

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DOS PROCESSOS DE ADOÇAMENTO E DESIDRATAÇÃO DE GÁS NATURAL

Adão de Mattos Coelho¹ (Oxiten e Faculdade de Engenharia Química, Unicamp), Elenise Bannwart de Moraes² (Faculdade de Engenharia Química, Unicamp), Maria Regina Wolf Maciel (Faculdade de Engenharia Química, Unicamp)

¹Av. das Indústrias, 365. Mauá. SP. Brasil. adao.coelho@oxiten.com.br

²UNICAMP, Faculdade de Engenharia Química, Caixa Postal 6066, CEP 13083-970. Campinas. SP. Brasil, elenise@feq.unicamp.br, wolf@feq.unicamp.br

O processamento de gás é uma etapa muito importante dentro da cadeia do petróleo, tanto na área de produção como na de refino. Dentre as etapas de processamento do gás, dois processos são amplamente utilizados, o adoçamento e a desidratação. O adoçamento consiste na remoção dos gases como o sulfídrico, H_2S , e o carbônico, CO_2 e a desidratação, por sua vez, é a remoção da água. A presença destes componentes ocasiona diversos problemas no manuseio e transporte do gás natural, dentre eles toxicidade, corrosão e a formação de hidratos, compostos sólidos gerados da combinação das moléculas de água e gases, principalmente metano e etano, que ocasionam o entupimento de válvulas e linhas de transporte de gás. Assim, fica clara a importância dos processos de remoção destas impurezas do gás, a qual é realizada normalmente através de processos de absorção com líquido, com o uso de soluções aquosas de aminas para os gases H_2S e CO_2 e com trietilenoglicol para a água. Tanto para o projeto como para a otimização de plantas existentes, o uso de simuladores comerciais de processo é bastante útil. Para a obtenção de dados de qualidade com os simuladores, diversos cuidados devem ser tomados, dentre os quais uma boa escolha do modelo termodinâmico que representa o sistema e a escolha adequada do método de cálculo dos equipamentos envolvidos. No caso do processo com aminas, onde ocorre a absorção com reação química em meio eletrólito, a escolha do modelo é fundamental; além disso, o método de simulação afeta bastante os resultados. Este trabalho apresenta uma metodologia para analisar os diferentes modelos de equilíbrio aplicáveis aos processos de adoçamento e desidratação e seleciona os melhores depois da comparação com dados experimentais. Dentre os modelos avaliados, o NRTL eletrolítico com a adição das reações envolvidas representa bem os dados experimentais de equilíbrio. Uma vez realizada a escolha dos melhores modelos, é introduzida uma nova metodologia para cálculo da eficiência, desenvolvida por Barros e Wolf (1997), a qual é utilizada na simulação junto com o método de estágio de equilíbrio. A escolha desta metodologia é uma alternativa ao uso do método baseado na taxa de transferência de massa, a qual demanda um esforço computacional bem maior. As simulações sem o uso da eficiência resultam numa absorção praticamente completa dos gases H_2S e CO_2 . Além disso, os valores destes componentes na corrente de gás tratado não são afetados com alterações nos parâmetros como o L/G, número de estágios e vazão de circulação do líquido absorvente, os quais afetam na absorção. Considerando-se a eficiência obtida através da correlação de Barros e Wolf (1997), foi possível identificar a influência destas variáveis na quantidade dos gases H_2S e CO_2 absorvidos. A influência da eficiência é mais evidente no caso do processo de adoçamento do que no processo de desidratação, devido ao fato de que o primeiro processo é bastante influenciado pela transferência de massa.

Gás Natural, Adoçamento, Desidratação, Otimização.

1. INTRODUÇÃO

Plantas de processamento de gás natural são, usualmente, projetadas para remover determinados contaminantes, como gases ácidos e água (Tavalera, 2002). Dentre os problemas ocasionados por estes contaminantes, os gases ácidos geram problemas de corrosão, além do fato do H_2S ser letal. Estes gases ácidos são removidos por um processo conhecido como “Processo de Adoçamento”. As unidades de adoçamento operam, normalmente, com soluções de aminas. A presença de água, por sua vez, leva a problemas de corrosão e de formação de hidratos. Os hidratos são compostos formados, principalmente, a partir de metano com a água formando um composto sólido, o qual pode gerar o entupimento das tubulações de produção de gás. A água é removida em unidades de desidratação, unidades que operam, normalmente, com soluções de glicóis. A Figura 1 ilustra um esquema geral para os processos de adoçamento e desidratação. Ambos processos possuem um absorvedor, onde os gases ácidos, no caso do adoçamento, ou a água, no caso da desidratação são absorvidos e um regenerador onde a solução de aminas, para o adoçamento, ou o TEG, na desidratação, são regenerados, ou seja, separados dos gases ácidos e da água, respectivamente. Uma diferença entre os processos é que o regenerador da desidratação, muitas vezes, aparece sem condensador de topo.

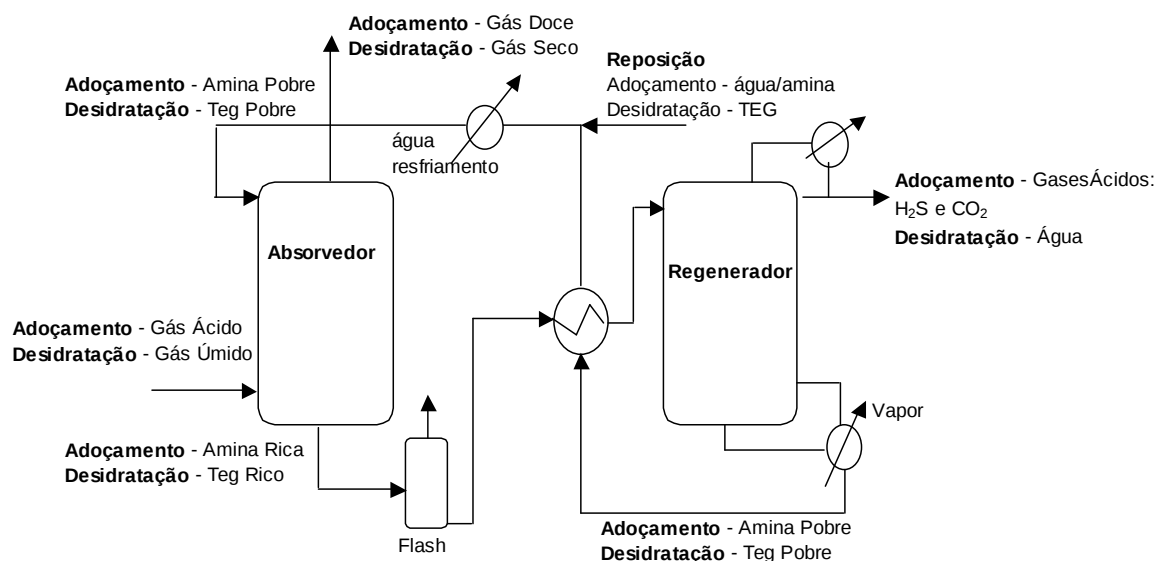


Figura 1: Fluxograma dos processos de adoçamento ou desidratação.

A amina comumente utilizada nas refinarias brasileiras no processo de adoçamento é a dietanolamina (DEA) e o glicol mais utilizado no processo de desidratação é o trietilenoglicol (TEG). Ambos os processos são essenciais na produção de gás e de petróleo e seus derivados e existem poucos estudos publicados no Brasil para ambos, o que mostra a necessidade de estudá-los. A proposta deste artigo é avaliar estes processos com o uso de um simulador comercial, o Aspen Plus[®], disponível na empresa que fornece as aminas e o glicol, identificando o melhor modelo termodinâmico, disponível neste simulador, bem como avaliar o uso de eficiência como alternativa ao método baseado na taxa de transferência de massa, propiciando uma forma de simulação que demanda menor esforço computacional, além de ser mais comum no meio industrial.

2. REVISÃO DA LITERATURA

No caso do processo de adoçamento, existe uma extensa bibliografia com dados de equilíbrio e, também, na abordagem de modelos termodinâmicos para a predição do equilíbrio líquido-vapor (ELV) do sistema. Dados de ELV para sistemas aquosos com monoetanolamina (MEA), DEA, CO₂ e H₂S em diferentes temperaturas e pressões são apresentados por Lee *et al.* (1973, 1975 e 1976), Lawson e Garst (1976) e Sidi-Boumedine *et al.* (2004).

Kent e Eisenberg (1976) propuseram um modelo para prever as composições das diferentes espécies envolvidas na absorção de H₂S e CO₂ em soluções aquosas de MEA e DEA. Este modelo é utilizado até os dias de hoje como base na grande maioria dos simuladores comerciais. Patil *et al.* (2006a) apresentaram uma extensão do modelo de Kent e Eisenberg para aminas terciárias, especificamente a metildietanolamina (MDEA). Desmukh e Mather (1981) desenvolveram um modelo com coeficientes de atividade e fugacidade. Chen *et al.* (1982) e Chen e Evans (1986) adaptaram o modelo *Non-Random-Two-Liquid* (NRTL) para sistemas com eletrólitos. O simulador comercial Aspen Plus[®] possui, em seu banco de dados, este modelo.

Dentre os estudos de processos, Tavalera (2002) realizou a otimização dos processos de adoçamento e desidratação com o uso do simulador comercial HYSYS[®]. Zhou *et al.* (2004) avaliaram o uso de etanolamina adsorvida em sílica na absorção de H₂S. Patil *et al.* (2005) desenvolveram um modelo simplificado, para simulação, incluindo um componente de eficiência para contabilizar os efeitos das reações químicas e da transferência de massa. Zou e Ho (2006) avaliaram o uso de membranas, produzidas com óxido de etileno, para a separação de CO₂, de H₂ e N₂. Lin *et al.* (2006) estudaram o uso de membranas na separação de CO₂, H₂S e H₂O de metano. Patil *et al.* (2006b) apresentaram uma alternativa para o processo de adoçamento com alimentações múltiplas.

No caso do processo de desidratação, a maioria dos trabalhos é sobre modelos termodinâmicos para a predição da formação de hidratos. Para predição de hidratos, Yamamoto *et al.* (2004) apresentaram um modelo com base na equação de Redlich Kwong-Soave. Jager *et al.* (2005) estudaram a predição de hidratos, a partir de um modelo de fugacidade, em sistema contendo metanol e cloreto de sódio.

Φi (2002) apresentou uma estimativa para a eficiência nos pratos dos absorvedores do processo de desidratação, obtido a partir de plantas industriais e Darwish *et al.* (2003) compararam diferentes modelos termodinâmicos na simulação da absorção do processo de desidratação. Os autores concluíram que há divergências entre os valores preditos e os reais, porém concluem que o modelo que utiliza a regra de mistura de Huron-Vidal modificada de segunda ordem é o que mais se aproxima dos dados da planta.

Diante da revisão, é evidente a importância e interesse no assunto. Em coerência com as linhas atuais de estudo, o presente trabalho aborda os modelos termodinâmicos e, também, de uso da eficiência como alternativa ao método baseado na taxa de transferência de massa, utilizando-se um simulador comercial disponível na indústria nacional, o Aspen Plus®.

3. METODOLOGIA

Com o uso do simulador comercial Aspen Plus® foram obtidos dados do ELV, com diferentes modelos termodinâmicos, para os sistemas de interesse. Para o adoçamento, foram avaliados os sistemas; CO₂-água-DEA e H₂S-água-DEA e para o processo de desidratação foi avaliado o sistema metano-água. Os dados foram tratados e comparados com os dados experimentais disponíveis na literatura, em diferentes pressões e temperaturas. Para o processo de adoçamento são apresentados gráficos com a pressão parcial do gás ácido, H₂S ou CO₂, em função do *load*. O *load* é a razão entre o número de moles do gás ácido e o número de moles da amina na fase líquida. Na desidratação serão apresentados dados de fração molar de água em função da pressão do sistema.

Definidos os modelos que melhor representaram os dados experimentais, foram realizadas simulações para o absorvedor e o regenerador, separadamente e otimizações foram realizadas através de análise de sensibilidade paramétrica. As simulações foram realizadas com e sem o uso de eficiência. Para o processo de adoçamento, a eficiência utilizada foi a desenvolvida por Barros (1997). No caso do processo de desidratação, foi considerada a eficiência em cada prato igual a 0,6, a qual foi obtida no trabalho de Φi (2002). Em seguida, foram realizadas simulações nas condições otimizadas para ambos os processos, considerando-se o reciclo, ou seja, o fundo do regenerador alimentando o absorvedor.

3.1 Modelos Utilizados

3.1.1 Processo de Adoçamento

Os modelos avaliados foram: *Amines*, ELECTNRTL, sendo que este modelo foi utilizado considerando ou não as reações de equilíbrio (ELECTNRTL c/ reações e s/reações) e o modelo de Peng-Robinson (PR). O modelo *Amines* utiliza o conceito desenvolvido por Kent e Eisenberg (1976) para cálculo da composição da fase líquida. Para cálculo do ELV, o modelo *Amines* utiliza o modelo de Redlich-Kwong para a fase vapor e para a fase líquida utiliza a Lei de Henry, para o H₂S e CO₂; a equação de Antoine modificada é utilizada para a água e DEA e o modelo de Scatchard-Hildebrand para os hidrocarbonetos. O modelo ELECTNRTL utiliza a equação de Redlich-Kwong para a fase vapor e para a fase líquida utiliza o modelo desenvolvido por Chen (1982) e Chen e Evans (1986), o qual agrega ao modelo NRTL a teoria de Pitzer-Debye-Huckel para considerar o meio eletrolítico, somado a um fator que pondera a quantidade relativa entre solvente, no caso a amina, e água através do conceito desenvolvido por Born (Manual Aspen Plus®, 1999).

3.1.2 Processo de Desidratação

Os modelos utilizados foram as equações de estado de Peng-Robinson (PR) e de Redlich-Kwong-Soave (RKS) com diferentes regras de mistura. A Tabela 1 apresenta o código de cada modelo utilizado no simulador Aspen Plus® e, também, um comentário a respeito de cada modelo.

Tabela 1: Modelos utilizados na comparação dos dados experimentais de ELV do sistema água-metano.

Identificação no Simulador	Modelo	Diferenças/Descrição
PRBM SRKBM	PR e regra de Boston e Mathias RKS e regra de Boston e Mathias	Boston e Mathias propuseram uma alteração no cálculo do parâmetro a das equações de PR e RKS.
PRMHV2 SRKMHV2	PR e regra de Huron Vidal modificada de 2ª. ordem RKS e regra de Huron Vidal modifica de 2ª. ordem	Huron e Vidal sugeriram um método a partir de modelos de energia livre de Gibbs de excesso. No equacionamento, é assumida a hipótese de pressão infinita. Na modificação proposta por Michelsen (1990) e Dahl e Michelsen (1990), a qual gerou o modelo denominado como MHV2, a hipótese utilizada é de pressão nula.
PRWS SRKWS	PR e regra de Wong Sandler RKS e regra de Wong Sandler	Wong e Sandler utilizaram a função de Helmholtz no desenvolvimento do modelo.

3.2 Variáveis analisadas na otimização

Para o absorvedor do adoçamento, as variáveis e faixas avaliadas foram: razão L/G entre 1,6 e 6, porcentagem de amina na solução absorvente, corrente Amina pobre, entre 25% e 40%, temperatura da corrente Amina Pobre entre 25°C e 44°C, pressão do absorvedor entre 4863 kPa e 9930 kPa e número de estágios entre 5 e 40. Para o regenerador do adoçamento, as variáveis e faixa avaliadas foram: prato de alimentação (entre 2 e 8), temperatura de alimentação entre 75°C e 115°C, número de estágios entre 6 e 20 e razão de refluxo entre 1 e 5.

Para o absorvedor da desidratação, as variáveis e faixas avaliadas foram: razão L/G entre 0,08 e 2, porcentagem de TEG na corrente TEG pobre entre 91% e 99,9%, número de estágios entre 2 e 10 e temperatura da corrente TEG pobre entre 35°C e 90°C. Para o regenerador da desidratação, as variáveis e faixas avaliadas foram: carga térmica entre 0,4 e 0,8 MMkcal/h e número de estágios entre 2 e 20.

3.3 Variáveis otimizadas

Para o absorvedor do adoçamento, buscou-se obter no Gás Doce frações molares de H₂S e CO₂ inferiores a 4×10⁻⁶ e 0,03, respectivamente. Estes valores foram obtidos em Tavalera (2002). Para o regenerador, o objetivo foi minimizar a quantidade de H₂S e CO₂ na corrente de Amina Pobre e a Carga Térmica no refervedor.

Para o absorvedor da desidratação, buscou-se obter uma fração molar de H₂O inferior a 2,0 ×10⁻³ na corrente de Gás Seco. Este valor foi obtido em Tavalera (2002). Para o regenerador, o objetivo foi minimizar a quantidade de água na corrente de TEG Pobre e operar com a temperatura de fundo inferior a 204°C (temperatura de degradação do TEG).

3.4 Correlação para cálculo da eficiência

A correlação para cálculo da eficiência de um componente j num estágio i , é dada pela Equação 1 (Barros e Wolf, 1997).

$$Ef(j,i) = 38,5309 * \left[\frac{klm(i)}{cplm(i)} \frac{dlm(i) * difl(j,i) * pmm(i)}{(mlm(i))^2} \right]^{-0,04516} \quad (1)$$

Onde:

$klm(i)$: condutividade térmica média no estágio i ,

$cplm(i)$: capacidade calorífica média no estágio i ,

$dlm(i)$: densidade média no estágio i ,

$difl(j,i)$: difusividade do componente j no estágio i ,

$mlm(i)$: viscosidade média no estágio i ,

$pmm(i)$: peso molecular médio no estágio i ,

i : estágio em questão,

j : componente.

3.5 Composições e condições utilizadas nas simulações dos processos

As composições utilizadas para o Gás Úmido e para o Gás Ácido estão apresentadas na Tabela 2. As composições foram obtidas em fontes diferentes: para o Gás Úmido foram obtidas de Darwish *et al.* (2003) e para o Gás Ácido foram obtidas a partir de um exemplo do simulador Aspen Plus®.

Tabela 2: Composições dos Gases Ácido e Úmido, utilizadas nas simulações

Componente	Gás Úmido – Fração Mássica	Gás Ácido – Fração Molar
H ₂ O	0,002	0,005
CO ₂	0,054	0,04
H ₂ S	0	0,025
CH ₄	0,004	0,001
Etano	0,84	0,85
Propano	0,09	0,05
N ₂	0,01	0,029

A Tabela 3 apresenta as condições iniciais utilizadas.

Tabela 3: Condições iniciais utilizadas para os gás ácido e para o gás úmido.

Condição Operacional	Gás Úmido	Gás Ácido
Temperatura (°C)	58	22,22
Pressão (kPa)	4275	6990
Vazão (kg/h)	14476	23346

No caso das correntes “Amina pobre” e “TEG pobre”, as vazões ou as diferentes razões de L/G, as concentrações de DEA e de TEG, respectivamente, nestas correntes e as temperaturas foram alteradas conforme descrito no item 3.2. As condições dos equipamentos, número de estágios e pressões, também foram alteradas conforme descrito no item 3.2

4. RESULTADOS

Os modelos foram comparados com os dados experimentais disponíveis na literatura. As temperaturas e pressões utilizadas foram próximas àquelas encontradas na operação do absorvedor e do regenerador do adoçamento e do absorvedor da desidratação.

4.1 Comparação dos modelos - Processo de adoçamento

Os modelos foram comparados para uma solução de 25% de DEA na temperatura de 37,78°C, para CO₂ e para o H₂S; na temperatura de 121,11°C para CO₂ e na temperatura de 65,56°C para H₂S. As Figuras 2, 3, 4 e 5 apresentam estes resultados.

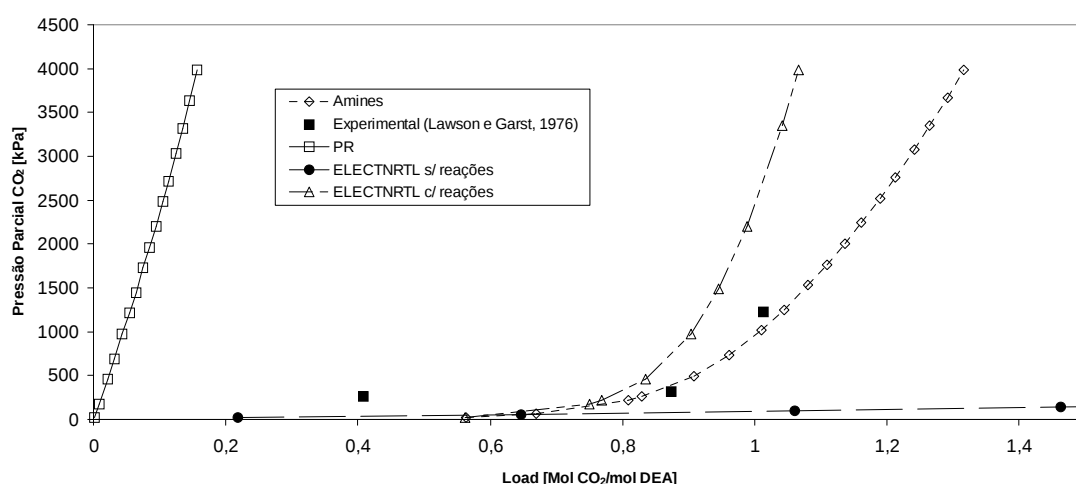


Figura 2: Pressão parcial de CO₂ em função do load. Solução com 25% em massa de DEA e temperatura de 37,78°C

Nota-se na Figura 2, que os modelos *Amines* e *ELECTNRTL* com reações, ou seja, o modelo *NRTL* considerando o meio eletrolítico e as reações de equilíbrio, se aproximam dos pontos experimentais, enquanto que o modelo de *PR* e o modelo *ELECTNRTL* sem reações, ou seja o modelo *NRTL*, considerando o meio eletrolítico, mas desconsiderando as reações do meio, trazem resultados bastante distantes dos dados experimentais.

Na análise para o H_2S , Figura 3, os modelos que se distanciaram muito dos dados experimentais foram desconsiderados (PR e ELECTNRTL sem reações. Nota-se, novamente, uma boa concordância dos modelos *Amines* e o ELECTNRTL com reações com os dados experimentais.

Na temperatura de 37,78°C, temperatura próxima à, usualmente, utilizada no absorvedor, os modelos *Amines* e ELECTNRTL com reações apresentaram resultados próximos aos experimentais e são indicados para as simulações do absorvedor.

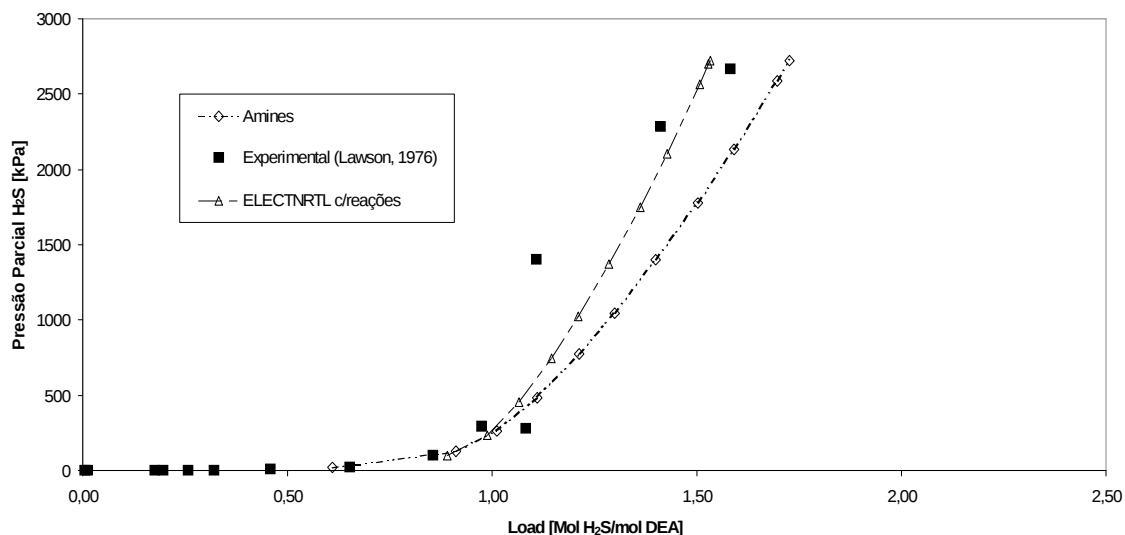


Figura 3: Pressão parcial de H_2S em função do *load*. Solução com 25% em massa de DEA e temperatura de 37,78°C

A Figura 4 apresenta os resultados para o CO_2 na temperatura de 121,11°C, ou seja, um valor próximo àquele encontrado nas operações dos regeneradores. Pode-se observar que os modelos *Amines* e ELECTNRTL com reações se aproximam bem dos dados experimentais.

A Figura 5 traz os resultados para o H_2S na temperatura de 65,56°C. Novamente, os modelos *Amines* e ELECTNRTL com reações apresentam resultados próximos aos dados experimentais, enquanto o modelo PR e o modelo ELECTNRTL sem reações trazem resultados bem distantes.

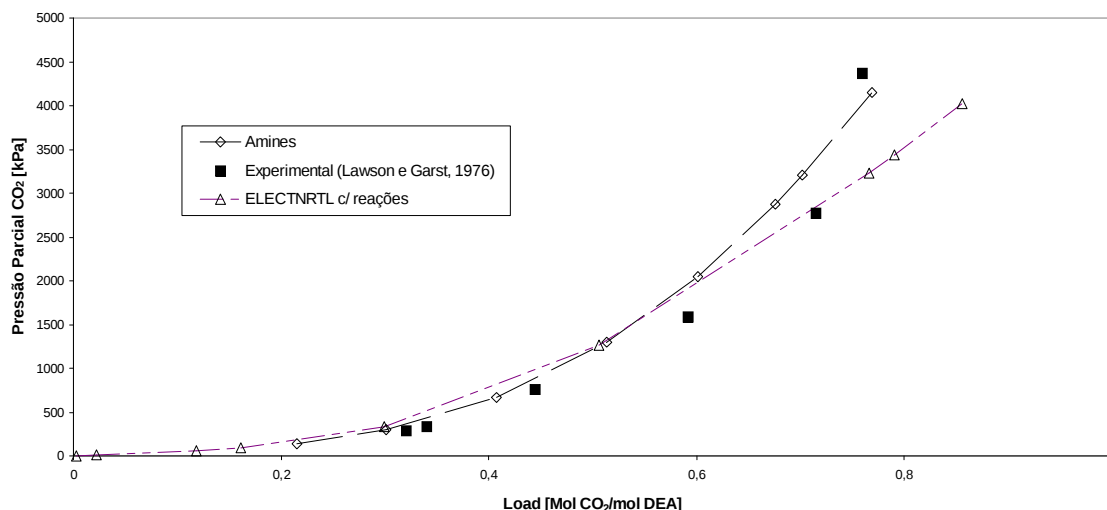


Figura 4: Pressão parcial de CO_2 em função do *load*. Solução com 25% em massa de DEA e temperatura de 121,11°C

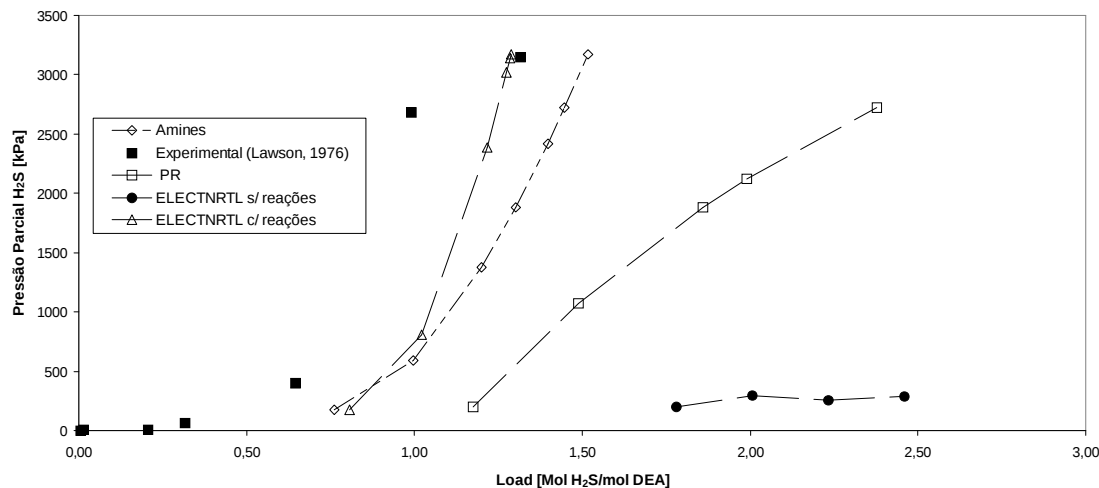


Figura 5: Pressão parcial de H_2S em função do *load*. Solução com 25% em massa de DEA e temperatura de $65,56^\circ C$

Para todos os casos avaliados, ou seja, nas temperaturas próximas às de operação do absorvedor e do regenerador, os modelos que melhor representaram os dados experimentais foram o Amines e o ELECTNRTL com reações. O uso de uma equação de estado ou de um modelo de coeficiente de atividade, sem considerar as reações de equilíbrio, são incapazes de prever o equilíbrio para os sistemas aqui avaliados. Para a simulação do absorvedor e do regenerador do processo de adoçamento com o Aspen Plus® sugere-se utilizar o modelo Amines ou o modelo ELECTNRTL considerando as reações de equilíbrio.

4.2 Comparação dos modelos - Processo de desidratação

Os modelos foram comparados com dados experimentais de sistemas binários água-metano disponíveis na literatura. Na Figura 6, estão representados todos os modelos avaliados e é possível notar como, exceto o modelo RKSMHV2, os demais se afastam dos dados experimentais. O modelo PRMHV2, apesar de se afastar dos dados experimentais, apresentou um perfil semelhante aos dados experimentais. A Figura 7 apresenta os resultados apenas para estes dois modelos.

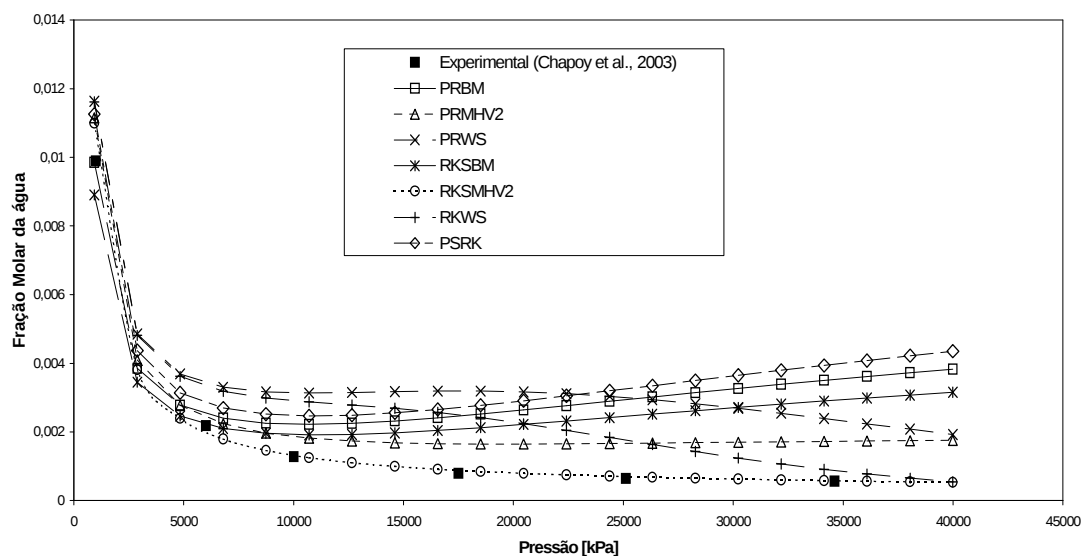


Figura 6: Fração molar de água na fase vapor em função da pressão para o sistema binário Água-Metano. Temperatura de $44,97^\circ C$

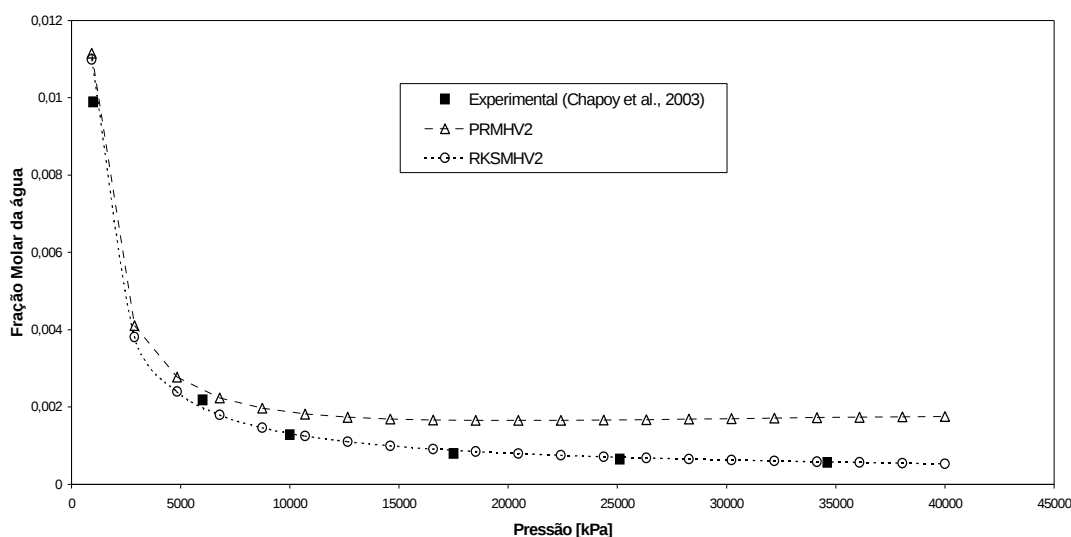


Figura 7: Fração molar de água na fase vapor em função da pressão para o sistema binário: Água-Metano. Temperatura de 44,97°C – melhores modelos

Os modelos que melhor representaram o sistema foram as equações de estado (PR e RKS) com a regra de mistura de Huron Vidal modificada de 2ª. ordem, principalmente em pressões altas, acima de 5000 kPa, numa região de pressão maior que a pressão crítica do metano (4600 kPa). O trabalho de Darwish *et al.* (2003) também indicou que o modelo SRKMHV2 do simulador comercial Aspen Plus® foi um dos que mais se aproximou dos dados de uma planta. Deste modo, sugere-se o uso deste modelo para simulação do processo de desidratação.

4.3 Resultados das simulações – Processo adoçamento

Os resultados apresentados foram obtidos com o uso do modelo *Amines* através do método de sensibilidade paramétrica.

Sem considerar a eficiência, ocorre a absorção praticamente completa dos gases ácidos, independentemente das faixas avaliadas. Com o uso da eficiência, foi possível notar que a variável que possui maior impacto na absorção, principalmente do H₂S, é o número de estágios. As Tabelas 4 e 5 apresentam os resultados obtidos na otimização do absorvedor e do regenerador.

Tabela 4: Otimização para o absorvedor do processo de adoçamento.

Parâmetro	Valor Otimizado
Razão L/G	2,0
Porcentagem de DEA na solução absorvente	30%
Temperatura da corrente Amina Pobre	35°C
Pressão no absorvedor	6890 kPa
Número de Estágios	20

Tabela 5: Otimização para o regenerador do processo de adoçamento.

Parâmetro	Valor Otimizado
Prato de Alimentação	2
Temperatura de Alimentação	115°C
Razão de Refluxo	3
Número de Estágio	15

Entre 5 e 20 estágios, a queda na fração molar de H₂S no gás doce é muito expressiva, sendo que a partir de 20 estágios este parâmetro é pouco alterado. Em outras simulações, onde se variou os parâmetros listados na Tabela 4 e nas faixas descritas no item 3.2, com um número de estágios igual a 10, não foi possível obter, com o uso de eficiência, em nenhuma das condições avaliadas, uma fração molar de H₂S inferior a 4x10⁻⁶. No caso do regenerador, os valores obtidos, exceto para a temperatura de alimentação, foram aqueles onde a quantidade de H₂S e de CO₂ na corrente de Amina pobre ficaram, praticamente, constantes. Para a temperatura de alimentação, foi considerado o maior valor avaliado, pois as quantidades de H₂S e de CO₂ na corrente de Amina pobre se mostraram pouco alteradas em relação a esta variável e considerando a integração energética do sistema, onde esta alimentação é aquecida pelo fundo do regenerador, sugere-se que seja adotada a maior recuperação energética possível.

O uso de eficiência é condição necessária para análise do absorvedor, uma vez que sem o uso de eficiência ocorre absorção praticamente completa dos gases H_2S e CO_2 mesmo com 5 estágios. Na literatura, é possível encontrar dicas de projeto sugerindo um número de estágios superior a 20 para o absorvedor e, também, alguns trabalhos que usam o método baseado na taxa de transferência de massa mostram que, a partir de 15 estágios, as frações molares dos gases ácidos, em unidades com DEA, tendem a valores menores que 1×10^{-7} , o que mostra a coerência dos resultados encontrados neste trabalho.

Utilizando as condições otimizadas numa simulação com reciclo, onde o fundo do regenerador alimenta o absorvedor, foi possível obter as frações molares de H_2S e CO_2 no gás doce menores que 4×10^{-6} e 0,03, respectivamente.

4.4 Resultados das simulações – Processo desidratação

As condições obtidas na otimização estão apresentadas nas Tabelas 6 e 7. Os resultados foram obtidos com o uso do modelo SRKMHV2 e considerando a eficiência em cada prato igual a 0,6, conforme trabalho de Φ i (2002).

Tabela 6: Otimização para o absorvedor do processo de desidratação.

Parâmetro	Valor Otimizado
Razão L/G	0,16
Porcentagem de TEG na solução absorvente	>98%
Temperatura da corrente TEG Pobre	35°C
Número de Estágios	7

Tabela 7: Otimização para o regenerador do processo de desidratação.

Parâmetro	Valor Otimizado
Número de Estágios	3
Carga Térmica	2302×10^6 J/h
Pressão	20 kPa

A pureza de TEG na corrente de TEG pobre, ou melhor, a baixa quantidade de água nesta corrente é a variável que mais impacta na qualidade da remoção de água do gás úmido. Com cerca de 4% em massa de água nesta corrente, não foi possível obter frações molares de água inferiores a 2×10^{-3} no gás seco.

Para melhorar a remoção de água no regenerador uma alternativa interessante é operar com pressões menores que a atmosférica. Assim, é possível obter uma temperatura, no fundo do regenerador, inferior à de degradação do TEG e remover uma quantidade maior de água. Este tipo de operação, atualmente, não é comum nas unidades de desidratação brasileiras. Na simulação com reciclo, utilizando as condições otimizadas, foi possível obter uma fração molar de água inferior a 2×10^{-3} no gás seco.

5. CONCLUSÃO

O simulador Aspen Plus[®], com os cuidados mostrados neste trabalho, mostra-se uma ferramenta muito útil para projetos de novas unidades e também para a otimização de unidades existentes. A escolha correta do modelo termodinâmico é de extrema importância, o que ficou evidente em ambos processos. No caso do processo de adoçamento, considerar as reações de equilíbrio, além de considerar o meio eletrolítico, é fundamental e o uso de eficiência, para o cálculo das colunas com o método de estágios de equilíbrio se mostrou uma boa alternativa.

Para o processo de desidratação, a opção de se operar com pressões reduzidas no regenerador surge com proposta interessante para aumentar a remoção de água do TEG rico preservando o TEG. Para sua operacionalização, caso não haja vapor disponível para se operar com ejetores, o uso de bombas de vácuo secas é uma opção.

6. AGRADECIMENTOS

À empresa Oxiteno S.A. representada por Mirna Lia Simas, ao CNPq e FAPESP.

7. REFERÊNCIAS

- BARROS, A. A. C., MACIEL, M. R. W.. Desenvolvimento de modelo de estágios de não equilíbrio e proposição de correlações de eficiência para os processos de destilação convencional e extrativa. **Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP**, Campinas/SP, agosto 1997.
- Chen, C. C.; Britt, H. I.; Boston, J. F.; Evans, L. B. Local composition model for excess Gibbs energy of electrolyte systems. Part I: Single solvent, single completely dissociated electrolyte systems. **AIChE Journal**. 1982, 28, 588.

- CHEN, C. C.; EVANS, L. B. A local composition model for excess Gibbs energy of aqueous electrolyte systems. **AIChE Journal**. 1986, 32, 444.
- DARWISH, N. A., MEHAIDEB, A. A., HUGHES, R. Computer simulation of BTEX emission in natural gas dehydration using PR and RKS equations of state with different predictive mixing rules,. **Environmental Modelling & Software** 19 (2003) 957-965
- DAHL, S., MICHELSEN, M. L. High-pressure vapor-liquid equilibrium with UNIFAC-based equation of state. **AIChE Journal**, v. 36, p 1829, 1990.
- DESMUKH, R. D.; MATHER, A. E. Mathematical model for equilibrium solubility of hydrogen sulfide and carbon dioxide in aqueous alkanolamine solutions. **Chem Eng. Sci.** 1981, 36, 355.
- JAGER, M. D., BALLARD, A.L. e SLOAN Jr, E. D. Comparison between experimental data and aqueous-phase fugacity model for hydrate prediction. **Fluid Phase Equilibria** 232, 2005, 25-36.
- KENT, R. L.; EISENBERG, B. Better data for amine treating. *Hydrocarbon Process.* 1976, 55, 87.
- LAWSON, J., D.; GARST, A. W.; Gas Sweetening Data: Equilibrium solubility of Hydrogen Sulfide and Carbon Dioxide in Aqueous Monoethanolamine and Aqueous Diethanolamine Solutions. **Journal of Chemical Engineering Data** vol 21, nº 1, 1976, 20-30.
- LEE, J.; OTTO, F.; MATHER, A. E.; Partial Pressure of Hydrogen Sulfide over Aqueous Diethanolamine solutions. **Journal of Chemical and Eng. Data**, vol 18, nº 4, 1973. 420.
- LEE, J.; OTTO, F.; MATHER, A. E.; Solubility of Mixture of Carbon Dioxide and Hydrogen Sulfide in 5,0 N, Monoethanolamine Solution. **Journal of Chemical and Eng. Data**, vol 20, nº 2, 1975. 161-163.
- LEE, J.; OTTO, F.; MATHER, A. E.; Equilibrium between Carbon Dioxide and Aqueous Monoethanolamine Solutions. **J. appl. Chem. Biotechnol.** 1976, 26, 541-549.
- LIN, H., WAGNER, E. V., RAHARJO, R., FREEMAN, B. D. e ROMAN, I., High-Performance polymer membrane for natural-gas sweetening. **Advanced Materials**, 2006, 18, 39-44.
- Manual Aspen Plus®, 1999. Manual Aspen Plus®, Physical Property Methods and Models, Reference Manual.
- MICHELSEN, M. L.. A modified Huron-Vidal mixing rule for cubic equation of state. **Fluid Phase Equilibria**. v 60 p. 213, 1990.
- PATIL, P. **PhD Thesis, University of Manchester**, Manchester, UK (2005).
- PATIL, P., MALIK, Z. e JOHNSON, M. Prediction of CO₂ and H₂S solubility in aqueous MDEA solutions using an extended Kent e Eisenberg model. In: **Chemical & Absorption**, 2006a.
- PATIL, P., MALIK, Z. e JOHNSON, M. Retrofit design for gas sweetening processes. In: **Chemical & Absorption**, 2006b.
- SIDI-BOUMEDINE, R.; HORSTMANN, S.; FISCHER, K.; PROVOST, E.; FURST, W.; GMEHLING, J. Experimental determinations of carbon dioxide solubility data in aqueous alkanolamine solutions. **Fluid Phase Equilibria**, 218 (2004), 85-94.
- TAVALLERA, R. M. R., Caracterização de sistemas, simulação e otimização de etapas da planta de processamento de gás natural,. **Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Química, Unicamp**, Campinas/Brasil, 2002.
- YAMAMOTO, Y., YOON, J., KOMAI, T. e KAWAMURA, T. PSRK Method for Gas Hydrate Equilibria: I. Simple and Mixed Hydrates. **Aiche Journal**, january 2004, vol. 50, nº 1. 203-214.
- ZHOU, L., YU, M., ZHONG, L. e ZHOU, Y. Feasibility study on pressure swing sorption for removing H₂S from gas natural. **Chemical Engineering Science** 59, 2004, 2401-2406.
- ZOU, J. e HO, W.S.W., CO₂-Selective polymeric membranes containing amines in crosslinked poly(vinyl alcohol). **Journal of membrane science** 286, 2006, 310-321.
- ØI, L. E., Estimation of tray efficiency in dehydration absorbers. **Chemical Engineering and Processing**, 42, 2003, 867-878.

Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo deste artigo.