

VALIDAÇÃO DA ADSORÇÃO PTSA PARA OTIMIZAÇÃO DA CAPTURA DE CARBONO

Lucas Meireles Fontes¹; Gabriel de Veiga Cabral Malgaresi²; Reinaldo Coelho Mirre³

¹Graduando em Engenharia de Controle e Automação; PRH-ANP 27.1; lucasmmfontes@gmail.com

² Centro Universitário SENAI CIMATEC; Salvador-BA; gabriel.malgaresi@fieb.org.br

³Centro Universitário SENAI CIMATEC; Salvador-BA; reinaldo.mirre@fbter.org.br

RESUMO

Este artigo apresenta o contexto da eficácia e viabilidade da aplicação de tecnologias de captura de carbono, com foco na adsorção utilizando zeólitas, para redução das emissões de dióxido de carbono (CO₂) em processos industriais. Os resultados experimentais incluem a composição dos gases de combustão, destacando as porcentagens médias de CO₂ e N₂ durante o processo de pós-combustão. Além disso, são definidos os parâmetros de tecnologias de captura de carbono, com ênfase na adsorção com zeólitas 13X. Os dados obtidos são analisados à luz da literatura existente, fornecendo perspectivas sobre o potencial das zeólitas como materiais adsorventes na redução das emissões de CO₂. Por fim, é discutida a aplicação de simulações de processo com o software Aspen Adsorption para otimização de processos e possíveis estratégias de controle.

PALAVRAS-CHAVE: Pós-combustão; Zeólitas; Adsorção; Simulação.

1. INTRODUÇÃO

As tecnologias de captura de carbono têm ganhado destaque em várias fases dos processos industriais, com a incorporação mais simples ocorrendo no estágio de pós-combustão. Este método requer alterações mínimas nas instalações existentes, direcionando os gases de combustão para uma unidade de captura de carbono. Diversas tecnologias podem ser empregadas, sendo a adsorção destacada como eficiente, econômica e de fácil manuseio. [1] A adsorção é uma forma de interação entre moléculas e materiais sólidos, podendo ser classificada como quimissorção ou fisissorção. Existem vários métodos de adsorção, como PSA, TSA, VSA, PTSA e VTSA, os quais diferem em termos de pressão e temperatura nas torres de adsorção e dessorção. [2] A tecnologia de adsorção utiliza materiais adsorventes, com as zeólitas sendo escolhidas devido às suas propriedades, como alta seletividade e versatilidade. As zeólitas, microporosas com estruturas cristalinas tridimensionais, são amplamente utilizadas na indústria devido à sua capacidade de adsorção e transferência de substâncias. Destacam-se as zeólitas dos tipos A, X, Y e ZSM-5, pelas suas estruturas cristalinas estáveis e grandes volumes de poros. A seletividade das zeólitas permite a captura de CO₂, enquanto moléculas maiores são excluídas, facilitando a sua aplicação em processos de captura de carbono. [3] Portanto, este artigo remete a tecnologia de adsorção, um método de captura de carbono de gases de pós-combustão, utilizando a zeólita 13X como adsorvente, e buscando seus parâmetros para a simulação e otimização de processo a partir de um estudo de caso no software Aspen Adsorption.

2. METODOLOGIA

Para a proposta deste estudo, foi adotada uma abordagem qualitativa, fundamentada em uma revisão bibliográfica de artigos e bibliotecas on-line. Foram examinados os principais processos industriais para a captura de carbono, incluindo pré-combustão, combustão enriquecida com oxigênio e pós-combustão; e optou-se por focar na aplicação de pós-combustão. Após a revisão bibliográfica, a técnica de adsorção foi escolhida, sendo comparada com outras tecnologias de captura de carbono. O método de adsorção e dessorção PTSA foi selecionado por apresentar alta eficiência na capacidade de adsorção. Entre os materiais adsorventes de alta maturidade tecnológica, as zeólitas se destacam, embora ainda necessitem de mais pesquisas e comparações. Por fim, foram testados diferentes parâmetros para otimização de um processo industrial que utiliza as tecnologias citadas acima, com o auxílio do software Aspen Adsorption.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1. PARÂMETROS

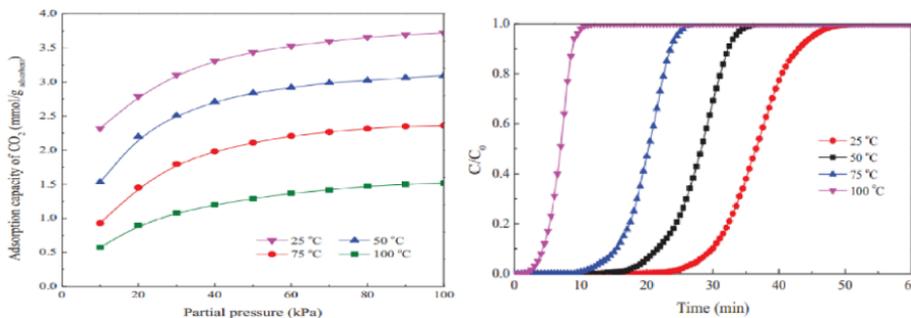
No processo de pós-combustão, os gases de combustão são simplesmente direcionados para uma unidade de captura de carbono. Os resultados revelam que, durante a queima de fontes não renováveis de energia, a porcentagem média de CO₂ geralmente varia de 3% a 18%, e de N₂ entre 65% e 76%. Para a

captura destes gases, na tecnologia de adsorção, as operações geralmente são implantadas em leito fixo, onde as torres se encontram de forma estática; o movimento da fase sólida daria origem a problemas de resistência mecânica do adsorvente, logo é evitado.[4] Há um método conhecido como a adsorção de oscilação de pressão e temperatura método (PTSA), que são os métodos PSA e TSA combinados. Tal método funciona aumentando a pressão na adsorção, para que o CO_2 adentre o material adsorvente, como as zeólitas 13X e, posteriormente, ao aquecer na dessorção, as moléculas se agitam e saem com maior facilidade do adsorvente; logo, pode aumentar a capacidade de regeneração e também reduzir a potência necessária para descompressão. A viabilidade econômica maximiza ao veicular energia não utilizada para a dessorção como em usina termelétrica como fonte de calor. A Tabela 1 relaciona um esquema entre os parâmetros de pressão, tempo e temperatura nas torres de adsorção-dessorção pelo método PTSA.

Tabela 1 - Parâmetros PTSA [5]

Ciclo PTSA	Adsorção	Despressurização	Aquecimento	Resfriamento	Pressurização
Pressão (bar)	10 - 68	1,2	1	1	10 - 68
Temperatura (K)	289,15 - 302	289,15 - 302	413,15 - 590	302 - 294,15	289,15
Tempo (h)	18	0,5	6	4	0,5

Aprofundando a análise para validar os parâmetros das variáveis de adsorção, a Figura 2 varia a temperatura a 25, 50, 75 e 100°C, sendo possível notar que a capacidade de adsorção aumenta com menor temperatura e maior pressão, o que explicita a necessidade de a temperatura na adsorção ser menor, cerca de 25°C, e aumentar apenas na dessorção. Além disso, a velocidade para atingir a saturação se mostra diretamente proporcional ao aumento da temperatura. À temperatura ambiente (25°C), quando a pressão parcial varia de 0 kPa a 100 kPa, a capacidade de adsorção de CO_2 aumenta de 0 para 5,7 mmol/g adsorvente. Enquanto isso, a capacidade de adsorção de CO_2 diminui para 1,3 mmol/g adsorvente. Assim, quando a temperatura de adsorção é de 25 °C, a saturação é atingida após 47 min; entretanto, este valor diminui para 8 min com o tempo de adsorção aumentado para 100 °C.

 Figura 1 - Isoterma de adsorção (i) e curvas de ruptura de CO_2 (ii) [6]


3.2. SIMULAÇÃO

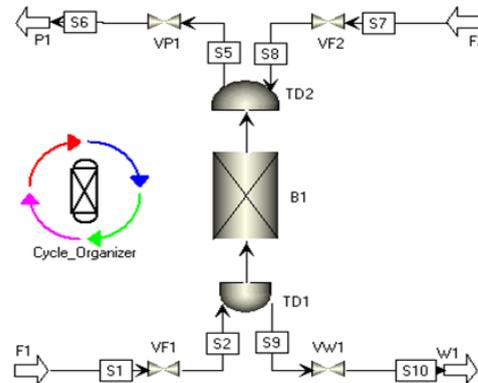
Para a simulação do trabalho foi utilizado o software Aspen Adsorption, valorizado por sua capacidade de modelar com precisão os processos de adsorção, permitindo otimizar o design e operações de unidades de adsorção, resultando em melhorias significativas na eficiência do processo e no uso de recursos. A configuração dos componentes foi baseada na definição dos parâmetros da composição dos gases de combustão, variáveis da tecnologia de adsorção PTSA e dos adsorventes zeólitas 13X. Na Tabela 2, é possível verificar os parâmetros da zeólita 13X e dos gases de combustão que estarão presentes no leito fixo da simulação do Aspen. Já na Figura 2, é possível visualizar o esquema montado para a simulação, onde existem duas entradas F1 e F2, referindo-se aos fluxos de alimentação de material que entram no sistema. Esses feeds podem conter os componentes que se espera que sejam adsorvidos pelo adsorvente. Além disso, possuem duas saídas: o W1, que se refere aos componentes que não são adsorvidos pelo adsorvente e, por fim, a própria saída final P1. Um componente importante para a simulação é o Cycle_Organize, responsável pela determinação dos ciclos do PTSA, onde foi verificado que alterações na temperatura e pressão de cada passo gera uma curva correspondente à variável modificada

pele tempo. Desse modo, com esta aplicação, faz-se necessário um estudo de caso a partir da alteração destes parâmetros para verificar possíveis melhorias e otimizações na capacidade de adsorção do CO₂ pelas das zeólitas 13X.

Tabela 2 – Parâmetros da Simulação

Parâmetro	Valor	Unidade	Fonte
Hb	0,8	m	[8]
Db	0,2	m	[8]
Ei	0,35	m ³ void/m ³ bed	[7]
Ep	0,6	m ³ void/m ³ bead	[7]
RHOs	700,28	kg/m3	[7]
Rp	1	mm	[8]
SFac	0,83	n/a	[7]
MTC("CO2")	0,1631	1/s	[8]
MTC("N2")	0,2044	1/s	[8]
IP(1,"CO2")	4,60E-07	n/a	[8]
IP(1,"N2")	3,32E-07	n/a	[8]
IP(2,"CO2")	3777,93	n/a	[8]
IP(2,"N2")	2074,07	n/a	[8]
Cps	0,88	kJ/kg/K	[8]
DH("CO2")	-32	MJ/kmol	[8]
DH("N2")	-18	MJ/kmol	[8]

Figura 2 - Simulação PTSA



4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este estudo relatou a eficácia da adsorção utilizando zeólitas 13X, para redução das emissões de CO₂ em processos industriais. Os resultados revelaram as composições típicas dos gases de combustão, destacando as porcentagens médias de CO₂ e N₂ durante o processo de pós-combustão, posteriormente utilizados na simulação. Observou-se que a tecnologia de adsorção, especialmente o método PTSA, apresenta vantagens como alta capacidade de regeneração e redução na potência para a descompressão. A análise dos parâmetros de adsorção demonstrou a importância da temperatura e pressão na eficiência do processo, com uma capacidade de adsorção maior em temperaturas mais baixas e pressões mais altas. A utilização do software Aspen Adsorption permitiu simular os processos de adsorção e configurar as propriedades das zeólitas com base na composição dos gases de combustão, proporcionando recursos para a otimização das unidades PTSA de adsorção e viabilizando a identificação de possíveis melhorias na capacidade de adsorção do CO₂. Estudos futuros podem se concentrar na alteração desses parâmetros para investigar as estratégias de controle e melhorias na eficiência do processo de captura de carbono.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao PRH 27.1, ANP/FINEP, e SENAI/CIMATEC, pelo apoio financeiro e pelo incentivo à pesquisa.

5. REFERÊNCIAS

- [1] B. Wallace, "Análise E Levantamento Das Principais Técnicas Para," pp. 1–10, 2018.
- [2] G. O. Aksu, H. Daglar, C. Altintas, and S. Keskin, "Computational Selection of High-Performing Covalent Organic Frameworks for Adsorption and Membrane-Based CO₂/H₂Separation," *Journal of Physical Chemistry C*, vol. 124, no. 41, pp. 22577–22590, 2020, doi: 10.1021/acs.jpcc.0c07062.
- [3] C. De Figueiredo, C. Neves, M. De Abreu, and M. Schwartzman, "Separación de CO₂ por medio de tecnología PSA," vol. 28, no. 4, pp. 622–628, 2005.
- [4] "Fixed Bed Adsorption Operations." [Online]. Available: http://www.industrialseparation.com/20130606_fixed-bed-adsorption-operations.html
- [5] O. T. Qazvini and S. Fatemi, "Modeling and simulation pressure-temperature swing adsorption process to remove mercaptan from humid natural gas; A commercial case study," *Sep Purif Technol*, vol. 139, pp. 88–103, Jan. 2015, doi: 10.1016/j.seppur.2014.09.031.
- [6] C. Song, Y. Kansha, Q. Fu, M. Ishizuka, and A. Tsutsumi, "Reducing energy consumption of advanced PTSA CO₂ capture process-Experimental and numerical study," *J Taiwan Inst Chem Eng*, vol. 64, pp. 69–78, 2016, doi: 10.1016/j.jtice.2015.12.006.
- [7] A. Ntiamoah, J. Ling, P. Xiao, P. A. Webley, and Y. Zhai, "CO₂ Capture by Temperature Swing Adsorption: Use of Hot CO₂-Rich Gas for Regeneration," *Ind Eng Chem Res*, vol. 55, no. 3, pp. 703–713, Jan. 2016, doi: 10.1021/acs.iecr.5b01384.
- [8] G. Zhan *et al.*, "Dynamic process simulation and optimization of CO₂ removal from confined space with pressure and temperature swing adsorption," *Chemical Engineering Journal*, vol. 416, Jul. 2021, doi: 10.1016/j.cej.2021.129104.