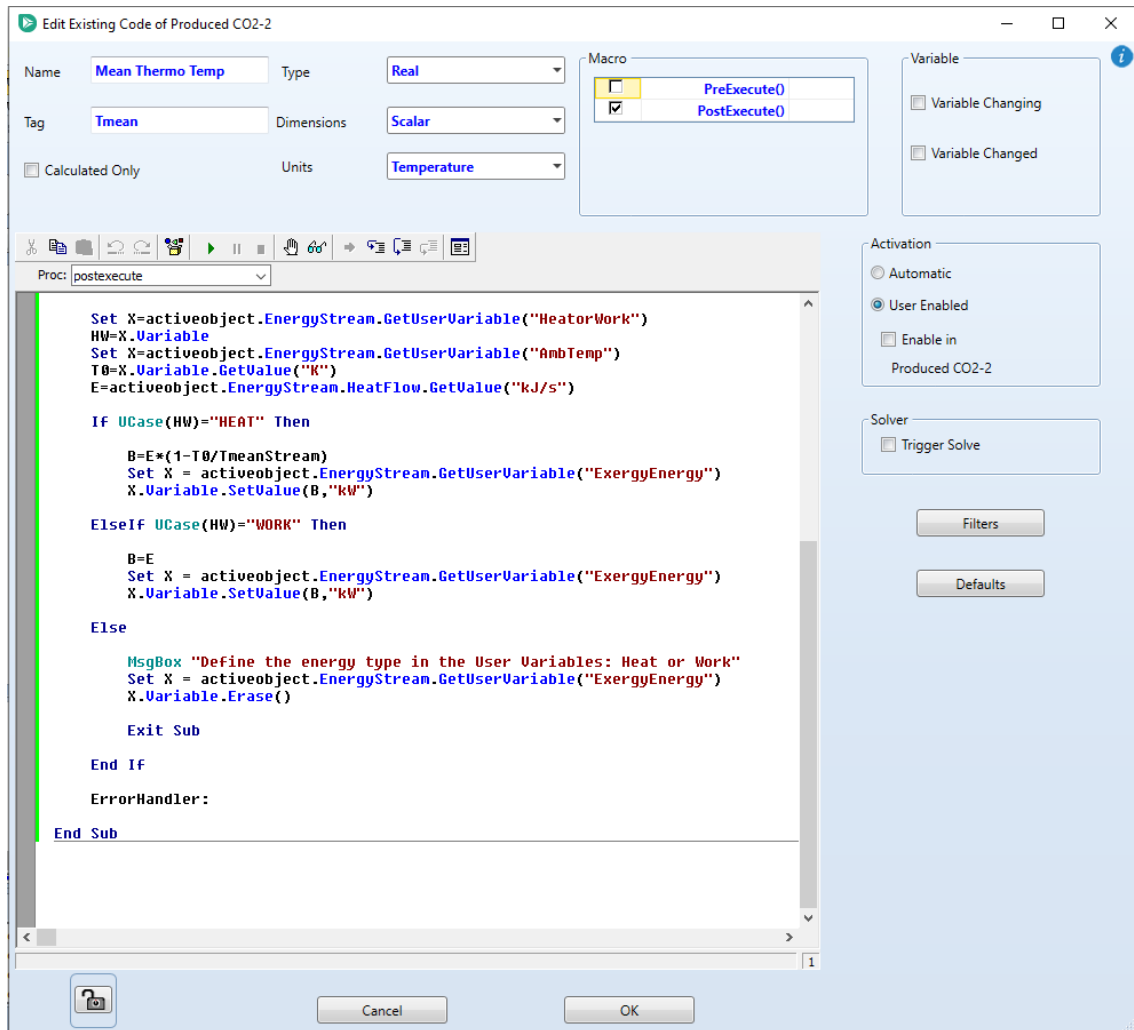


Figura G.2: Código relativo à variável do usuário temperatura média termodinâmica. Tal variável também identifica o tipo de corrente de energia em questão, calcula e atribui o valor da exergia contida na corrente de energia, sendo utilizada em trocadores de calor - parte b.

Apêndice H

Código da Variável do Usuário

Exergia de uma Corrente de Energia

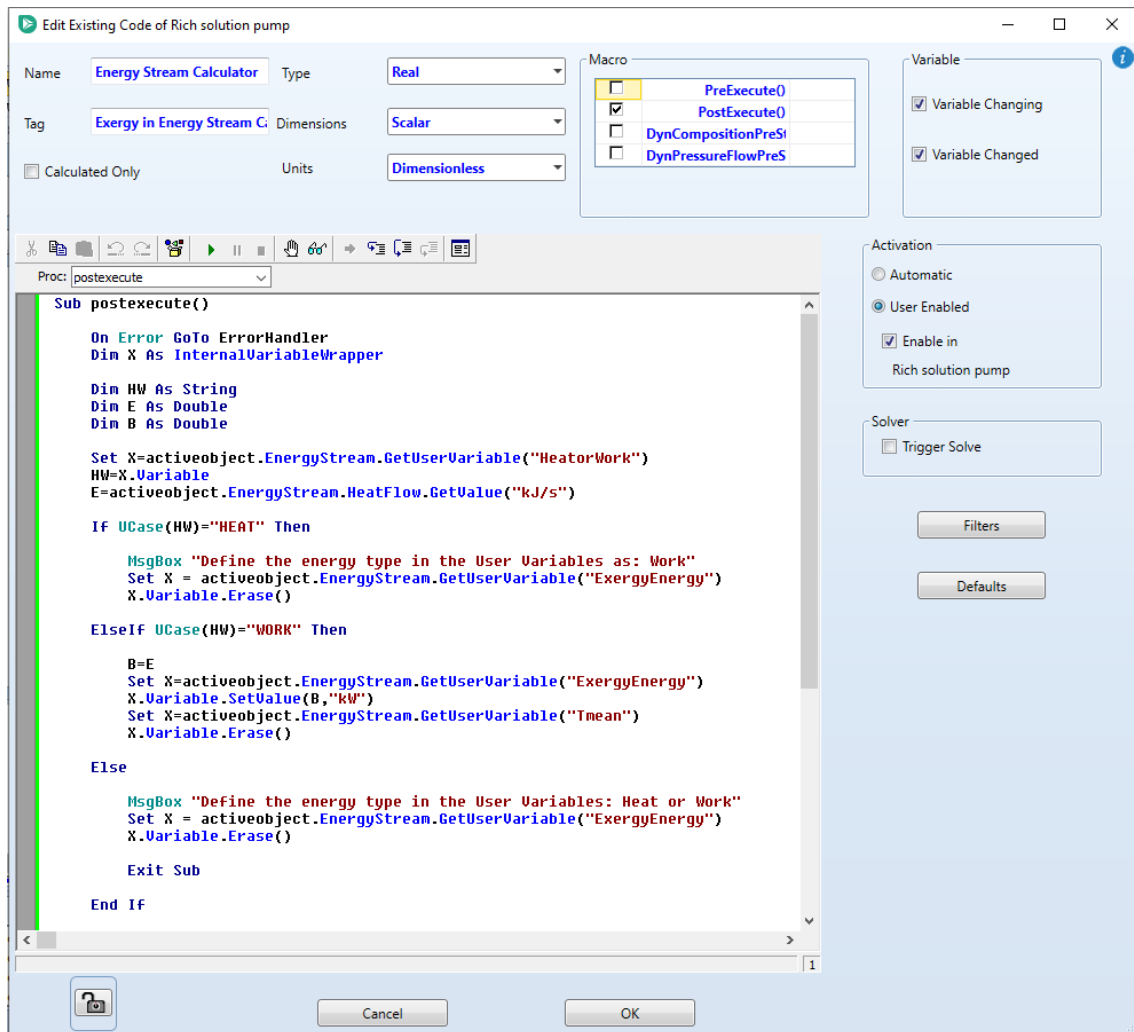


Figura H.1: Código relativo à variável do usuário cálculo da exergia em correntes de energia. Tal variável também identifica o tipo de corrente de energia em questão, calcula e atribui o valor da exergia contida na corrente de energia, sendo utilizada em máquinas de fluxo - parte a.

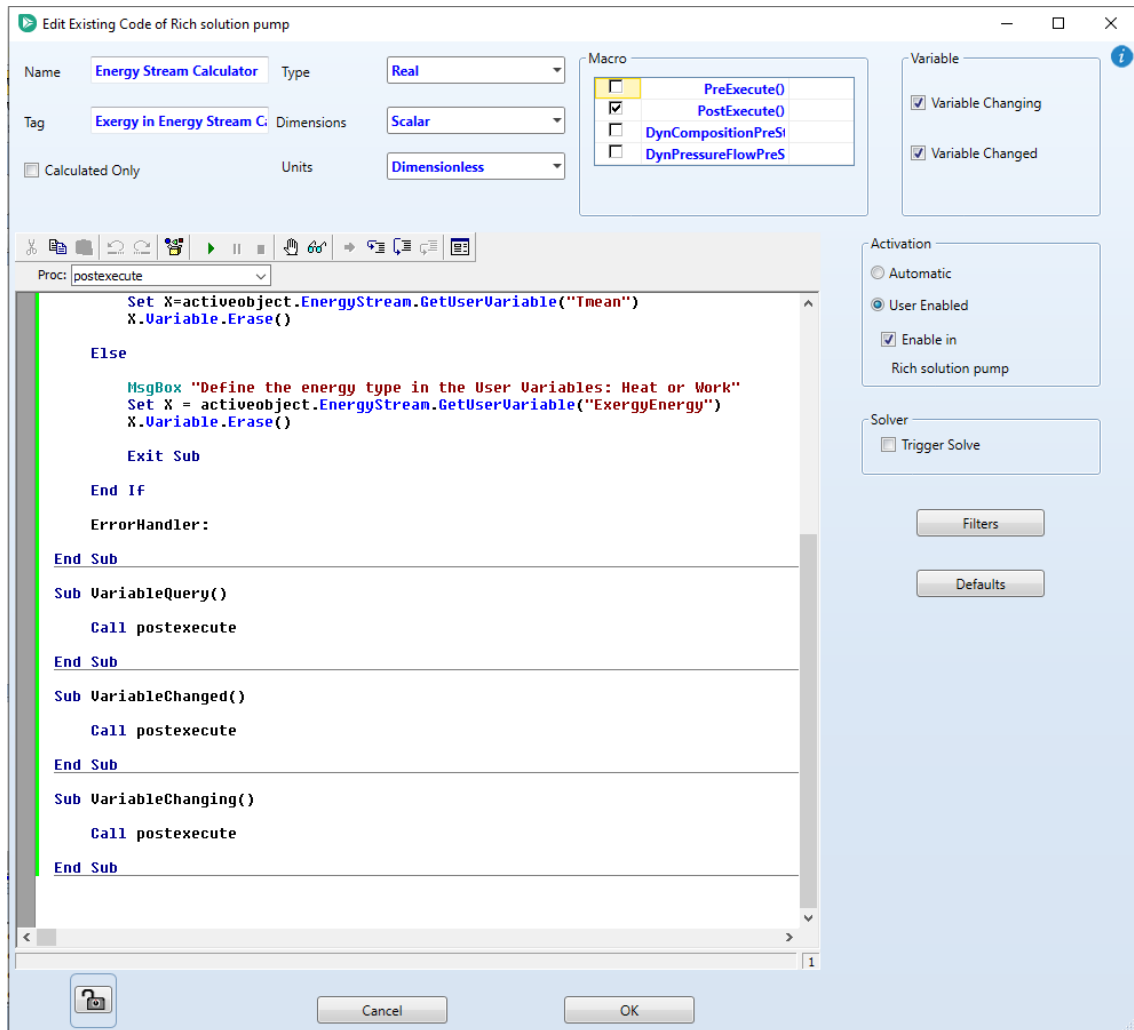


Figura H.2: Código relativo à variável do usuário cálculo da exergia em correntes de energia. Tal variável também identifica o tipo de corrente de energia em questão, calcula e atribui o valor da exergia contida na corrente de energia, sendo utilizada em máquinas de fluxo - parte b.