MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO PARA PURIFICAÇÃO DE BIOGÁS

Júlio César da Silva Venâncio Ramos (PIBIC/CNPq/FA/UEM), Wardleison Martins Moreira, Anderson Rafael Igarashi, Marcelino Luiz Gimenes (Orientador).
E-mail: ra138349@uem.br.

Universidade Estadual de Maringá, Centro de Tecnologia, Maringá, PR.

Área e subárea do conhecimento: Modelagem, Simulação, Síntese, Otimização e Controle de Processos.

Palavras-chave: Coluna de bolhas; Aspen plus; H_2S.

RESUMO

Este trabalho teve como objetivo desenvolver e avaliar, no Aspen Plus®, um modelo para remoção de sulfeto de hidrogênio (H_2S) do biogás utilizando solução de Fe-EDTA em coluna de bolhas, integrada à regeneração e ao reciclo do absorvente. Foram comparadas correlações para estimar o coeficiente volumétrico de transferência de massa (K_La) e a área interfacial, selecionando-se Kawase e Moo-Young para KLa e Akita e Yoshida para a área interfacial na coluna de remoção. As simulações finais apresentaram remoções de H_2S entre 90,62% e 98,30%, enquanto a regeneração de Fe^{2+} variou de 99,94% a 100%. Os resultados indicam potencial para avaliar configurações geométricas de colunas de bolhas destinadas à purificação de biogás.

INTRODUÇÃO

O biogás é uma fonte de energia renovável proveniente da digestão anaeróbia de matéria orgânica, constituída principalmente por metano e dióxido de carbono, além de contaminantes como o sulfeto de hidrogênio (H_2S). Sua remoção é importante devido à toxicidade e à corrosividade desse composto (Schiavon Maia *et al.*, 2017). Uma alternativa consiste na utilização de soluções de Fe-EDTA, nas quais o H_2S é absorvido e oxidado, reduzindo Fe^{3+} a Fe^{2+}. Posteriormente, a solução pode ser regenerada com oxigênio e reutilizada (Wubs; Beenackers, 1993). Nesse contexto, as colunas de bolhas favorecem o contato entre as fases gasosa e líquida, sendo seu desempenho influenciado pela transferência de massa e pela geometria (Kantarci; Borak; Ulgen, 2005). Assim, este trabalho teve como objetivo desenvolver um modelo no Aspen Plus® para a purificação de biogás com Fe-EDTA, comparando correlações de transferência de massa e área interfacial.

MATERIAIS E MÉTODOS

As simulações foram realizadas no Aspen Plus® V15, utilizando o pacote termodinâmico ELECNRTL para a fase líquida eletrolítica e a relação de Redlich-Kwong para a fase gasosa. A solubilidade de gases foi representada pela Lei de Henry. O sistema foi estruturado em duas colunas de bolhas: a primeira destinada à remoção de H_2S do biogás e a segunda à regeneração do Fe^{2+}-EDTA. As condições de alimentação foram baseadas no estudo experimental de Schiavon Maia *et al.* (2017), considerando solução de Fe-EDTA a 0,15 mol/L, biogás contendo 2,4% de N_2, 0,3% de O_2, 81,1% de CH_4, 2,2% de H_2S e 14,0% de CO_2, a 25 °C e 1,3 bar, com vazão de 50 m^3/h.

Como o Aspen Plus® não dispõe de correlações específicas para o projeto de colunas de bolhas, foram implementadas funções definidas pelo usuário em Fortran. Foram avaliadas correlações de Shah *et al.*, (1982) e Kawase; Moo-Young (1987) para K_La. Para a área interfacial, foram avaliados os modelos de Akita; Yoshida, (1974) e Van Dierendonck. O gas hold-up foi calculado pela correlação de Hughmark (1967). A eficiência de remoção de H_2S foi determinada pela razão entre a diferença dos fluxos molares de entrada e saída e o fluxo molar de entrada.

Inicialmente, foram comparadas as diferentes combinações de K_La e área interfacial em uma mesma geometria. Em seguida, os modelos foram avaliados em diferentes relações H/D e dimensões de coluna. A correlação de Akita e Yoshida foi selecionada para a área interfacial da coluna de remoção por apresentar ampla utilização em diferentes geometrias e condições hidrodinâmicas, enquanto Kawase e Moo-Young foi testada para K_La devido à sua base teórica para previsão do coeficiente volumétrico de transferência de massa em colunas de bolhas (Kawase; Moo-Young, 1987). Para a regeneração, adotaram-se Van Dierendonck para a área interfacial e Shah *et al.* para K_La. Nas simulações finais foram analisados diâmetros de 60, 70 e 80 cm e alturas de 150, 196 e 245 cm.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Tabela 1 Eficiência da purificação do biogás e regeneração do Fe^{2+}

Diâmetro (cm)	Altura (cm)	Fração de retirada de H_2S	Entrada Fe^{2+} (kmol/h)	Saída Fe^{2+} (kmol/h)	Fração de Regeneração
60	150	91,47%	0,00106	$1,20\times10^{-9}$	100,00%
60	196	96,08%	0,00111	$7,06\times10^{-8}$	99,99%
60	245	98,30%	0,00114	$6,54\times10^{-7}$	99,94%
70	150	91,02%	0,00105	$1,37\times10^{-9}$	100,00%
70	196	95,81%	0,00111	$7,81\times10^{-8}$	99,99%
70	245	98,15%	0,00114	$7,08\times10^{-7}$	99,94%
Diâmetr	**Altura**	**Fração de**	**Entrada Fe^{2+}**	**Saída Fe^{2+}**	**Fração de**

o (cm)	(cm)	retirada de H_2S	(kmol/h)	(kmol/h)	Regeneração
80	150	90,62%	0,00105	$1,30\times10^{-9}$	100,00%
80	196	95,56%	0,00111	$7,73\times10^{-8}$	99,99%
80	245	98,01%	0,00113	$7,07\times10^{-7}$	99,94%

Os resultados apresentados na Tabela 1 demonstram que as configurações avaliadas apresentaram elevada eficiência na remoção de H_2S e na regeneração do Fe^{2+}. Para as três alturas analisadas, o aumento da altura da coluna de 150 para 196 e 245 cm promoveu, de modo geral, aumento da fração de remoção de H_2S. Para o diâmetro de 60 cm, por exemplo, a remoção aumentou de 91,47% para 96,08% e 98,30%, respectivamente. Comportamento semelhante foi observado para os diâmetros de 70 e 80 cm, cujas remoções passaram de 91,02% para 98,15% e de 90,62% para 98,01%, respectivamente. Esse comportamento está relacionado ao maior contato entre as fases com o aumento da altura, o que favorece a transferência de H_2S para a solução absorvente (Shah *et al.*, 1982). Por outro lado, para uma mesma altura, o aumento do diâmetro resultou em pequenas reduções na remoção, isso porque aumentar o diâmetro mantendo a vazão constante reduz a velocidade, mostrando que, dentro da faixa avaliada, a altura apresentou maior influência sobre o desempenho da coluna do que o diâmetro (Kantarci *et al.*, 2005).
Na etapa de regeneração, os resultados permaneceram próximos da conversão completa em todas as configurações, com frações de regeneração entre 99,94% e 100,00%. As quantidades de Fe^{2+} na saída também foram muito inferiores às de entrada, variando de aproximadamente $1,2 \times 10^{-9}$ a $6,5 \times 10^{-7}$ kmol/h, enquanto as entradas permaneceram na faixa de 10^{-3} kmol/h. Esses resultados indicam elevada eficiência da etapa de regeneração nas condições simuladas. De forma geral, a combinação das correlações utilizadas apresentou comportamento consistente na faixa geométrica estudada, com remoções de H_2S entre 90,62% e 98,30% e regeneração praticamente completa do Fe^{2+} se comparado com os resultados obtidos em escala piloto por Schiavon Maia *et al.* (2017). Entre as configurações avaliadas, a coluna de 60 cm de diâmetro e 245 cm de altura apresentou a maior fração de remoção de H_2S, de 98,30%, enquanto a variação entre os diâmetros para essa mesma altura foi inferior a 0,3 ponto percentual, indicando pouca influência do diâmetro nessa faixa de operação.

CONCLUSÕES

Os resultados obtidos demonstraram que a modelagem computacional desenvolvida no Aspen Plus® foi capaz de representar a remoção de H_2S do biogás utilizando solução Fe-EDTA e a posterior regeneração do agente absorvente. A comparação entre as correlações avaliadas evidenciou diferenças significativas nas previsões de transferência de massa, sendo selecionado o modelo de Kawase e Moo-Young para K_La, associado à correlação de Akita e Yoshida para a área interfacial na coluna de remoção. Nas configurações finais avaliadas, foram obtidas remoções de H_2S

superiores a 90%, atingindo máximo de 98,30%, enquanto a regeneração do Fe^{2+} permaneceu entre 99,94% e 100%. Observou-se ainda que o aumento da altura da coluna apresentou maior influência sobre a remoção do H_2S do que o aumento do diâmetro na faixa avaliada. Dessa forma, os resultados indicam que a combinação das correlações selecionadas apresenta potencial para o estudo e dimensionamento preliminar de colunas de bolhas destinadas à purificação de biogás por meio de Fe-EDTA.

AGRADECIMENTOS

Agradecimentos ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Universidade Estadual de Maringá (UEM), pelo apoio para a realização desta pesquisa no âmbito do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC).

REFERÊNCIAS

AKITA, K.; YOSHIDA, F. Bubble Size, Interfacial Area, and Liquid-Phase Mass Transfer Coefficient in Bubble Columns. **Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development**, v. 13, n. 1, p. 84–91, jan. 1974.

KANTARCI, N.; BORAK, F.; ULGEN, K. O. Bubble column reactors. **Process Biochemistry**, v. 40, n. 7, p. 2263–2283, jun. 2005.

KAWASE, Y.; MOO-YOUNG, M. Theoretical prediction of gas hold-up in bubble columns with Newtonian and non-Newtonian fluids. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 26, n. 5, p. 933–937, mai. 1987.

SCHIAVON MAIA, D. C.; NIKLEVICZ, R. R.; ARIOLI, R.; FRARE, L. M.; ARROYO, P. A.; GIMENES, M. L.; PEREIRA, N. C. Removal of H_2S and CO_2 from biogas in bench scale and the pilot scale using a regenerable Fe-EDTA solution. **Renewable Energy**, v. 109, p. 188–194, ago. 2017.

SHAH, Y. T.; KELKAR, B. G.; GODBOLE, S. P.; DECKWER, W.-D. Design parameters estimations for bubble column reactors. **AIChE Journal**, v. 28, n. 3, p. 353–379, mai. 1982.

WUBS, H. J.; BEENACKERS, A. A. C. M. Kinetics of the oxidation of ferrous chelates of EDTA and HEDTA in aqueous solution. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 32, n. 11, p. 2580–2594, nov. 1993.