



Herberth Arturo Vasquez Haro

**Investigação Numérica do Processo de Separação de  
Dióxido de Carbono por Absorção com Amina para  
Aplicação em Projetos de Armazenamento de Carbono  
(CCS)**

**Dissertação de Mestrado**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Orientadora: Prof. Marcos Sebastião de Paula Gomes

Rio de Janeiro, 11 de Setembro de 2009



**Herberth Arturo Vasquez Haro**

**Investigação Numérica do Processo de Separação de  
Dióxido de Carbono por Absorção com Amina para  
Aplicação em Projeto de Armazenamento de Carbono de  
(CCS)**

Dissertação apresentada como requisito parcial para  
obtenção do título de Mestre pelo Programa de Pós-  
Graduação em Engenharia Mecânica da PUC-Rio.  
Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo  
assinada.

**Prof. Marcos Sebastião de Paula Gomes**

Orientador

Departamento de Engenharia Mecânica – PUC-Rio

**Prof. Angela Ourivio Nieckele**

Departamento de Engenharia Mecânica – PUC-Rio

**Prof. Monica Feijo Naccache**

Departamento de Engenharia Mecânica – PUC-Rio

**Prof. José Eugenio Leal**

Coordenador Setorial do Centro

Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 11 de Setembro de 2009

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

### **Herberth Arturo Vasquez Haro**

Graduou-se em Engenharia Mecânica na  
Universidad Nacional del Callao Lima – PERÚ

#### Ficha Catalográfica

Vasquez Haro, Herberth Arturo

Investigação numérica do processo de separação de dióxido de carbono por absorção com amina para aplicação em projetos de armazenamento de carbono (CCS) / Herberth Arturo Vasquez Haro; orientador: Marcos Sebastião de Paula Gomes. – 2009.

88 f. : il.(color.) ; 30 cm

Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica)–Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2009.

Inclui bibliografia

1. Engenharia mecânica – Teses. 2. Absorção. 3. Gás-líquido. 4. Modelagem. 5. Separação CO<sub>2</sub>. 6. Monoetanolamina. I. Gomes, Marcos Sebastião de Paula. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Mecânica. III. Título.

CDD: 621

*“A realidade é uma ilusão, embora bastante persistente”.*  
Albert Einstein

## Agradecimentos

Ao Professor Marcos Sebastião de Paula Gomes, pela amizade e paciência para transmitir seu conhecimento, pela incansável motivação na realização deste trabalho.

Às minhas irmãs e à minha mãe, por terem me incentivado.

Ao Alan, Luis, Mijail e Marko, minha família no Brasil, por todo o carinho, bondade e apoio nestes últimos anos.

Aos meus amigos David, Cesar, Raul e toda a turma do sexto andar de pós - mecânica, por compartilhar comigo este caminho e sempre estarmos dispostos a nos ajudar uns aos outros mesmo nos momentos difíceis.

À minha namorada, Cirlene, por seu amor, compressão e confiança, por ter se convertido no motor da minha vida e por ter-me feito uma pessoa melhor, apenas sendo simplesmente ela.

Finalmente, minha gratidão à CAPES e à PUC-Rio pelos auxílios concedidos, sem os quais este trabalho não teria sido possível.

## Resumo

Haro, Herberth Arturo Vasquez; Gomes, Marcos Sebastião de Paula. **Investigação Numérica do Processo de Separação de Dióxido de Carbono por Absorção com Amina para Aplicação em Projetos de Armazenamento de Carbono (CCS)**. Rio de Janeiro, 2009. 88p. Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Absorção é um processo no qual os componentes de uma corrente gasosa são separados através do uso de um solvente líquido. O processo pode ser simplesmente físico ou seguido por uma reação química. Na indústria, um processo de absorção importante é a remoção de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), usando uma solução aquosa de monoetanolamina (MEA), dos gases de combustão expelidos pelas plantas alimentadas por combustíveis fósseis tais como: as usinas de geração de energia, a indústria farmacêutica, a indústria de petróleo, etc. Os projetos desenvolvidos por grandes corporações usualmente são cercados de sigilo, e as companhias evitam a divulgação de suas soluções tecnológicas. Além disso, no Brasil pouco tem-se publicado a respeito. Neste trabalho, apresenta-se um modelo simples que simula a absorção de  $\text{CO}_2$  em solução aquosa de MEA. O modelo envolve as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia, podendo prever o comportamento geral do processo de absorção. Os resultados das simulações da absorção de  $\text{CO}_2$  em contracorrente com uma coluna de filme líquido foram comparados com dados experimentais disponíveis apresentando uma boa concordância.

## Palavras-chave

Absorção; Gás-líquido; Modelagem; Separação  $\text{CO}_2$ ; Monoetanolamina.

## Abstract

Haro, Herberth Arturo Vasquez; Gomes, Marcos Sebastião de Paula. (Advisor) **Numerical Investigation of Amine Based Absorption Processes for Carbon Dioxide Capture in CCS Projects.** Rio de Janeiro, 2009. 88p. MSc. Dissertation - Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Absorption is a process where the components of a gaseous stream are separated through the use of a liquid solvent. The process may be simply physical or be followed by a chemical reaction. In industry, one of the most important absorption processes is the removal of carbon dioxide (CO<sub>2</sub>), by using an aqueous solution of monoethanolamine (MEA), from flue gases exhausted by fossil-fuel-fired power plants, the pharmaceutical industry, the petroleum industry, etc. The projects developed by large companies usually are surrounded by secrecy and the companies avoid dissemination of their technological solutions. In addition, there is almost nothing published in Brazil about this subject. In this work, we present a simple model that simulates the absorption of CO<sub>2</sub> by a MEA based aqueous solution. The model involves the equations for the conservation of mass, momentum, and energy, and may predict the general behavior of the absorption process. Results for the simulation of the absorption of CO<sub>2</sub> in a countercurrent liquid film contactor were compared with available experimental data, presenting good agreement.

## Keywords

Absorption; Gas-liquid; Modeling; CO<sub>2</sub> separation; Monoethanolamine.

# Sumário

1	Introdução	17
1.1	Emissões de CO <sub>2</sub>	18
1.2	Captura de CO <sub>2</sub>	20
1.2.1	Análise das Tecnologias de Separação de CO <sub>2</sub>	20
1.2.2	Processos de Captura de CO <sub>2</sub>	21
1.3	Absorção	25
1.4	Absorção Química de CO <sub>2</sub>	26
1.5	Aminas	28
1.6	Motivação	30
1.7	Objetivo	30
1.8	Organização do Trabalho	30
2	Revisão Bibliográfica	32
2.1	Transferência de Massa com Reação Química	32
2.2	Simulações de Absorção de CO <sub>2</sub> em Solução de MEA	33
3	Modelagem Física e Matemática	36
3.1	Hipóteses Simplificadoras	37
3.2	Formulação Matemática	38
3.3	Região de Líquido	39
3.4	Região de Gás	45
3.5	Condições Iniciais e de Contorno	49
3.6	Balanço de Massa das Espécies	51
4	Modelagem Numérica	53
4.1	Método das Diferenças Finitas	53



4.2 Método de Euler e de Trapézio	55
4.3 Solução do Sistema Algébrico	56
4.4 Esquema de Tratamento na Interface	56
4.5 Esquema de Solução do Sistema Algébrico	57
4.6 Critério de Convergencia	57
4.7 Procedimento da Solução	58
4.8 Domínio Computacional	59
5 Resultados	61
5.1 Dados Operacionais e Físico-Químicos	61
5.2 Validação do Modelo	62
5.3 Perfis de Velocidade do Líquido	64
5.4 Perfis da Região de Líquido Variando a Velocidade do Gás	65
5.5 Perfis da Região de Líquido Variando a Velocidade do Líquido	69
5.6 Perfis da Região de Gás	73
6. Comentários Finais	77
6.2 Recomendações para Trabalhos Futuros	78
Referências Bibliográficas	79
Apêndice A	84

## Lista de tabelas

Tabela 1.1- Comparação entre solventes físicos e químicos para a absorção do CO <sub>2</sub>	26
Tabela 1.2- Propriedades de diferentes tipos de solventes	29
Tabela 4.1- Teste de malha	59
Tabela 5.1- Características e condições operacionais para a coluna de absorção	61
Tabela 5.2- Propriedades físico-químicos utilizados no sistema CO <sub>2</sub> -MEA	62
Tabela 5.3- Porcentagens de CO <sub>2</sub> absorvido	76

## Lista de figuras

Figura 1.1-	Emissões de CO <sub>2</sub> com a queima de combustíveis fósseis, por combustível.	19
Figura 1.2-	Emissões de CO <sub>2</sub> com a queima de combustíveis fósseis, por setor.	19
Figura 1.3-	Tecnologias de captura de CO <sub>2</sub> .	21
Figura 1.4-	Captura de CO <sub>2</sub> antes da combustão.	22
Figura 1.5-	Combustão com oxigênio.	23
Figura 1.6-	Captura de CO <sub>2</sub> pós-combustão.	24
Figura 1.7-	Processo de absorção com amina.	27
Figura 3.1-	Descrição da coluna de filme líquido.	37
Figura 3.2-	Descrição bidimensional da coluna de filme líquido.	42
Figura 3.3-	Modelo de fluxo de filme líquido na coluna.	44
Figura 3.4-	Balanco de massa unidimensional na seção de contato gás-líquido de uma coluna de absorção.	45
Figura 3.5-	Balanco de energia unidimensional na seção de contato gás-líquido de uma coluna de absorção.	48
Figura 3.6-	Balanco de massa no processo.	51
Figura 4.1-	Discretização do domínio através de quatro pontos.	54
Figura 4.2-	Seções de domínios computacionais.	60
Figura 5.1-	Comparação da taxa de absorção de CO <sub>2</sub> ( $R_A$ ) com os dados experimentais e simulados por Akanksha et. al, (2007) para $u_L=0,0412\text{m/s}$ .	63
Figura 5.2-	Comparação da taxa de absorção de CO <sub>2</sub> ( $R_A$ ) com os dados experimentais e simulados por Akanksha et. al, (2007) para $u_G=0,3467\text{m/s}$ .	63
Figura 5.3-	Perfil de velocidades do filme líquido para o primeiro caso.	64
Figura 5.4-	Perfis de velocidades do filme líquido para o segundo	

	caso.	65
Figura 5.5-	Variação da temperatura na região do líquido ao longo da coluna para $u_G=0,11\text{m/s}$ e $u_L=0,0412\text{m/s}$ .	66
Figura 5.6-	Variação da temperatura na região líquido ao longo da coluna para $u_G=0,35\text{m/s}$ . e $u_L=0,0412\text{m/s}$ .	66
Figura 5.7-	Variação da concentração de $\text{CO}_2$ absorvido na região do líquido ao longo da coluna para $u_G=0,11\text{m/s}$ . e $u_L=0,0412\text{m/s}$ .	67
Figura 5.8-	Variação da concentração de $\text{CO}_2$ absorvido na região do líquido ao longo da coluna para $u_G=0,35\text{m/s}$ . e $u_L=0,0412\text{m/s}$ .	68
Figura 5.9-	Variação da concentração de MEA na região do líquido ao longo da coluna para $u_G=0,11\text{m/s}$ e $u_L=0,0412\text{m/s}$ .	68
Figura 5.10-	Variação da concentração de MEA na região do líquido ao longo da coluna para $u_G=0,35\text{m/s}$ e $u_L=0,0412\text{m/s}$ .	69
Figura 5.11-	Variação da temperatura na região do líquido ao longo da coluna para $u_L=0,02\text{m/s}$ e $u_G=0,3467\text{m/s}$ .	70
Figura 5.12-	Variação da temperatura na região do líquido ao longo da coluna para $u_L=0,055\text{m/s}$ e $u_G=0,3467\text{m/s}$ .	70
Figura 5.13-	Variação da concentração de $\text{CO}_2$ absorvido na região do líquido ao longo da coluna para $u_L=0,02\text{m/s}$ e $u_G=0,3467\text{m/s}$ .	71
Figura 5.14-	Variação da concentração de $\text{CO}_2$ absorvido na região do líquido ao longo da coluna para $u_L=0,055\text{m/s}$ $u_G=0,3467\text{m/s}$ .	72
Figura 5.15-	Variação da concentração de MEA na região do líquido ao longo da coluna, para $u_L=0,02\text{m/s}$ e $u_G=0,3467\text{m/s}$ .	72
Figura 5.16-	Variação de concentração de MEA na região do líquido ao longo da coluna, para $u_L=0,055\text{m/s}$ e $u_G=0,3467\text{m/s}$ .	73

Figura 5.17-	Perfis da concentração de CO <sub>2</sub> ao longo da coluna para $u_L=0,0412\text{m/s}$ e variando a velocidade de gás.	74
Figura 5.18-	Perfis da concentração de CO <sub>2</sub> ao longo da coluna, para $u_G=0,3467\text{m/s}$ e variando a velocidade de líquido.	74
Figura 5.19-	Perfis da temperatura na região do gás ao longo da coluna, para $u_L=0,0412\text{m/s}$ e variando a velocidade de gás.	75
Figura 5.20-	Perfis da temperatura na região do gás ao longo da coluna, para $u_G=0,3467\text{m/s}$ e variando a velocidade de líquido	76

## Lista de símbolos<sup>1</sup>

MEA	Monoetanolamina
DEA	Dietanolamina
TEA	Trietanolamina
MDEA	Metildietanolamina
CO <sub>2</sub>	Dióxido de carbono
EDO's	Equações diferenciais ordinárias
EDP's	Equações diferenciais parciais
$C_A$	Concentração de gás A dissolvido (kmol/m <sup>3</sup> )
$C_{AG}$	Concentração média de gás A (kmol/m <sup>3</sup> )
$C_B$	Concentração de reagente B (kmol/m <sup>3</sup> )
$r_A$	Taxa de reação de A (kmol/m <sup>3</sup> s)
$k$	Constante de taxa de segunda ordem a temperatura de solução (m <sup>3</sup> /kmol.s)
$Q_G$	Vazão de gás
$Q_L$	Vazão de líquido
A	Gás reagente
B	Líquido reagente
L	Altura da coluna (m)
b	Coefficiente estequiométrico de componente B
t	Tempo (s)
V	Velocidade absoluta (m/s)
g	Aceleração da gravidade (m/s <sup>2</sup> )
p	Pressão (N/m <sup>2</sup> )
u	Velocidade radial (m/s)
w	Velocidade vertical (m/s)
x	Coordenada radial (m)

---

<sup>1</sup> Nota: a nomenclatura de parâmetros não citados nesta seção é descrita ao longo de próprio texto

$z$	Coordenada vertical (m)
$f$	Fator de atrito (-)
$d$	Diâmetro interno da coluna (m)
$Re$	Número de Reynolds (-)
$m$	Massa (kg)
$D_G$	Difusividade da mistura de gás ( $m^2/s$ )
$\bar{M}$	Peso molecular (kg/kmol)
$\vec{q}$	Fluxo de calor ( $W/m^2$ )
$\dot{q}$	Taxa de energia térmica liberada por unidade de volume ( $W/m^3$ )
$h$	Entalpia (J/kg)
$T$	Temperatura (K)
$C_p$	Calor específico a pressão constante (J/kg. K)
$\Delta H_R$	Calor de reação (J/kmol)
$k_\lambda$	Condutividade térmica do líquido (J/s.m.K)
$U$	Coeficiente global de transferência de calor por refrigeração com água ( $J/s.m^2K$ )
$T_R$	Temperatura de refrigeração com água (K)
$k_G$	Coeficiente de transferência de massa de gás (m/s)
$H_O$	Constante de Henry ( $kmol/m^3$ )gás/( $kmol/m^3$ )líquido
$h_G$	Coeficiente de transferência de calor na fase gás ( $J/s.m^2K$ )
$\Delta H_S$	Calor de solução (J/kmol)
$C_B^O$	Concentração de entrada do reagente $B$ ( $kmol/m^3$ )
$T_O$	Temperatura de entrada do líquido (K)
$\varpi$	Taxa de fluxo molar de gás por perímetro molhado ( $kmol/m.s$ )
$a_c$	Fator de correção para a área interfacial (-)
$\tilde{\rho}_G$	Densidade molecular da mistura ( $kmol/m^3$ )
$C_G$	Capacidade calorífica molar de gás (J/kmol.K)
$R_w$	Razão de área interfacial em presença de ondas no plano de área interfacial (-)
$Sh_G$	Numero de Sherwood (-)
$Sc_G$	Numero de Schimdt (-)
$Nu_G$	Numero de Nusselt (-)

## Símbolos gregos

$\rho$	Massa específica (kg/m <sup>3</sup> )
$\mu$	Viscosidade dinâmica (kg/ms)
$\delta$	Espessura de filme (m)
$\alpha$	Difusividade térmica (m <sup>2</sup> /s)
$\omega$	Fração molar (-)
$\tau$	Tensão cisalhante (N/m <sup>2</sup> )
$\lambda$	Condutividade térmica (J/s.m.K)
$\sigma$	Tensão superficial (N/m)

## Subscritos

$L$	Líquido
$G$	Gás
$A$	Componente A
$B$	Componente B
$i$	Interface