INSTITUTO LATINO-AMERICANO DE TECNOLOGIA, INFRAESTRUTURA E TERRITÓRIO (ILATIT)

ENGENHARIA QUÍMICA

SIMULAÇÃO E ANÁLISE DO PROCESSO DE PRODUÇÃO DE AMÔNIA RENOVÁVEL UTILIZANDO ASPEN PLUS®

CARMELO RAFAEL ARMANDO GARCIA

Foz do Iguaçu
2025

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

INSTITUTO LATINO-AMERICANO DE TECNOLOGIA, INFRAESTRUTURA E TERRITÓRIO (ILATIT)

ENGENHARIA QUÍMICA

SIMULAÇÃO E ANÁLISE DO PROCESSO DE PRODUÇÃO DE AMÔNIA RENOVÁVEL UTILIZANDO ASPEN PLUS®

CARMELO RAFAEL ARMANDO GARCIA

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto Latino-Americano de Tecnologia, Infraestrutura e Território da Universidade Federal da Integração Latino-Americana, como requisito parcial à obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. César Adolfo Rodriguez Sotomonte

Foz do Iguaçu
2025

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

CARMELO RAFAEL ARMANDO GARCIA

SIMULAÇÃO E ANÁLISE DO PROCESSO DE PRODUÇÃO DE AMÔNIA RENOVÁVEL UTILIZANDO ASPEN PLUS®

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto Latino-Americano de Tecnologia, Infraestrutura e Território da Universidade Federal da Integração Latino-Americana, como requisito parcial à obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química.

BANCA EXAMINADORA

_____
Orientador: Prof. Dr. César Adolfo Rodriguez Sotomonte
UNILA

_____
Prof. Dra. Andréia Cristina Furtado
UNILA

_____
Prof. Msc. Fernando David Céspedes
FIUNA

Foz do Iguaçu, 09 de Agosto de 2025.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

Dedico este trabalho a Diana Jazmín, que esteve ao meu lado em cada noite longa, em cada dúvida e em cada conquista. Que este trabalho seja apenas o começo de tudo o que ainda vamos construir juntos.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

AGRADECIMENTOS

A conclusão deste TCC representa não apenas o fim de uma etapa acadêmica, mas também o resultado de uma trajetória marcada por esforço, aprendizado e, acima de tudo, apoio.

Agradeço, em primeiro lugar, à minha companheira de vida Diana Jazmín, pelo amor, paciência e incentivo incondicional em todos os momentos, inclusive nos mais desafiadores. Sua presença, junto com o Tom e a Alumínio, foi essencial ao longo dessa jornada.

Aos pais dela, Domi e Rubén, pela acolhida generosa, pelo apoio que me motivaram a seguir em frente.

Aos meus pais, Blanca e José, que sempre acreditaram no meu potencial e me ensinaram o valor da educação e da perseverança. Aos meus irmãos, pelo companheirismo, pelas conversas sinceras e por estarem sempre presentes, mesmo à distância.

À Fundação PTI-PY, pelo apoio financeiro por meio da bolsa de estudos, concedido no início da minha trajetória acadêmica, o qual foi essencial para minha formação e contribuiu diretamente para a realização deste projeto.

Ao Cibiogás, por me permitir realizar o estágio e brindar uma experiência onde aplicar e ampliar meus conhecimentos em energias renováveis, contando com o apoio e a orientação de profissionais comprometidos com a inovação e o desenvolvimento sustentável, e que continua contribuindo para o meu crescimento profissional.

Aos professores César Sotomonte, Andreia Furtado e Fernando Céspedes, pela orientação, pelas sugestões construtivas e pela confiança depositada no meu trabalho.

Agradeço também à Universidade Federal da Integração Latino-americana por me proporcionar uma formação sólida e por ser um espaço de crescimento intelectual e pessoal. Aos colegas de curso, pela parceria ao longo da graduação, pelas trocas de conhecimento, pelas risadas e pela amizade construída.

A todos que, de alguma forma, fizeram parte dessa caminhada o meu sincero muito obrigado.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

Ñande rekove ha'e peteĩ mba'apo guasu ñangarekohápe ñande yvy rehe.
Nossa vida é um grande trabalho de cuidado as nossas terras
Proverbio guaraní

RESUMO

Este trabalho apresenta a simulação computacional e análise de um processo integrado para a produção de amônia renovável a partir de biometano, utilizando o software Aspen Plus®. O estudo está estruturado em três etapas principais: (i) reforma a vapor do biometano para geração de hidrogênio; (ii) separação do nitrogênio do ar por destilação criogênica; e (iii) síntese de amônia pelo processo Haber-Bosch. Na etapa de reforma, foram utilizados reatores de equilíbrio para simular a reforma (800 °C, 25 bar), a reação de deslocamento gás-água de alta temperatura (350 °C) e a de baixa temperatura (200 °C). Os resultados indicaram uma conversão de metano superior a 95%, com rendimento de hidrogênio acima de 70% em fração molar na corrente reformada. A integração de condensadores e absorvedores (remoção de CO_2 com MEA) possibilitou a obtenção de uma corrente purificada de H_2 com teor desprezível de CO_2. Na etapa de separação de nitrogênio, foi simulada uma coluna de destilação criogênica operando a 5,5 bar e –173 °C. As análises de sensibilidade mostraram que tanto o número de estágios teóricos quanto a carga térmica do refervedor influenciam fortemente a pureza do produto. Em condições otimizadas, obteve-se pureza de N_2 acima de 99,9%, confirmando a robustez da tecnologia criogênica em escala industrial. Na etapa de síntese de amônia, utilizou-se um reator estequiométrico para representar o processo Haber-Bosch, seguido de condensação e de um sistema de reciclo com purga. As simulações demonstraram que, mesmo em pressões moderadas, o reciclo garante elevadas conversões globais. A corrente final apresentou concentração de NH_3 superior a 99,95%, compatível com especificações industriais. De forma geral, o processo integrado mostrou-se tecnicamente viável, com resultados consistentes com os dados da literatura. O estudo reforça o potencial do biometano como matéria-prima renovável para a produção sustentável de hidrogênio, nitrogênio e amônia, além de fornecer subsídios para avaliar o impacto de parâmetros operacionais na conversão, eficiência de separação e qualidade do produto.

Palavras-chave: amônia renovável; biometano; reforma a vapor; destilação criogênica; Aspen Plus®.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

RESUMEN

Este trabajo presenta la simulación computacional y el análisis de un proceso integrado para la producción de amoníaco renovable a partir de biometano, utilizando el software Aspen Plus®. El estudio se estructura en tres etapas principales: (i) reforma a vapor del biometano para la generación de hidrógeno; (ii) separación de nitrógeno del aire mediante destilación criogénica; y (iii) síntesis de amoníaco mediante el proceso Haber-Bosch. En la etapa de reforma, se emplearon reactores de equilibrio para simular la reforma (800 °C, 25 bar), el desplazamiento gas-agua de alta temperatura (350 °C) y de baja temperatura (200 °C). Los resultados mostraron una conversión de metano superior al 95%, con un rendimiento de hidrógeno mayor al 70% en fracción molar en la corriente reformada. La integración de condensadores y absorbedores (con eliminación de CO_2 por MEA) permitió obtener una corriente purificada de H_2 con contenido despreciable de CO_2. En la etapa de separación de nitrógeno, se simuló una columna de destilación criogénica operando a 5,5 bar y –173 °C. Los análisis de sensibilidad revelaron que tanto el número de etapas teóricas como la carga térmica del rehervidor afectan significativamente la pureza del producto. En condiciones optimizadas, se alcanzó una pureza de N_2 superior al 99,9%, confirmando la solidez de esta tecnología a gran escala. En la etapa de síntesis de amoníaco, se utilizó un reactor estequiométrico para representar el proceso Haber-Bosch, seguido de condensación y un sistema de recirculación con purga. Las simulaciones mostraron que, incluso en condiciones de presión moderada, el reciclo asegura altas conversiones globales. La corriente final alcanzó una concentración de NH_3 superior al 99,95%, cumpliendo con especificaciones industriales. En conjunto, el proceso integrado demostró ser técnicamente viable, con resultados consistentes con los reportados en la literatura. El estudio subraya el potencial del biometano como materia prima renovable para la producción sostenible de hidrógeno, nitrógeno y amoníaco, además de ofrecer información clave sobre el impacto de los parámetros operativos en la conversión, la eficiencia de separación y la calidad del producto.

Palabras clave: amoniaco renovable; biometano; reforma a vapor; destilación criogénica; Aspen Plus®.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

ABSTRACT

This work presents the computational simulation and analysis of an integrated process for renewable ammonia production from biomethane using Aspen Plus® software. The study is structured in three main stages: (i) steam reforming of biomethane for hydrogen generation; (ii) nitrogen separation from air by cryogenic distillation; and (iii) ammonia synthesis via the Haber-Bosch process. In the reforming stage, equilibrium reactors were used to simulate steam reforming (800 °C, 25 bar), high-temperature water-gas shift (350 °C), and low-temperature water-gas shift (200 °C). The results indicated methane conversion above 95%, with hydrogen yields exceeding 70% molar fraction in the reformate stream. The integration of condensers and absorbers (MEA-based CO_2 removal) enabled a purified H_2 stream with negligible CO_2 content. For the nitrogen separation stage, a cryogenic distillation column operating at 5.5 bar and –173 °C was simulated. Sensitivity analyses showed that both the number of theoretical stages and the reboiler duty strongly influence nitrogen purity. Under optimized conditions, N_2 purities above 99.9% were achieved, confirming the robustness of the cryogenic approach for large-scale operation. In the ammonia synthesis stage, a stoichiometric reactor was employed to represent the Haber-Bosch process, followed by condensation and a recycle loop with purge. The simulations demonstrated that, even at moderate pressures, the recycle loop ensures high overall conversions. The final product stream reached an NH_3 concentration above 99.95%, meeting industrial specifications. Overall, the integrated process proved technically feasible, with results consistent with those reported in the literature. The study highlights the potential of biomethane as a renewable feedstock for the sustainable production of high-purity hydrogen, nitrogen, and ammonia, while also providing insights into the influence of operational parameters on conversion, separation efficiency, and product quality.

Keywords: renewable ammonia; biomethane; steam reforming; cryogenic distillation; Aspen Plus®.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1. Porcentagem da produção mundial de fertilizantes nitrogenados a partir de NH_3 18
Figura 2. Gráfico de crescimento da demanda de amônia no tempo 20
Figura 3. Aplicação de fertilizantes nitrogenados por região e produto 21
Figura 4. Demanda prevista de amônia até 2050 para o cenário de 1,5 °C 22
Figura 5. Esquema da produção industrial de amoníaco 24
Figura 6. Infraestrutura de transporte de amônia, portos de carga e descarga de amônia 28
Figura 7. Esquema da produção industrial de amoníaco renovável. 29
Figura 8. Simulação da reforma a vapor do biometano 39
Figura 9. Simulação da ASU por destilação criogênica 40
Figura 10. Simulação do processo de síntese de NH3. 41
Figura 11. Superfície de sensibilidade da produção de H_2 em função da T e P no SMR 45
Figura 12. Produção de H_2 em função da temperatura no reator de reforma 46
Figura 13. Produção de H_2 em função da pressão no reator de reforma 47
Figura 14. Produção de H_2 em função do fornecimento de H_2O 48
Figura 15. Análise da pureza do N_2 em função de estágios e calor de refervedor. ..49
Figura 16. Concentração do N_2 em função do número de estágios 50
Figura 17. Impacto da potência do refervedor na vazão e concentração do N_2 51
Figura 18. Concentração de NH3 na corrente final em função da purga..... 53
Figura 19. Produção de NH_3 em função da alimentação de N_2 54
Figura 20. Produção de NH_3 em função do % de conversão de N_2..... 55

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Composição dos fluxos de entrada e saída de cada reator para a produção de H2.....44
Tabela 2. Fluxo de massa em cada etapa da obtenção de N_2.....49
Tabela 3. Quantidade de produção da síntese de amônia.....52

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ANDA	Associação Nacional para Difusão de Adubos
ASU	Unidade de Separação do Ar
CCS	Captura e Armazenamento de Carbono
CO_2	Dióxido de Carbono
GEE	Gases de Efeito Estufa
H_2	Hidrogênio
HB	Haber-Bosch
IFA	Associação Internacional de Fertilizantes
MEA	Monoetanolamina
Mt	Megatonelada
mg/L	Miligramas por Litro
N_2	Nitrogênio
NH_3	Amônia
OSHA	Administração de Segurança e Saúde Ocupacional
PNF	Plano Nacional de Fertilizantes
ppm	Partes por Milhão
PSA	Adsorção por Oscilação de Pressão
SMR	Reforma a Vapor do Metano
TCC	Trabalho de Conclusão de Curso
WGS	Deslocamento Água-Gás

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO 14
1.1 OBJETIVOS 16
1.1.1 Objetivo Geral 16
1.1.2 Objetivos Específicos 16

2 DESENVOLVIMENTO 17
2.1 AMÔNIA 17
2.1.1 Aplicações da Amônia 17
2.1.2 Mercado 19
2.1.3 Processo de produção da Amônia 24
2.1.4 Armazenamento e transporte da amônia 27
2.2 AMÔNIA RENOVÁVEL 28
2.2.1 Hidrogênio Renovável 29
2.2.2 Captura de Carbono 30
2.3 ASPEN PLUS® 31
2.4 TRABALHOS SIMILARES 32

3 METODOLOGIA 37

4 RESULTADO E DISCUSÕES 43

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS 56

REFERÊNCIAS 58

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

1 INTRODUÇÃO

As preocupações com as mudanças climáticas estão aumentando continuamente. Em resposta, várias políticas e inovações tecnológicas são desenvolvidas para lidar com as emissões de Gases de Efeito Estufa (GEE) como o dióxido de carbono (CO_2). No entanto, como avançar em direção a uma economia de baixo carbono para produzir um sistema terrestre capaz de suportar a atividade humana e, ao mesmo tempo, manter economias e comunidades rurais viáveis ainda está para ser explorado.

A amônia (NH_3) é vista como uma peça-chave para encontrar essas metas. Ela é um dos compostos mais importantes no setor agrícola, pois é usada para produzir fertilizantes à base de nitrogênio, dos quais dependem 50% da produção global de alimentos (IRENA, 2022).

Desde a década de 1910, seu principal método de obtenção é o processo Haber-Bosch (HB), que é um dos processos químicos com maior emissão de carbono, sendo responsável por mais de 1% do total de emissões de carbono (Osorio-Tejada; Tran; Hessel, 2022). Portanto, alcançar a produção de amônia em larga escala e, ao mesmo tempo, minimizar sua pegada de carbono, seria de grande ajuda para descarbonizar um processo vital na produção de alimentos.

Este método, desenvolvido por Fritz Haber e Carl Bosch no início do século XX, é uma das descobertas mais importantes no campo da química industrial. O mesmo ocorre em alta pressão e alta temperatura, em presença de um catalisador de ferro. O nitrogênio é obtido do ar atmosférico, enquanto o hidrogênio é produzido a partir do gás natural ou de outras fontes de hidrocarbonetos (Ribeiro, 2013).

Nesse contexto, a presente pesquisa de Trabalho de Conclusão de Curso (TCC) justifica-se pelo crescente interesse em encontrar alternativas mais sustentáveis para os processos industriais nos últimos anos, especialmente na indústria química, conhecida por sua alta demanda de energia e emissões significativas de GEE.

Uma alternativa mais sustentável, diferente do método convencional HB até agora mais utilizado, é a amônia renovável, que pode ser obtida a partir de fontes de hidrogênio renovável, alimentadas por energia solar, eólica ou biomassa (Ribeiro, 2013).

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

A importância desta pesquisa foca-se nos benefícios ambientais que a amônia renovável poderia proporcionar, além de reduzir as emissões de CO_2 associadas à produção convencional, bem como: i) diminuir a dependência de combustíveis fósseis; ii) promover a diversificação da matriz energética; iii) contribuir para a mitigação das mudanças climáticas (El-Maghraby; Mohamed; Hassanean, 2024).

A energia renovável é fundamental para reduzir as emissões de carbono e mitigar os problemas ambientais causados pelas mudanças climáticas. As principais fontes de energia renovável incluem a energia eólica e a energia solar. Entretanto, devido à sua intermitência e flutuação da energia gerada pelas fontes eólica e solar não pode ser totalmente utilizada, o que resulta em uma quantidade limitada de energia (Wu *et al.*, 2024).

Nesse sentido, uma alternativa de solução a esses problemas é o sistema de armazenamento de energia, tais como armazenamento das energias: i) térmica; ii) mecânica; iii) eletroquímica; iv) energia química. Concomitantemente, a eletricidade gerada pela energia eólica e solar pode ser convertida em um portador de energia que seja mais conveniente para o abastecimento. Por sua vez, o hidrogênio como meio de armazenamento de energia, pode ser produzido a partir de água eletrolisada e é uma maneira eficaz de resolver o problema da energia. Porém, devido à baixa densidade volumétrica do hidrogênio, é difícil armazená-lo e transportá-lo, sendo necessário encontrar uma forma adequada para consumir o hidrogênio renovável e resolver o problema de intermitência da energia renovável. Sendo assim, a amônia representa uma opção viável para o armazenamento e aproveitamento dessa energia (Wu *et al.*, 2024).

Como observado em Leitão (2023) é possível dimensionar esse processo da produção da amônia renovável num esquema simplificado a partir da reação do hidrogênio produzido em eletrólise da água, utilizando uma fonte de energia renovável, com o nitrogênio atmosférico.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Objetivo Geral

Identificar a viabilidade técnica do processo de produção da amônia renovável pela simulação em Aspen Plus®.

1.1.2 Objetivos Específicos

i) Expor o processo de produção de amônia e amônia renovável;
ii) Simular e analisar o processo de produção da amônia renovável;
iii) Comprovar a viabilidade técnica do processo de produção de amônia e validar os resultados da simulação.

Finalmente, o TCC se estrutura em três capítulos além a introdução e considerações finais. O primeiro capítulo expõe o desenvolvimento do trabalho, abordando o conceito, aplicações, mercado, processo de produção e armazenamento da amônia. Em sequência, apresenta-se a amônia renovável com o sistema de produção de hidrogênio e captura de carbono. Este capítulo fecha com um mapeamento e análise de Aspen Plus ® a partir de outras simulações. O segundo capítulo apresenta a metodologia, junto com a simulação do processo desenvolvido por etapas. E o último capítulo debruça os resultados em análises de sensibilidade para maximizar o rendimento do processo de produção da amônia renovável

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

2 DESENVOLVIMENTO

2.1 AMÔNIA

A amônia é um composto de nitrogênio e hidrogênio com a fórmula NH_3. Também conhecida como gás amoníaco, é um gás incolor não inflamável, alcalino e irritante nas condições normais de temperatura e pressão, com um cheiro pungente característico (Leitão, 2023).

Sua contribuição para as necessidades nutricionais dos organismos terrestres é significativa, servindo como precursor de alimentos, na fabricação de fertilizantes e a aplicação na indústria devido a sua alta densidade de energia volumétrica, três vezes o valor do hidrogênio (Amin *et al.*, 2013).

Com uma densidade menor do que a do ar, em torno de uma densidade relativa igual 0,6 e ponto de fusão igual a -33,40 °C a 1 atm, a amônia pode ser comprimida, formando um líquido claro sob pressão, o que facilita o transporte em comparação com outros gases liquefeitos (Linde, [*s. d.*]).

Embora seja utilizada amplamente, a amônia é cáustica e perigosa sendo altamente irritante e corrosiva Seu cheiro forte é percebido em níveis superiores a 30 mg/L, provocando irritação nos olhos e no nariz a 50 mg/L, comprometendo a função pulmonar a 1000 mg/L, e existe risco de morte com a exposição a concentrações acima de 1500 mg/L de NH_3. A Administração de Segurança e Saúde Ocupacional dos EUA (OSHA) estabeleceu um limite de exposição de 25 partes de amônia por milhão de partes de ar (25 ppm) durante um dia de trabalho de 8 horas e um limite de exposição curta (aprox. 15 minutos) de 35 ppm (ATSDR, 2004)

2.1.1 Aplicações da Amônia

Segundo IRENA (2022) , atualmente os fertilizantes nitrogenados são responsáveis por cerca de 80% da demanda total de amônia. Outros mercados incluem a fabricação de produtos químicos, plásticos e têxteis, o setor de mineração, produtos farmacêuticos, refrigeração, tratamento de resíduos e tratamento do ar, como a redução do Óxido de Nitrogênio (NO_X). Além disso, com base em Royal Society (2020) e Valera-Medina *et al.* (2018) a amônia é proposta como combustível livre de carbono e transportador de hidrogênio. No entanto, (IRENA, 2022) especifica que atualmente não é utilizado para essas aplicações além de projetos de pesquisa, desenvolvimento e demonstração.

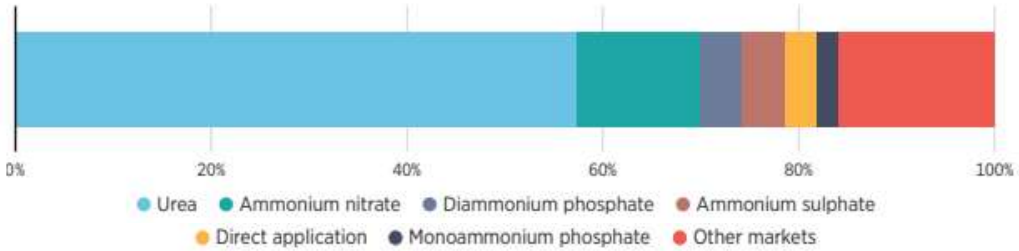
No contexto da agricultura, o uso de fertilizantes à base de amônia se acelerou

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

globalmente, aumentando a produtividade agrícola para sustentar a população em constante crescimento. Isso foi possível devido à adoção do gás natural como combustível e matéria-prima preferencial para o processo Haber-Bosch nas décadas de 1940 e 1950 (IRENA, 2022).

Nesse sentido, na figura 1 é representada a produção mundial de fertilizantes a base de amônia em porcentagem, onde se destaca a ureia ($CO(NH_2)_2$) utilizando aproximadamente 55% de toda a amônia produzida.

Figura 1. Porcentagem da produção mundial de fertilizantes nitrogenados a partir de NH_3



Fonte: IRENA, (2022).

A amônia também é considerada uma alternativa relevante como fluido refrigerante na indústria química, sendo utilizada em processos como a conservação de alimentos, o resfriamento industrial e o resfriamento de água em sistemas de ar-condicionado. Essa ampla aplicação se deve, principalmente, às suas excelentes propriedades termodinâmicas, como o alto calor latente superado apenas pela água entre os líquidos comuns, que proporciona grande eficiência de resfriamento, além de sua elevada temperatura crítica, que viabiliza o uso em equipamentos de refrigeração a ar mesmo sob altas temperaturas ambientes (Leitão, 2023).

Por sua vez, a Royal Society (2020), complementa que também se utiliza em sistemas de armazenamento de calor termoquímico, nos quais um sal metálico, produto da reação reversível da amônia, pode ser usado para armazenar e liberar calor. Com isso, a amônia além de armazenar energia significativa ao mudar entre suas formas líquida e gasosa, também pode liberar energia como fonte de calor na sua combustão, destacando seu potencial para se tornar importante na descarbonização dos processos de aquecimento e resfriamento de ambientes.

Ainda nesse contexto, Leitão (2023) traz que para avançar em direção à descarbonização dos principais setores, há uma necessidade crítica de distribuir ou armazenar energia, e a amônia é vista como uma solução promissora para esse

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

problema. Dessa forma, o seu uso como vetor energético parece ser um método adequado para o armazenamento de energia, visto a alta densidade de energia volumétrica e dadas suas condições de armazenamento em baixa pressão e temperatura.

Segundo Valera-Medina et al. (2018) a amônia tem sido proposta como combustível de transporte terrestre. Para Leitão (2023), embora vários projetos de pesquisa e desenvolvimento (P&D) estejam concentrados nessas áreas, a amônia é considerada para uso mais amplo como combustível marítimo para a navegação internacional, pois a eletrificação direta do transporte marítimo internacional não é possível devido às longas distâncias percorridas.

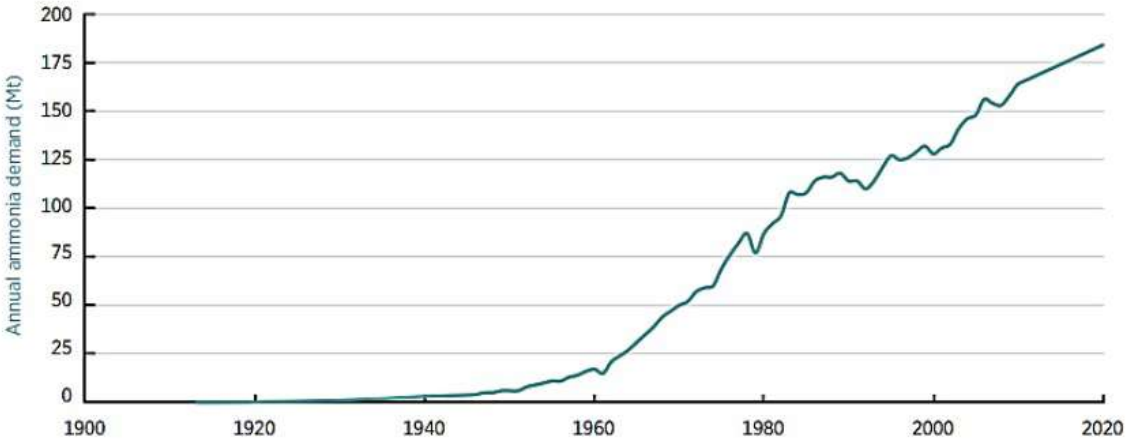
2.1.2 Mercado

Desde o término da Segunda Guerra Mundial, o mercado global de amônia tem apresentado uma tendência de crescimento contínuo, o qual pode ser apreciado na figura 2, destacando-se dois períodos de expansão significativos. O primeiro, ocorrido entre as décadas de 1960 e 1970, foi impulsionado pela expansão do processo HB, o que possibilitou o aumento da capacidade instalada para a produção de amônia. O segundo pico ocorreu entre os anos de 1990 e 2010, fortemente associado ao crescimento populacional mundial, que intensificou a demanda por alimentos e, consequentemente, por fertilizantes nitrogenados à base de amônia (Leitão, 2023).

Esta seção aborda a evolução da produção e consumo de amônia, seus principais mercados, custos de produção e a contextualização do mercado brasileiro.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

Figura 2. Gráfico de crescimento da demanda de amônia no tempo



Fonte: IRENA, (2022).

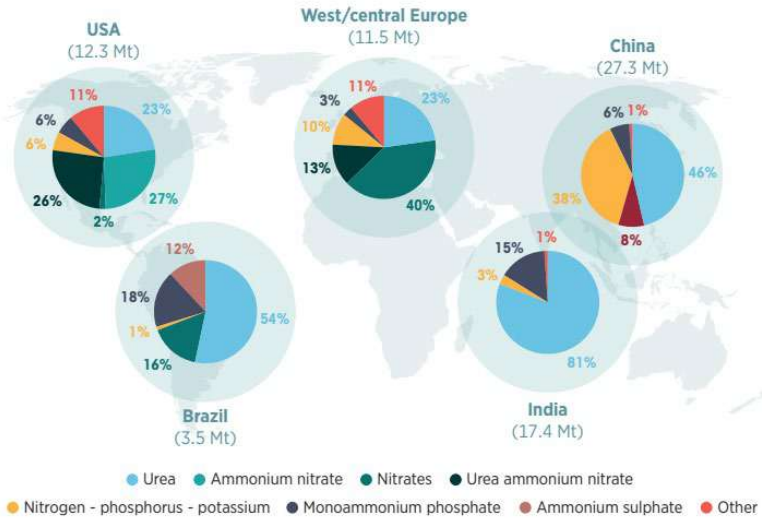
2.1.2.1 Produção e Consumo Global de Amônia

A produção global de amônia tem crescido significativamente ao longo das últimas décadas. Segundo a *International Fertilizer Association* (IFA), em 2020, a produção mundial foi de aproximadamente 183 milhões de toneladas. Nesse cenário produtivo mundial, a China se consolida como principal produtora de amônia, seguida pela Rússia e pelos Estados Unidos (IFA, 2020).

Segundo IRENA (2022), este crescimento tem sido impulsionado pela demanda do setor agrícola, que como já foi mencionado responde por cerca de 80% do consumo global de amônia na forma de fertilizantes nitrogenados. Além disso, a escolha destes fertilizantes depende muito da cultura e da localização. Por exemplo, os nitratos representam quase metade da aplicação de fertilizantes na Europa, enquanto a aplicação direta de amônia como fertilizante representa um quarto da aplicação total de fertilizantes nos Estados Unidos. Já no resto do mundo, a ureia é o fertilizante dominante. Na figura 3 pode-se apreciar que o ranking de consumo é liderado pela China, seguido pela Índia e Estados Unidos, neste sentido, a ordem é equivalente para o consumo de amônia no mundo (Leitão, 2023; Scarpetta, 2024).

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

Figura 3. Aplicação de fertilizantes nitrogenados por região e produto



Fonte: IRENA, (2022).

2.1.2.2. Custos de Produção e Tendências de Mercado

Com o avanço contínuo da população global, projeta-se que a amônia manterá sua relevância estratégica, especialmente no setor agrícola, cuja produtividade depende, em grande medida, do uso de fertilizantes nitrogenados para atender à crescente demanda alimentar (Leitão, 2023).

No mesmo contexto, IRENA (2022) propõe um cenário de 1,5°C, pelo que estima que a produção mundial de amônia deve aumentar a demanda para 223 Mt até 2030 e atingir 333 Mt até 2050. Reforçando que, este aumento constante da demanda será impulsionado principalmente pelo crescimento populacional, com a demanda por amônia para aplicações em fertilizantes em torno de 267 Mt até 2050.

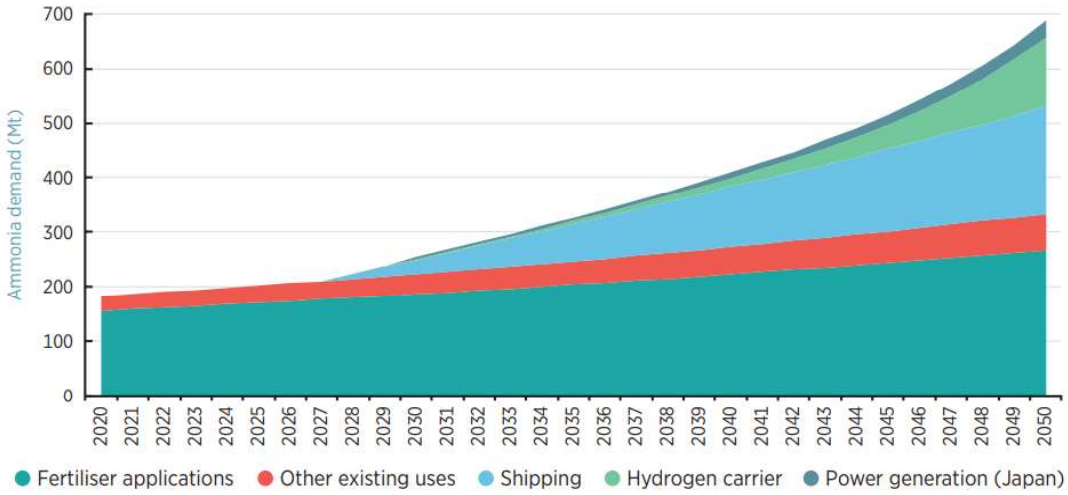
Adicionalmente, Leitão (2023) explica que no contexto dos compromissos internacionais voltados à neutralização das emissões líquidas de carbono até 2050, a amônia desponta como um vetor energético promissor, que contribui para a descarbonização de setores intensivos em energia. Nesse sentido, espera-se que novos mercados significativos se desenvolvam nas próximas décadas para a amônia como transportadora de hidrogênio, como combustível para energia e calor estacionários e como combustível para transporte, particularmente na indústria marítima (IRENA, 2022).

Ainda no mesmo cenário de projeção, representado na figura 4, estima-se que os mercados de energia podem apresentar uma taxa de crescimento

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

muito mais rápida após 2030. O que implicaria que até 2050, a demanda global por amônia alcance 688 Mt.

Figura 4. Demanda prevista de amônia até 2050 para o cenário de 1,5 °C



Fonte: IRENA (2022).

De acordo com projeções do relatório da *Market Research Future*, o mercado global de amônia foi avaliado em aproximadamente 70,88 bilhões de dólares em 2023, e deve alcançar 91 bilhões de dólares até 2035, impulsionado principalmente pela crescente demanda por fertilizantes, práticas agrícolas mais sustentáveis e aplicações industriais diversificadas. A taxa composta de crescimento anual estimada para o período de 2025 a 2035 é de 2,11%, refletindo uma trajetória de expansão moderada, porém constante. Destacam-se, nesse cenário, as oportunidades emergentes associadas à produção de amônia verde e ao seu potencial uso como portador de hidrogênio para aplicações energéticas de baixo carbono (Market Research Future, 2025).

A respeito dos custos e investimentos necessários para o processo, Telini (2021) apresenta um levantamento teórico com custos e produção em diferentes plantas: a) Bartels (2008) com custo capital variando de 72,79 a 81,53 USD/tNH_3 para uma produção de 2000 tNH_3/dia, variação decorrente do uso de sistema de captura e armazenamento de carbono (CCS – do inglês, "*Carbon Capture and Storage*"). Houve também redução no custo capital ao se elevar a produção de 1000 tNH_3/dia para 2200 tNH_3/dia, sendo que de 20 a 30% do custo total é devido ao loop de síntese de amônia; b) Appl (1999) com custo capital de 85,58 USD/tNH_3 para uma planta de 1800 tNH_3/dia; c) Já Maung *et al.* (2012) relataram custos capitais de 124 USD/tNH_3 a 86

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

USD/tNH_3 para produção na faixa de 1517,65 tNH_3/dia a 4411,77 tNH_3/dia, respectivamente.

Por outro lado, sobre o custo relacionado à Operação e Manutenção (O&M), entre plantas de pequena e larga escala, o custo foi 40 USD/tNH_3 para as primeiras e 30 USD/tNH_3 para as segundas. As plantas de pequena escala da ordem de 10-150 tNH_3/dia e as de larga escala como sendo acima de 1000 tNH_3/dia, o custo total da planta de amônia com reforma a vapor de metano variou de 400 a 600 USD/tNH_3 (Maung, *et al.*, 2012, *apud* Telini, 2021).

Cabe destacar que as estimativas apresentadas baseiam-se em referências relativamente antigas. Embora esses trabalhos ainda sejam frequentemente citados por fornecerem ordens de grandeza consistentes e úteis para comparações de escala, sua utilização representa uma limitação metodológica, já que não refletem de forma direta o cenário tecnológico e econômico atual. Ainda assim, tais dados permitem identificar tendências históricas de redução de custos com o aumento da capacidade produtiva, além de servir como referência de flutuação ao longo do tempo. Dessa forma, a análise aqui desenvolvida deve ser entendida como um ponto de partida, ressaltando-se a necessidade de incorporar em estudos futuros bases de dados mais recentes que considerem tecnologias de baixo carbono e processos renováveis.

2.1.2.3. O Mercado de Amônia no Brasil

Historicamente, a produção nacional de amônia teve seu auge entre as décadas de 1970 e 1980, com forte presença estatal no setor (Gonçalves; Ferreira; Souza, 2008). Após o processo de privatização e desestruturação das políticas públicas de fertilizantes nos anos 1990, observou-se uma queda de 30% na produção nacional nas últimas duas décadas, enquanto as importações cresceram cerca de 4,45 vezes entre 1998 e 2020 (Brasil, 2022).

Contudo, o Brasil apresenta alta dependência externa na cadeia de fertilizantes, com mais de 80% do consumo nacional sendo suprido por importações, especialmente de produtos nitrogenados. Em 2020, segundo a Associação Nacional para Difusão de Adubos (ANDA), o país produziu 224 mil toneladas de fertilizantes nitrogenados, o que correspondeu a apenas 4,3% da demanda nacional. Mesmo operando com sua capacidade instalada máxima, a produção interna supriria no máximo 17,6% da necessidade anual (Brasil, 2022).

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

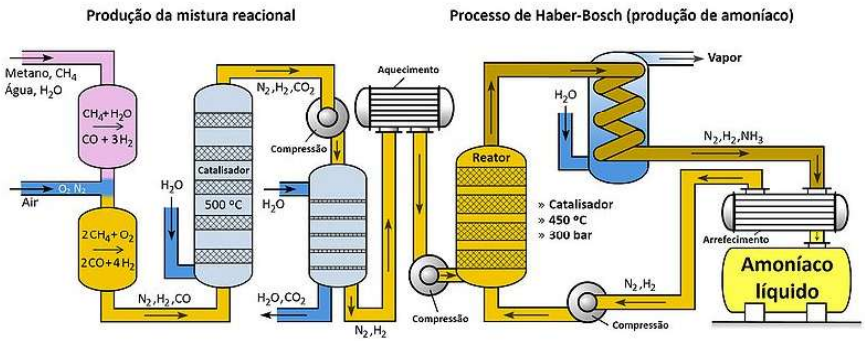
Por outro lado, ainda em 2020, a importação de fertilizantes totalizou 32.872.543 toneladas, volume 11% superior ao volume registrado no ano de 2019. Sendo assim, Rússia, China, Canadá, Marrocos, Bielorrússia, Catar, Estados Unidos, Alemanha e Holanda os dez países que lideram o ranking de maiores exportadores de fertilizantes para o Brasil (Brasil, 2022).

Em resposta a esse cenário, o governo federal lançou o Plano Nacional de Fertilizantes 2050 (PNF 2050), com o objetivo de reduzir a vulnerabilidade externa do Brasil e ampliar a capacidade produtiva interna, sobretudo de fertilizantes nitrogenados. Entre as diretrizes estratégicas do plano, destacam-se a modernização das plantas industriais, investimentos em infraestrutura logística e a inserção de novas tecnologias, como a produção de amônia verde, alinhada às metas de descarbonização e transição energética (Brasil, 2022).

2.1.3 Processo de produção da Amônia

Conforme mencionado na introdução, a produção convencional de amônia, representada na figura 5, ocorre predominantemente por meio do processo Haber-Bosch, desenvolvido por Fritz Haber e Carl Bosch no início do século XX. O processo envolve a combinação de nitrogênio (N_2) e hidrogênio (H_2) sob alta temperatura e pressão, na presença de catalisadores metálicos, para formar amônia (NH_3). Atualmente, essa rota é a principal responsável pela produção de fertilizantes nitrogenados em escala global, respondendo por aproximadamente 1,2% do consumo de energia mundial e 1,3% das emissões de CO_2 (Defrein, 2021).

Figura 5. Esquema da produção industrial de amoníaco



Fonte: Ribeiro, (2013).

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

2.1.3.1 Síntese de Hidrogênio

A principal fonte de hidrogênio no processo Haber-Bosch é a reforma a vapor do metano (*Steam Methane Reforming* – SMR). Esse processo completo envolve duas etapas reacionais principais. Inicialmente, o metano reage com vapor de água na presença de catalisadores de níquel (Equação 2), produzindo uma mistura rica em H_2 e monóxido de carbono (CO). A reação principal é altamente endotérmica e ocorre em temperaturas entre 500 e 850 °C (Leitão, 2023; Tavares; Monteiro; Mainier, 2013).

$$CH_4 + H_2O \rightleftharpoons CO + 3H_2 \qquad \Delta H = +206\ kJ/mol \qquad 1$$

$$CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2 \qquad \Delta H = -41\ kJ/mol \qquad 2$$

Após a etapa de reforma, a mistura gasosa passa por unidades de deslocamento de água – gás (*Water Gas Shift* - WGS) para conversão de CO em CO_2 e purificação do H_2 (Equação 3) (Brightling, 2018). Cerca de 72% da produção global de amônia utiliza o hidrogênio proveniente da SMR, seguida pela gaseificação de carvão (22%) e por outras fontes como nafta ou óleo combustível (6%) (Defrein, 2021). Neste sentido, menciona avanços na engenharia de reformadores, sistemas de recuperação térmica e purificação que permitiram ganhos significativos na eficiência energética do processo convencional.

2.1.3.2 Síntese de Nitrogênio

O nitrogênio necessário para o processo é extraído do ar atmosférico por destilação criogênica, tecnologia que permite separação com purezas superiores a 99,9% em grandes volumes (Leitão, 2023). Leitão também explica que, embora outras alternativas, como o sistema de permeação por membrana tenham ganhado espaço em unidades menores ou modulares, a adsorção com oscilação de pressão (*Pressure Swing Adsorption* - PSA) e o processo criogênico são os principais meios de obtenção.

Segundo Hu et al. (2018) a separação criogênica do ar é o principal método utilizado para produzir nitrogênio a partir do ar. O mesmo se baseia nas diferentes temperaturas de liquefação que cada um dos três componentes principais possui: o nitrogênio se liquefaz a -196 °C, o oxigênio a -180 °C e o argônio a -186 °C (Darabkhani *et al.*, 2023, *apud* Leitão, 2023).

Desta forma, o processo se divide em 4 estágios, iniciando com a

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

compressão do ar ambiente a aproximadamente 6 bar. Logo, no segundo estágio, passa a ser resfriado com água gelada. No terceiro estágio o ar passa por uma peneira para que algumas impurezas sejam removidas, como a umidade, o dióxido de carbono e hidrocarbonetos. No quarto estágio, o ar é resfriado até a temperatura de liquefação e alimentado a uma coluna de alta pressão, onde o nitrogênio é coletado na parte superior e o oxigênio na parte inferior, devido à diferença na volatilidade de cada componente (Leitão, 2023; Salgari, 2024).

2.1.3.3 Síntese da Amônia

Após a obtenção do hidrogênio e nitrogênio, o último passo para a produção de amônia é o processo Haber-Bosch. Esta é uma reação exotérmica e reversível, favorecida por altas pressões, em torno de 100 a 300 bar e temperaturas elevadas, aproximadamente 400 a 500 °C. A reação é realizada na presença de um catalisador, geralmente à base de ferro promovido com óxidos de potássio e alumínio, o que é essencial para acelerar a reação sem deslocar o equilíbrio negativamente (Defrein, 2021).

Leitão (2023) afirma que o método começa com a mistura de nitrogênio e hidrogênio na proporção de 3:1, de acordo com a equação *4*. Os mesmos, são então comprimidos a condições de alta pressão, exigindo resfriamento entre os estágios, pois a compressão não pode ser realizada em um único estágio.

$$3H_2 + N_2 \rightleftharpoons 2NH_3 \qquad \Delta H = -92,4\ kj/mol \qquad 3$$

Posteriormente, a mistura é aquecida a 350-500°C e alimentada no reator, onde se forma amônia, com uma taxa de conversão de cerca de 15%. Dada a sua baixa conversão, há necessidade de um sistema de recirculação dos reagentes, realizada após separação da amônia produzida. A separação da amônia é feita por condensação criogênica, aproveitando a grande diferença da sua temperatura de liquefação de aproximadamente 25-35 ºC (Leitão, 2023; Murta, 2023).

Como essa reação é favorecida em temperaturas elevadas, torna-se essencial, ainda, utilizar um catalisador que não apenas reduza o tempo de permanência no reator, mas também diminua a energia de ativação, permitindo que a reação ocorra em temperaturas mais baixas com boas taxas de conversão. Embora os óxidos de ferro sejam os catalisadores mais utilizados, compostos à base de rutênio vêm ganhando destaque recentemente como alternativas promissoras para aprimorar a eficiência catalítica do processo (Dorado, 2022).

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

2.1.4 Armazenamento e transporte da amônia

A amônia é uma substância que, devido ao seu amplo uso industrial e agrícola, já possui tecnologias consolidadas para seu manuseio, armazenamento, transporte e distribuição. Há décadas ela é manipulada em grandes quantidades, com suporte de regulamentações específicas, normas da indústria e treinamentos voltados à segurança operacional (IRENA, 2022).

Bem como explica Leitão (2023), a amônia é normalmente armazenada na fase líquida, geralmente à pressão atmosférica e a temperaturas criogênicas, em torno de -33 °C, o que é mais adequado para grandes capacidades. O autor argumenta também que para armazená-la à temperatura ambiente, é necessário aumentar bastante a pressão, em até 18 bar, embora isso só funcione para capacidades menores. Outra forma de armazenamento pode ser por meio de absorventes, como halogenetos metálicos. Esse método proporciona mais segurança ao processo, uma vez que a amônia só pode ser dessorvida com o aumento da temperatura ou a redução da pressão, o que pode ser facilmente controlado. No entanto, esse método de armazenamento foi desenvolvido recentemente e apenas cerca de 5 a 10 % em peso de amônia pode ser armazenado em $CaCl_2/SiO_2$ (Leitão, 2023).

Em relação ao transporte, existe uma infraestrutura estabelecida e robusta para distribuir amônia em todo o mundo, principalmente por meio de portos, dutos e instalações de armazenamento. Atualmente, entre 25 e 30 milhões de toneladas de amônia são transportadas anualmente, onde o transporte marítimo representa a maior parte, com cerca de 18 a 20 Mt por ano, utilizando uma frota de aproximadamente 170 navios (IRENA, 2022). Na os portos de carga e descarga da amônia movida via marítima.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

Figura 6. Infraestrutura de transporte de amônia, portos de carga e descarga de amônia

Fonte: (IRENA, 2022).

De acordo com IRENA (2022), o transporte por dutos também é significativo, mencionando que nos Estados Unidos, 1,5 Mt de amônia é transportada anualmente por 3.220 km de gasodutos. No mesmo contexto, Leitão (2023) afirma que a Rússia possui o maior gasoduto de amônia do mundo, com quase 3.500 km atravessando até a Ucrânia, com capacidade para transportar de 3 a 5 Mt de amônia anualmente. Além disso, menciona que na Europa seu principal meio de distribuição é por ferrovias, totalizando 1,5 Mt anualmente.

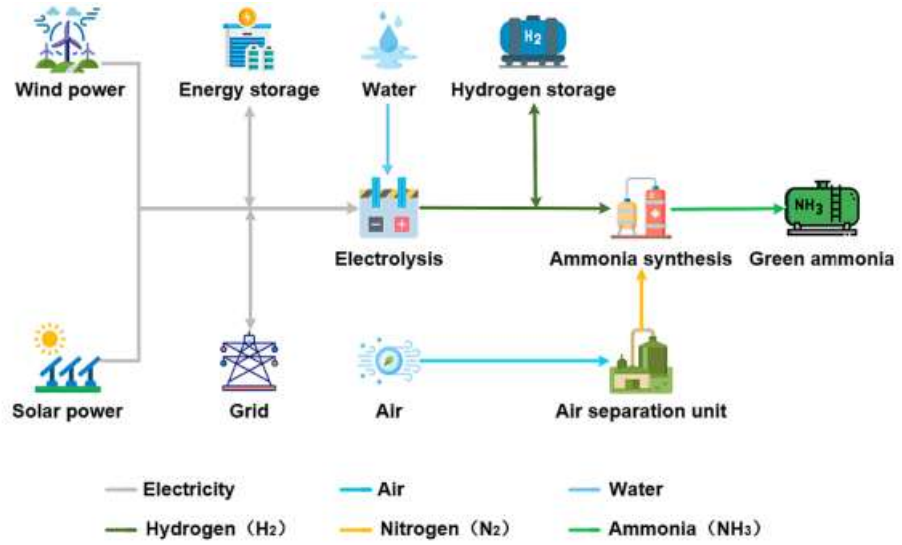
2.2 AMÔNIA RENOVÁVEL

A amônia renovável é produzida sem o uso de fontes fósseis, substituindo a etapa de reforma do gás natural pela reforma do biogás ou a eletrólise da água, para a obtenção do hidrogênio, e proveniente de uma fonte de energia renovável. Essa abordagem permite a diminuição e/ou eliminação das emissões diretas de CO_2, contribuindo para os esforços globais de descarbonização industrial (Leitão, 2023; Defrein, 2021).

Partindo do hidrogênio renovável, como pode ser visto no esquema da Figura 7, o processo mantém a mesma reação química do processo Haber-Bosch, porém com insumos e fontes energéticas alternativas. IRENA (2022) afirma que a amônia renovável é produzida em escala comercial desde 1921, no entanto, menos de 0,02 Mt de amônia renovável foi produzida em 2021.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

Figura 7. Esquema da produção industrial de amoníaco renovável.



Fonte: Wu et al., (2024).

2.2.1 Hidrogênio Renovável

O hidrogênio renovável pode ser obtido a partir da eletrólise da água (Dorado, 2022; Leitão; Guerra, 2023), como a eletrólise alcalina (AWE), eletrólise de membrana de troca de prótons (PEM) e eletrólise de óxido sólido (SOEC) (Grela, 2023) ou também a partir da reforma do biometano (Dos Santos, 2022; Bárcia, 2023; Scarpetta, 2024), como a reforma a seco (Hajizadeh, 2022; Crispim, 2023; Scarpetta, 2024) ou reforma a vapor (Ciuchi, 2019; Bárcia; Crispim, 2023).

Com relação a eletrólise da água, a eletrólise alcalina é o processo mais desenvolvido, o que torna a sua implementação bastante comum em todas as escalas. Além disso, a maturidade de sua tecnologia é ligeiramente superior à PEM, e muito superior à SOEC (Grela, 2023).

Grela (2023) compara estes três métodos no Quadro 1, onde destaca-se que, para a célula AWE o capital de investimento é notavelmente inferior ao restante. Com isso, afirma que a implantação de eletrolisadores alcalinos para produzir hidrogênio é a mais atraente, uma vez que os materiais e eletrodos são mais acessíveis e apresentam uma vida média bastante longa. Além disso, a eletrólise alcalina é mais simples em termos de projeto e operações, devido ao custo que ela representa em relação aos eletrolisadores PEM e SOEC, somado ao número de horas em funcionamento, obtendo hidrogênio com purezas de 99,99% (Grela, 2023).

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

Quadro 1. Comparação entre os eletrolisadores

	AWE	PEM	SOEC
Ion	OH^-	H^+	O^{2-}
Eletrólito	KOH/NaOH	Membrana polimérica (PFSA)	Zirconio estabilizado con itria (YSZ)
Anodo	Ni	IrO_2	Perovskita: La/Sr/MnO (LSM) o La/Sr/Co/FeO (LSCF)
Catodo	Ligas de níquel (Ni, Co, Fe)	Pt/C	Ni - YSZ
Eficiências	59-70%	65-82%	89%
Pureza H_2	99,99%	99,99%	99,99%
Vida média	60.000 horas	50.000-80.000 horas	<20.000 horas
Voltagem	1,4 – 3 V	1,4 – 2,5 V	1,0 – 1,5 V
Partida	<50 minutos	<20 minutos	>600 minutos
Densidade de corrente nominal	0,2 – 0,8 A/cm²	1 – 2 A/cm²	0,3 – 1 A/cm²
Capital de custo para 1MW (2020)	USD 270/kW	USD 400/kW	>USD 2000/kW

Fonte: Adaptado a partir de (Grela, 2023).

No caso da reação de reforma do metano, Scarpetta (2024) destaca a vantagem da reforma a seco, apresenta na Equação 5. De acordo com a autora, nessa reação, os principais constituintes do biogás (CH_4 e CO_2), reagem para a formação de gás de síntese, excluindo o vapor de água como correagente. Esta rota, também pode ser complementada por um segundo reator para o deslocamento água – gás (WGS) aplicada na reforma a vapor do metano (Scarpetta, 2024; Crispim, 2023).

$$CO_2 + CH_4 \rightleftharpoons 2CO + 2H_2 \qquad \Delta H = +247\ kj/mol \qquad 4$$

2.2.2 Captura de Carbono

Mesmo obtido de uma fonte renovável, a reforma a vapor do biometano segue os mesmos princípios termoquímicos da reforma do gás natural, com a formação de CO e CO_2 como subprodutos das reações de reforma e deslocamento WGS, respectivamente. Assim, a integração com tecnologias de captura de carbono é fundamental para garantir que o processo seja alinhado com os objetivos de emissões líquidas zero.

Nesse sentido, o uso de biometano reforça o potencial de uma economia circular, ao reaproveitar resíduos orgânicos para geração de energia e combustíveis limpos (Defrein, 2021; Scarpetta, 2024). No entanto, sem a captura de CO_2, esse ciclo não se fecha completamente do ponto de vista climático.

Por esse motivo o processo pode ser combinado com diferentes tecnologias de captura de carbono, sendo as principais a absorção química com

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

monoetanolamina (MEA) e a adsorção por variação de vácuo (VSA). A primeira é especialmente eficaz após o segundo estágio de reforma e deslocamento WGS, onde as concentrações de CO_2 são elevadas e a pressão é favorável à eficiência do solvente. Mencionando que é uma opção tecnicamente madura, com taxas de captura superiores a 90%. Já a segunda opção, pode ser aplicada a fluxos gasosos mais diluídos em CO_2, indicando que a eficiência é inferior à da MEA, porém com menor penalidade energética (Ciuchi, 2019).

2.3 ASPEN PLUS®

O Aspen Plus® é um software de simulação de processos utilizado amplamente na engenharia química para modelar, analisar e otimizar sistemas industriais complexos. Ele permite representar uma planta química completa em estado estacionário, desde as etapas iniciais de alimentação até os produtos finais, por meio de fluxogramas que interconectam operações unitárias, correntes de materiais e energias (Al-Malah, 2017). Desenvolvido pela empresa *Aspen Technology*, o software oferece ao engenheiro químico a capacidade de realizar simulações rigorosas com base em balanços de massa e energia, equações de equilíbrio termodinâmico, cinética de reação, propriedades físicas e parâmetros operacionais dos equipamentos.

A utilização destaca-se durante as etapas de concepção, projeto, análise de viabilidade econômica e otimização de processos industriais. Por esse lado, é possível simular sistemas com reciclo, múltiplas reações e condições operacionais variadas, com rapidez e confiabilidade devido a operação de forma modular e sequencial do mesmo; o que significa que cada equipamento de processo é representado por um modelo matemático específico (por exemplo, reatores, colunas de destilação, trocadores de calor, etc.), e os dados são processados em sequência conforme o fluxo do processo (Adams, 2018).

No presente trabalho, o Aspen Plus® será utilizado como principal ferramenta de simulação para modelar os processos descritos para a obtenção da amônia. Com o mesmo, será possível representar detalhadamente as etapas do processo permitindo a obtenção de dados quantitativos relevantes, como conversões, rendimentos, consumo energético e possíveis perdas. Esta escolha justifica-se pela robustez e confiabilidade que proporciona, bem como pela sua ampla base de dados físico-químicos e modelos termodinâmicos, que tornam a simulação mais precisa.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

Além disso, o software possibilita a realização de análises de sensibilidade e otimização, fundamentais para investigar diferentes condições operacionais e aprimorar o desempenho do processo estudado (Al-alah, 2017; Adams, 2018).

2.4 TRABALHOS SIMILARES

Diferentes trabalhos baseados na produção de amônia de baixo carbono tem sido desenvolvido em Aspen Plus® e Aspen *Hysys*, principalmente, pesquisas baseadas na análise comparativa de diferentes configurações do processo produtivo, cobrindo desde plantas de pequena escala até modelos industriais integrados com ciclos de energia e tecnologias emergentes. No quadro 2 são apresentados uma compilação de trabalhos que servem como modelo para o TCC.

Quadro 2. Comparativo dos resultados das Simulações

Autor	Simulador	Rota Tecnológica	Produção	Eficiência Energética	Destaques
Grela (2023)	Aspen Plus®	Membrana + Eletrólise + HB	25 kg/h	Energia renovável	Projeto modular flutuante
Rico (2020)	Aspen HYSYS v9	Reatores adiabáticos em série	~22 t/h	Conversão: 30%	Injeção de alimentação fria vs refrigeração
Murta (2023)	Aspen Plus® v12.0	Gaseificação de RSU	48,4 t/h	48% com reciclo	Simulação com ureia
Leitão (2023)	Aspen Plus® + Energy	Eletrólise + HB / AE-HB	178–191 kt/ano	14,4–35 GJ/t	Integração reduz consumo em 28%
Amin *et al.* (2013)	Aspen HYSYS v7.1	Reformado de CH_4	46.000 kmol/h	Aumenta com pressão	Processo clássico de referência
Byun *et al.* (2022)	Aspen Plus®	HB + Ciclo Allam	2–150 t/h	Redução CO_2: até 96%	Rentável a partir de 5 t/h
Kappagantula et al. (2024)	Aspen Plus®	Loop químico com 3 reatores	-	21,5 GJ/t (≥67,5% conversão)	Melhor SPECCA que HB convencional
Cameli *et al.* (2023)	Aspen Plus®	H_2 verde + separação criogênica	-	LCOP 65% acima	Viável com energia <12,5 USD/MWh
Jesus *et al.* (2024)	Aspen Plus®	Reator adiabático + energia renovável	-	-	Conclusões compatíveis com TRCL e Leitão
Hera et al., (2024)	Aspen Plus®	Planta flexível com eletrólise e tanques	-	Flexibilidade energética	Equilíbrio entre produção e variabilidade da energia renovável

Fonte: Elaboração própria a partir de Grela (2023); Rico (2020); Murta (2023); Leitão (2023); Amin *et al.* (2013); Byun *et al.* (2022); Kappagantula et al. (2024); Cameli et al. (2023); Jesus *et al.,* (2024); Hera

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

et al., (2024)

Por exemplo, Amin *et al.* (2013) utilizou a versão 7.1 do Aspen *Hysys*, para a simulação do processo HB convencional com gás natural. Nesse trabalho, a partir de 107.000 kmol/h de metano, 280.000 kmol/h de hidrogênio e 102.000 kmol/h de nitrogênio, foi produzido 46.000 kmol/h de amônia. Além disso, os autores também observaram que a produção de amônia aumentou com o aumento da pressão da alimentação fresca.

Rico (2020) utilizou o Aspen Hysys, versão 9, para uma comparação entre reatores adiabáticos, um com refrigeração intermediária e o outro com injeção de alimentação fria. Além disso, este trabalho também apresenta uma análise que combina critérios econômicos, ambientais e de segurança para a gestão e otimização de uma planta de processamento. Os resultados mostram que, por meio de uma integração energética eficiente, é possível reduzir significativamente as emissões de CO_2, diminuir os riscos de acidentes perigosos e melhorar a rentabilidade do processo, tudo isso enquadrado em um estudo preventivo e de melhoria para uma planta em operação.

Por outro lado, Jesus *et al*. (2019) simulou a síntese de amônia empregando duas rotas tecnológicas, uma com reciclo e outra sem, para posteriormente realizar uma análise de sensibilidade e avaliações ambientais. A simulação do processo foi modelada através do software Aspen Plus® v.8.6, nas condições operacionais pressão de 279 bar, temperatura igual a 482 ºC e uma alimentação de 1732 kmol/h de N_2; 5160 kmol/h de H_2; 72 kmol/h de CH_4; com a taxa de conversão de 40%. Os resultados mostraram que o sistema com corrente de reciclo apresentou maior eficiência na taxa de produção de NH_3 e menor impacto ao meio ambiente devido ao maior aproveitamento de N_2 e H_2.

Byun *et* al (2022) abordam o desafio de descarbonizar o processo HB inovando na integração conceitual do processo com um ciclo de energia de CO_2 supercrítico, transformando assim as emissões de CO_2 gasoso em um subproduto na forma de CO_2 líquido. O projeto detalhado do processo e a simulação do fluxograma usando o Aspen Plus® foram usados como base para a avaliação de escala e técnico-econômica de dois casos. Os resultados indicaram que, utilizando este projeto de processo, a produção de NH_3 atingiu rentabilidade em escalas superiores a 2 t/h a 5,4 t/h e, além disso, essa integração de processos alcança uma redução significativa nas emissões de CO_2 gasoso, em comparação com o processo HB convencional, de 68 %

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

a 96 %, o que indica um grande potencial para NH_3 renovável economicamente viável.

Ainda em pequenas escalas, Grela (2023) apresenta a simulação realizada em Aspen Plus® de uma planta de NH_3 , comparando rotas para a obtenção de H_2 e N_2 a partir da água do mar e do ar, com o objetivo de obter uma pureza de 98% e capacidade de produção de 25 kg/h. Os processos analisados foram a eletrólise alcalina e o processo de permeação por membrana. A produção final passa pela síntese HB, onde na simulação obteve-se um fluxo de 25 kg/h de NH_3 com uma pureza de 99,94%, superior à pureza estabelecida.

A eletrólise alcalina também foi avaliada no trabalho de Leitão (2023). O estudo descreve as simulações de um processo HB convencional e um processo HB com a utilização de absorvente (AE-HB) para produzir amoníaco verde. Ambas as simulações foram desenvolvidas em três partes: a síntese de H_2, por eletrólise da água; a produção de N_2, em uma unidade de separação de ar criogênica; e a síntese de NH_3. As simulações foram desenvolvidas no software Aspen Plus®, utilizando um modelo personalizado do Aspen para o eletrolisador e a análise energética foi realizada com o Aspen Energy Analyzer. O processo HB foi considerado viável, com uma produção anual de 191 kt com 99,7 % de pureza. Por outro lado, o processo AE-HB revelou-se ineficiente, alcançando apenas uma produção anual de 178 kt com 90,5 % de pureza. No que diz a respeito da análise energética, o eletrolisador foi responsável pela maioria das despesas energéticas do processo, com um consumo de 31,5 GJ/t NH_3. No reator de síntese de amoníaco, o processo HB utilizou 14,4 GJ/t NH_3, enquanto o processo AE-HB utilizou 35,0 GJ/t NH_3. A unidade de separação de ar representou o menor consumo de energia, com 0,5 GJ/t NH_3. Além disso, foi efetuada integração energética para a seção de síntese de amoníaco, que provou ser eficaz, reduzindo as despesas energéticas em 28 % para o processo HB e em 17 % para a simulação AE-HB.

Da mesma forma, a combinação eletrólise + separação criogênica foi avaliada por Cameli *et al*. (2023), onde dois cenários temporais foram simulados para o processo elétrico, 2019 e 2050, estes comparados com o processo convencional de última geração. O software Aspen Plus® foi empregado para projetar e avaliar o desempenho da planta de NH_3 eletrificada, onde o fornecimento de matéria-prima vem da eletrólise da água PEM e da destilação criogênica do ar. Essa configuração eletrificada alimentada por energia eólica proporciona emissões de carbono 80%

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

menores do que o processo convencional baseado em SMR. No entanto, a unidade eletrolisadora pode representar entre 36 e 61% do custo total de capital, dependendo de sua eficiência energética. Além disso, a alta demanda de energia eleva o custo da eletricidade, que representa mais de 68% dos custos operacionais da planta. Assim, mesmo com as melhorias previstas na eficiência da unidade eletrolisadora, o custo nivelado e produção (LCOP) do NH_3 em um cenário de 2050 é 65% mais alto do que a referência atual; no entanto, os dois processos poderiam ser igualmente viáveis com uma penalidade de carbono de 135,8 USD/tCO_2 no processo convencional médio.

Hera *et al.* (2024) analisam uma planta flexível de NH_3 em pequena escala considerando as três etapas; desde a produção de N_2 em uma unidade de membrana; a geração de H_2 no eletrolisador alcalino; até a síntese de NH_3 pelo processo HB com catalisador à base de ferro, visando analisar as condições operacionais da planta. As simulações do Aspen Plus® foram realizadas usando unidades eletrolisadoras alcalinas com três capacidades diferentes: 1 MW, 5 MW e 10 MW. Primeiramente, foi estudada a influência da pressão e da temperatura do eletrolisador no consumo de energia. Os resultados da simulação indicaram que uma pressão de 30 bar e temperatura de 60 ºC são as melhores condições. Posteriormente, a influência do número de reatores e da pressão nos reatores de síntese de NH_3 foi analisada com base na conversão da amônia e no consumo mínimo de energia. Os resultados mostraram que uma configuração de dois reatores e uma pressão de trabalho entre 205 e 250 bar foi a mais eficiente. Contudo, os resultados também mostram que a eletrólise alcalina foi notavelmente responsável pela maior parte do consumo de energia, seguida pelo ciclo de síntese de NH_3, enquanto a energia para a obtenção de N_2 é insignificante.

Uma simulação com abordagem tecnológica diferenciada para a produção da amônia é encontrada em Kappagantula *et al.* (2024). Este estudo utiliza simulações Aspen Plus® para explorar o desempenho de um novo fluxograma para a produção de amônia utilizando a tecnologia *Three Reactor Chemical Looping* (TRCL). Na TRCL, o transportador de oxigênio sólido circula continuamente entre um reator de combustível, um reator de vapor e um reator de ar. Este oxigênio então é reduzido no reator de combustível e é oxidado nos reatores de vapor e ar. O hidrogênio gerado no reator de vapor e o nitrogênio produzido no reator de ar formam um gás de síntese que é convertido em amônia. Os indicadores energéticos e ambientais foram

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

avaliados, comparando o processo TRCL com o processo convencional de síntese de amônia e um processo pseudo-contínuo de reformação por looping químico (CLR) que utiliza leitos empacotados. Verificou-se que a energia consumida no processo TRCL foi superior à energia consumido nos outros dois processos, isso devido ao maior consumo de vapor no reator a vapor para gerar hidrogênio. No entanto, se for possível alcançar uma conversão no reator a vapor superior a 67,5%, os indicadores de desempenho energético são comparáveis aos dos processos convencionais e CLR. Com uma conversão de 67,5%, o consumo específico de energia passa a ser de 21,5 GJ/tNH_3.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

3 METODOLOGIA

A presente pesquisa foi desenvolvida com base em uma abordagem de modelagem computacional, por meio da simulação do processo de produção de amônia renovável utilizando o software Aspen Plus® V14.0, uma ferramenta bastante aplicada na engenharia de processos para modelar, simular e otimizar plantas industriais.

3.1 Etapas da Metodologia

A metodologia foi dividida em quatro etapas principais:

i) Levantamento bibliográfico:

Revisão da literatura técnica e científica sobre a produção de amônia, contextualizando as fontes, aplicações e mercado. Com foco nos processos de reforma de metano já industrializado com perspectivas no aproveitamento do biometano para geração de amônia renovável, além da separação de nitrogênio do ar e a síntese de amônia via processo Haber-Bosch.

ii) Definição do fluxograma de processo:
Com base em dados da literatura da seção 2.2.4, foi elaborado um fluxograma no Aspen Plus®, contemplando as etapas de produção de hidrogênio; separação de nitrogênio do ar; compressão e aquecimento dos reagentes; síntese da amônia; separação do produto final e reciclo de reagentes não convertidos.

iii) Processo de simulação Aspen Plus®:
Foram definidos os parâmetros de entrada como a temperatura de reação; pressão de operação; a razão molar da alimentação; eficiência do sistema de separação; conversão na síntese. Além destes parâmetros, também foram definidos os componentes (H_2, N_2, NH_3, H_2O, CO_2, CO, MEA), e o pacote termodinâmico utilizado foi o Peng-Robinson, por ser mais adequado para sistemas de alta pressão contendo gases não ideais.

iv) Análise dos resultados:
Variáveis como as vazões molares e mássicas dos componentes em cada corrente; a conversão e rendimento da reação; a eficiência energética do processo, foram analisadas e realizado o teste de

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

sensibilidade.

3.2 Simulação no Aspen Plus®

A estrutura metodológica das simulações foi inspirada em estudos prévios como os de Grela (2022), Leitão (2023), Ciuchi (2022) e Jesus *et al.* (2023), sendo dividida em três etapas principais: (i) produção de hidrogênio por reforma a vapor, (ii) separação criogênica do nitrogênio e (iii) síntese do amoníaco.

3.2.1 Reforma a vapor do biometano

A simulação do processo de reforma a vapor (Figura 8) foi baseada principalmente no trabalho de Ciuchi (2022), com adaptações no modelo de alimentação e aquecimento.

A alimentação considerada foi o biometano, com composição de 97% molar de CH_4 e 3% de CO_2, pressurizado até 25 bar por meio de um compressor. A água utilizada na geração de vapor foi alimentada em condições ambientais (25 °C e 1 atm), pressurizada por uma bomba até 25 bar e pré-aquecida em trocadores de calor contra as correntes de gases quentes provenientes do processo.

Após o pré-aquecimento, a água alimenta uma caldeira simulada (TC-1), que gera vapor a 468 °C. A mistura entre o vapor e o biometano é realizada em um bloco MIX e, em seguida, a corrente mista é novamente aquecida por meio de um trocador de calor (THX-1) para alcançar a temperatura de entrada do reator principal.

A reação de reforma é modelada por um reator de equilíbrio (SMR), operando a 800 °C e 24 bar, considerando uma perda de pressão de 1 bar em relação à entrada. As reações envolvidas são Equação 2 para o SMR e a Equação 3 para o WGS. A corrente de saída do reator passa novamente por trocadores de calor (THX-1 e THX-2) integrados ao sistema, sendo resfriada gradualmente até 350 °C, onde alimenta um segundo reator de equilíbrio simulando a etapa de WGS de alta temperatura (WGS-H). Este reator opera a 350 °C e 23 bar, considerando a reação WGS (Equação *3*) como única transformação química. Após nova etapa de troca térmica (THX-3), a corrente é resfriada a 200 °C, alimentando um terceiro reator de equilíbrio que simula a etapa de WGS de baixa temperatura (WGS-L), operando a 200 °C e 22 bar. Essa configuração permitiu maximizar a conversão do CH_4 em H_2, conforme observado na literatura.

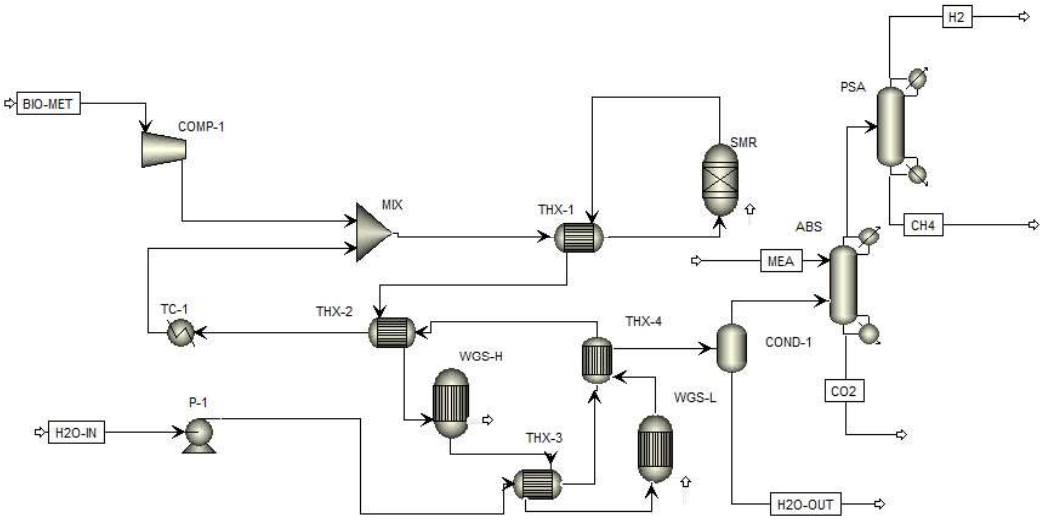
A separação dos produtos da reação também foi realizada em três etapas. Primeiramente a corrente quente foi resfriada até 35ºC (THX-4) e

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

encaminhada para a etapa de condensacão onde o total da umidade foi removida em estado líquido, por um separador flash (COND-1) a 35ºC e 22 bar que simula um condensador. Para a remoção do CO_2 foi utilizado um separador (ABS) com uma entrada adicional de MEA, configurado para remover 100% do CO_2 dissolvido, simulando um processo de absorção. Finalmente, por meio de outro separador (PSA), foi simulando um sistema PSA, com pureza final de 99,99% de H_2.

Embora Ciuchi (2022) tenha utilizado uma abordagem mais detalhada para as separações físicas e químicas, neste trabalho optou-se por representações simplificadas a fim de manter o foco no desempenho do processo global. Os dados de pureza e remoção utilizados foram baseados nos valores reportados por aquele autor, de forma a assegurar a viabilidade técnica da rota proposta.

Figura 8. Simulação da reforma a vapor do biometano



Fonte: elaboração própria.

3.2.2 Separação criogênica do N_2

A segunda etapa da simulação consiste na separação do nitrogênio presente no ar atmosférico, por meio de um processo de destilação criogênica (Figura 9), baseado na abordagem metodológica apresentada por Leitão (2023). Essa técnica permite a obtenção de N_2 de alta pureza, amplamente utilizado na etapa subsequente de síntese do amoníaco.

Inicialmente, o ar atmosférico é comprimido a 2,5 bar por meio de um compressor (COMP-01). Em seguida, é resfriado por um trocador de calor (TC-01) até a temperatura ambiente e então sofre nova compressão com o COMP-02 até atingir 6 bar. Após essa segunda compressão, o ar é novamente resfriado (TC-02) até a

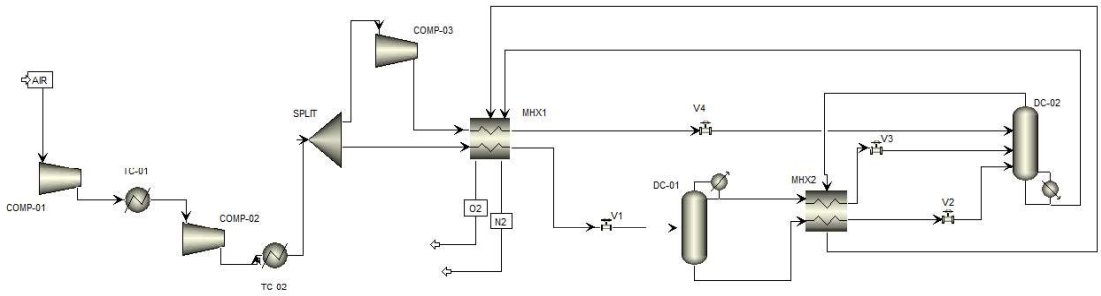
Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

temperatura ambiente. Em seguida, uma fração de aproximadamente 15% do fluxo de ar é desviada e submetida a uma compressão adicional, enquanto os 85% restantes seguem diretamente para um trocador de calor múltiplo (MHX1), que tem a função de realizar a integração térmica do sistema. Nesse trocador, ambas as correntes são resfriadas até atingirem temperaturas criogênicas adequadas à separação dos gases constituintes do ar.

As duas correntes passam então por válvulas de expansão, que aliviam a pressão, permitindo a condensação parcial dos componentes. Uma das correntes alimenta uma coluna de destilação criogênica (DC-01), operando a cerca de -174 °C e 5,5 bar, onde se inicia a separação efetiva entre N_2, O_2 e Ar. As correntes de saída dessa coluna passam por outro trocador de calor múltiplo (MHX2), auxiliando no pré-resfriamento das correntes de entrada. Posteriormente, são controladas por válvulas de expansão e realimentadas ao sistema junto com a corrente previamente desviada, direcionando esse fluxo combinado para uma segunda coluna de destilação criogênica (DC-02), operando a aproximadamente -190 °C.

Essa configuração permite uma separação mais eficiente do nitrogênio, garantindo a obtenção de uma corrente com alta pureza de N_2. Por fim, todas as correntes de produto passam novamente pelos trocadores de calor anteriores, onde são aquecidas progressivamente, tornando-se adequadas para uso posterior na etapa de síntese do amoníaco.

Figura 9. Simulação da ASU por destilação criogênica



Fonte: elaboração própria.

3.2.3 Sintese da NH_3

A terceira e última etapa do processo consiste na síntese do amoníaco a partir do hidrogênio e do nitrogênio produzidos nas etapas anteriores. A simulação da figura 10 foi inspirada na configuração apresentada por Grela (2022), com

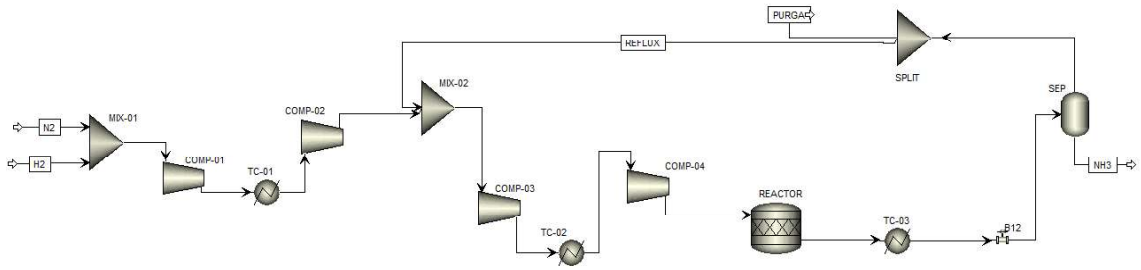
Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

adaptações baseadas em Jesus *et al*. (2023) para o uso de refluxo como forma de aumentar a conversão.

Inicialmente, os gases de alimentação são misturados no MIX-01, formando uma corrente que segue para um compressor (COMP-01), onde é pressurizada a 4 bar. Após a compressão, a corrente é resfriada a 30 °C no trocador TC-01 e então comprimida novamente até atingir 15 bar. Em seguida, essa corrente passa por um segundo MIX-02, onde é misturada com o refluxo do processo, técnica verificada em Jesus *et al.* (2023) para melhorar o desempenho da reação. Além de contribuir para o aumento da conversão de amônia, a adição do refluxo também ajuda a reduzir a temperatura da mistura. Esta mistura final passa por uma série de compressores e trocadores de calor, sendo gradualmente comprimida até 160 bar e aquecida até 450 °C, condições típicas do processo Haber-Bosch.

Nessas condições, a reação principal (Equação 4), ocorre em um reator estequiométrico (REACTOR). Em seguida, a corrente de saída passa por um trocador de calor adicional para resfriamento, seguindo para uma válvula de expansão, que reduz a pressão do sistema. A corrente então alimenta um separador tipo Flash, operando a aproximadamente -27 °C, simulando a separação criogênica da amônia. Nessa etapa, é obtida uma corrente com 99,95% de pureza em NH_3, e uma corrente gasosa composta principalmente por H_2 e N_2 não convertidos. Essa corrente gasosa segue para um bloco Split, onde 15% do fluxo é purgado, e os 85% restantes são recirculados ao sistema como refluxo.

Figura 10. Simulação do processo de síntese de NH3.



Fonte: elaboração própria.

Dessa forma, a metodologia adotada neste trabalho permitiu a simulação integrada de um sistema completo para produção de amônia, organizada em três etapas interligadas. Além disso, todas as etapas foram simuladas no software Aspen Plus® v14, com base em parâmetros e condições descritas na literatura

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

científica recente. As configurações adotadas, embora simplificadas em alguns pontos, foram suficientes para representar o comportamento dos processos principais e gerar dados técnicos relevantes para a análise de viabilidade do sistema integrado de produção de amônia.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

4 RESULTADO E DISCUSÕES

Neste capítulo, são apresentados os resultados obtidos a partir das simulações realizadas.

Inicia-se com a simulação da reforma a vapor do biometano. A partir do trabalho de Scarpetta (2024), foi considerada uma alimentação de 2 kmol/h de biometano, com uma conversão estimada do biogás (com 60% de metano) de Nm³ para kg. Considerou-se um biometano de alta pureza, e não foram detalhadas as etapas de purificação do biogás, visto que não constituem o foco deste trabalho e já se encontram mais estabelecidas na literatura técnica e prática industrial.

Os fluxos de entrada e saída para cada reator estão detalhados na tabela 1; onde a primeira alimentação na entrada do SMR está composta pelo biometano e a água de entrada, já a corrente de saída do reformador tem a mesma composição da entrada pro reator de deslocamento a altas temperaturas e nessa sequência a corrente de saída deste último será a corrente de entrada do deslocador a baixas temperaturas, obtendo como corrente de produto final a saída do WGS-L.

Tabela 1. Composição dos fluxos de entrada e saída de cada reator para a produção de H_2

	Biometano		Água de entrada		Saída SMR		Saída WGS-H		Saída WGS-L	
	kg/h	kmol/h	kg/h	kmol/h	kg/h	kmol/h	kg/h	kmol/h	kg/h	kmol/h
CH_4	31,12	1,940	-	-	2,807	0,175	2,807	0,175	2,807	0,175
H_2	-	-	-	-	12,882	6,390	14,106	6,997	14,220	7,054
CO	-	-	-	-	18,760	0,669	1,759	0,063	0,173	0,006
CO_2	2,641	0,060	-	-	50,844	1,155	77,555	1,762	80,047	1,819
H_2O	-	-	234,199	13,000	182,669	10,140	171,735	9,533	170,715	9,476

Fonte: elaboração própria.

A partir da alimentação, a corrente de entrada para o reator SMR foi composta majoritariamente por vapor de água e metano, apresentando uma razão molar H_2O/CH_4 bem superior a 4, valor recomendado para evitar deposição de carbono no reator e garantir uma boa conversão. Na saída do reator de reforma, observou-se uma produção significativa de hidrogênio de aproximadamente 13 kg/h e

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

formação de CO e CO_2, além de CH_4 residual, indicando que a reação de reforma ocorreu de forma parcial, como esperado em processos industriais. As etapas seguintes de WGS, em alta e baixa temperatura, permitiram aumentar a conversão de CO em H_2. Isso pode ser verificado pela redução da concentração de CO para 0,006 kmol/h e o aumento do H_4 para 7,05 kmol/h.

A conversão total do metano alimentado resultou em uma produção de hidrogênio próxima do limite teórico de 4 mol de H_2 por mol de CH_4, correspondendo a uma eficiência de aproximadamente 91%, o que é considerado um bom desempenho do sistema.

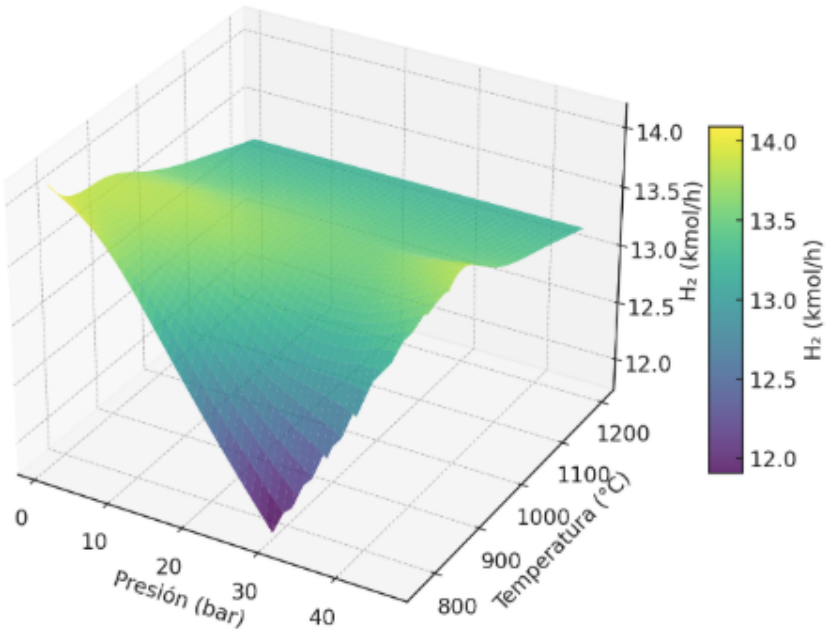
Por fim, a corrente final de hidrogênio apresentou alta pureza, com um fluxo equivalente a 14 kg/h aproximadamente, o que respalda a modelagem realizada para a etapa de reforma e purificação. Esses resultados estão de acordo com o comportamento esperado em processos de reforma a vapor com conversão por WGS e separação posterior.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

A análise de sensibilidade ajuda a compreender melhor o comportamento do sistema com a alteração dos principais parâmetros operacionais. Nesse sentido, com o objetivo de identificar as condições operacionais mais favoráveis para maximizar a produção de hidrogênio no processo de reforma a vapor do biometano, foram realizados três estudos de sensibilidade no Aspen Plus®, variando-se temperatura e pressão de operação do reator de reforma principal.

Na figura 11 está ilustrada uma superfície 3D obtida a partir da variação simultânea da temperatura entre 770–1200 °C e da pressão entre 1–30 bar, representando o efeito combinado dessas variáveis no reator principal de reforma (SMR) sobre a produção de hidrogênio.

Figura 11. Superfície de sensibilidade da produção de H_2 em função da T e P no SMR



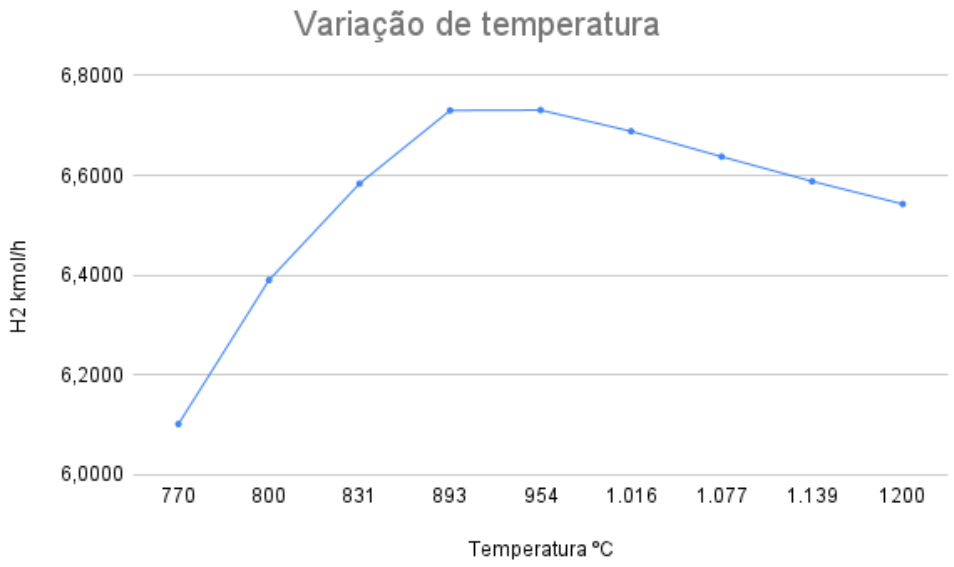
Fonte: elaboração própria.

Observa-se que a região de maior produção de hidrogênio encontra-se nas condições de moderada temperatura e baixa pressão. Embora a superfície 3D mostre a tendência geral, ela não permite identificar com clareza o ponto ótimo de operação.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

Por isso, para aprofundar a compreensão dos efeitos individuais das variáveis operacionais observadas na superfície de resposta, foram analisadas separadamente as influências da temperatura e da pressão sobre a produção de hidrogênio. Primeiramente, observando a figura 12 avalia-se a variação da temperatura de operação do reator de reforma, mantendo a pressão constante a 25 bar, a fim de identificar o ponto ótimo de conversão térmica.

Figura 12. Produção de H_2 em função da temperatura no reator de reforma



Fonte: elaboração própria.

Observa-se um aumento significativo na produção de hidrogênio à medida que a temperatura se eleva de 800 °C até cerca de 900–960 °C, atingindo um pico próximo de 6,73 kmol/h. Acima desse intervalo, verifica-se uma leve redução na produção, indicando que temperaturas excessivamente elevadas podem comprometer o rendimento global do processo, seja por reversibilidade da reação principal, degradação catalítica ou maior favorecimento de reações secundárias.

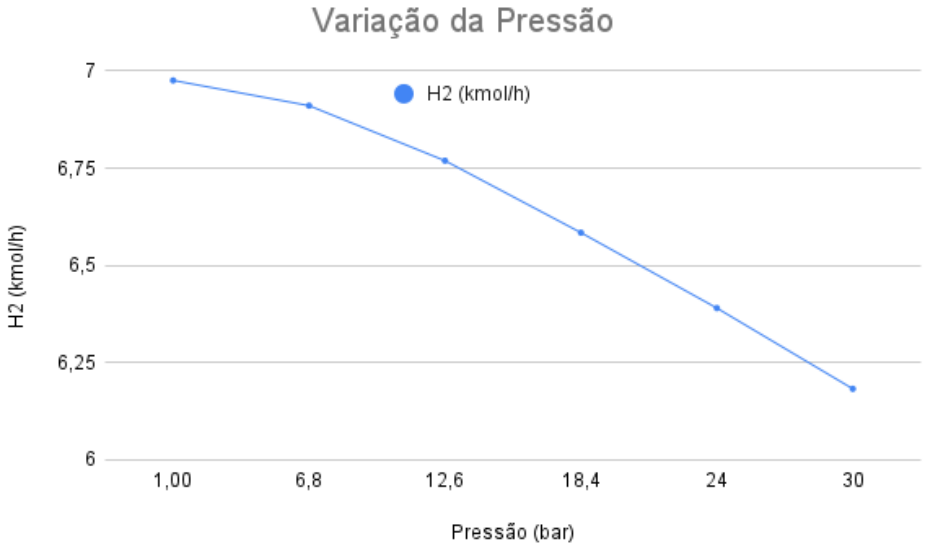
Esse comportamento está de acordo com a natureza endotérmica da reforma a vapor, que é favorecida termodinamicamente por temperaturas elevadas. No entanto, há um ponto de inflexão a partir do qual o aumento de temperatura gera mais consumo energético do que ganho em conversão. Além disso, combinado com a alta pressão, limitações cinéticas e termodinâmicas podem se tornar significativas, incluindo a ocorrência de reações paralelas ou o deslocamento reverso de reações secundárias, o que pode justificar a queda observada após o pico de produção.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

Em seguida, foi realizada uma análise isolada da pressão de operação, com temperatura fixa nos 800 ºC, buscando verificar a extensão do impacto sobre o equilíbrio da reação e sua influência negativa na produção de H_2.

A figura 13 mostra a relação entre a produção de hidrogênio com a pressão de operação, variando de 1 a 30 bar, mantendo-se constante a temperatura.

Figura 13. Produção de H_2 em função da pressão no reator de reforma



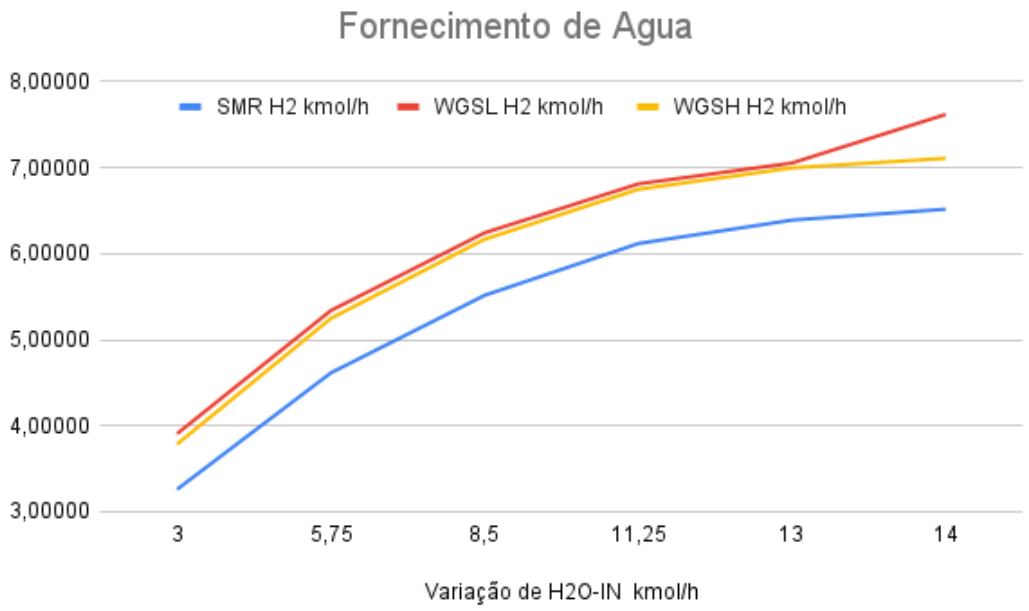
Fonte: elaboração própria.

Os resultados indicam uma tendência claramente decrescente, isto é, à medida que a pressão aumenta, a vazão de hidrogênio diminui. Este comportamento é coerente com o princípio de Le Chatelier, considerando que a reação global de reforma do metano resulta em aumento do número de mols gasosos. Isso significa que operar a pressões mais baixas aumenta a conversão para H_2. No entanto, pressões elevadas são desejáveis por razões técnicas como facilitar a separação posterior, ou mesmo, reduzir o volume dos equipamentos.

Outro parâmetro operacional que exerce forte influência sobre o desempenho da reforma do biometano é a razão vapor-carbono, controlada a partir do fluxo de alimentação de H_2O. Na figura 14., é apresentada a variação da produção de hidrogênio em cada reator da planta simulada em função do aumento da vazão de vapor entre 3 e 14 kmol/h.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

Figura 14. Produção de H_2 em função do fornecimento de H_2O



Fonte: elaboração própria.

Observa-se que o aumento do fornecimento de vapor resulta em um acréscimo significativo na produção de H_2, especialmente nas etapas de deslocamento, cujas reações são favorecidas por um excesso de vapor no meio reacional. A reação de reforma, sendo endotérmica, também se beneficia do excesso de H_2O, que desloca o equilíbrio para os produtos. Com base na tendência apresentada, foi adotada uma alimentação de 13 kmol/h de vapor para as simulações finais.

Após a definição das condições para a geração de hidrogênio, passou-se à etapa de separação do nitrogênio por meio da unidade de destilação criogênica. Para isso, foram conduzidas simulações específicas visando avaliar a eficiência da separação e a pureza do N_2 obtido, conforme discutido a seguir.

A partir da simulação ajustada para uma alimentação de 2,75 kmol/h de ar atmosférico, foi possível avaliar o desempenho da separação em dois destiladores em série. Como mostra a tabela 2 o nitrogênio foi separado majoritariamente no topo do segundo destilador, atingindo uma fração molar de aproximadamente 96%, com uma recuperação de 1,97 kmol/h.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

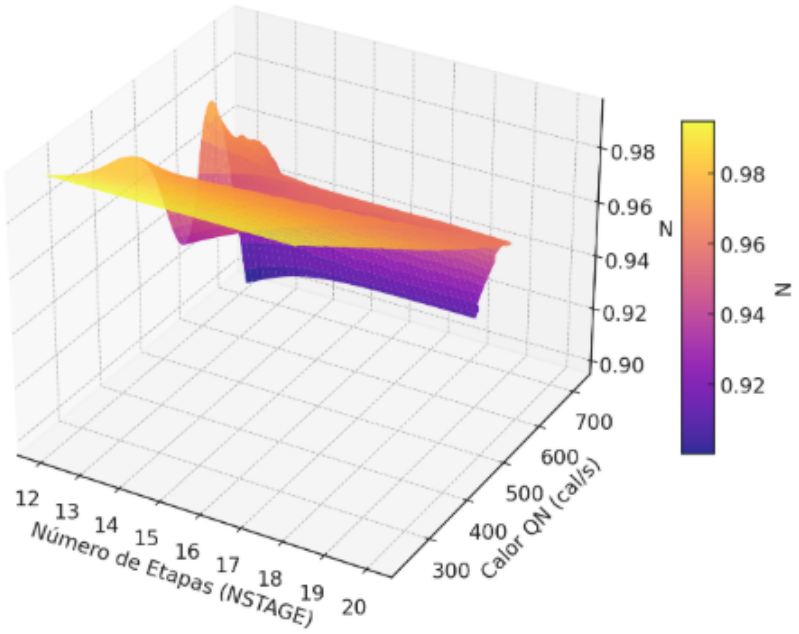
Tabela 2. Fluxo de massa em cada etapa da obtenção de N_2

	N2		O2		Ar	
	kg/h	kmol/h	kg/h	kmol/h	kg/h	kmol/h
Alimentação	60,09	2,15	18,48	0,58	1,10	0,02
Primeiro destilador topo	14,01	0,50	-	-	-	-
Primeiro destilador base	37,07	1,32	15,71	0,49	0,93	0,02
Segundo destilador topo	55,19	1,97	2,26	0,07	0,29	0,007
Segundo destilador base	4,89	0,17	16,22	0,51	0,81	0,02

Fonte: elaboração própria.

Embora esse valor represente uma separação eficiente, não atinge os níveis de pureza exigidos por diversas aplicações industriais, o que motivou um estudo de sensibilidade. Dessa forma, um gráfico de superfície foi gerado para observar a interação entre dois parâmetros considerados os principais para a separação; o número de estágios e a potência térmica do refervedor.

Figura 15. Análise da pureza do N_2 em função de estágios e calor de refervedor.



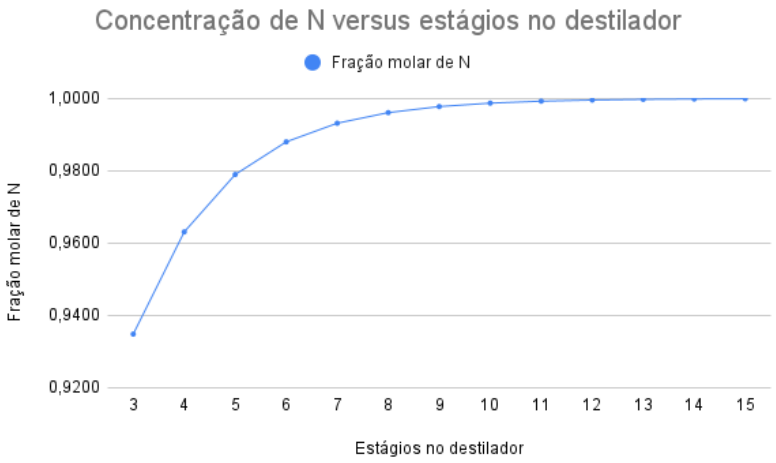
Fonte: elaboração própria.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

Como mostra a figura 15. o aumento no número de pratos está diretamente relacionado com a elevação da pureza do N_2. Esse comportamento é esperado, uma vez que mais estágios proporcionam maior contato entre as fases e favorecem o fracionamento da mistura.

A figura 16 reforça esse raciocínio ao mostrar que a pureza do nitrogênio cresce rapidamente com o número de estágios, estabilizando-se após o 11º prato. Essa tendência confirma que, para o processo em questão, um número de estágios entre 12 e 14 é suficiente para alcançar purezas superiores a 99,5% com eficiência. No entanto, observou-se que a partir de 14 pratos, a pureza se aproxima de um platô, sem ganhos expressivos com o aumento adicional. Esse ponto é importante para o projeto, pois define um limite técnico-econômico para o dimensionamento da coluna.

Figura 16. Concentração do N_2 em função do número de estágios

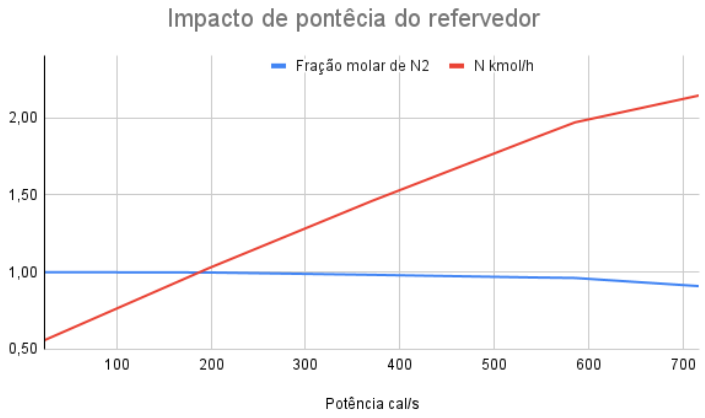


Fonte: elaboração própria.

Em contrapartida, o efeito da potência térmica do refervedor se mostrou inversamente proporcional à pureza do nitrogênio.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

Figura 17. Impacto da potência do refervedor na vazão e concentração do N_2



Fonte: elaboração própria.

Conforme demonstrado na figura 17, ao aumentar o calor fornecido, a fração molar de N_2 diminui, mesmo que a quantidade total de N_2 produzido aumente. Isso ocorre porque o excesso de energia térmica favorece a vaporização de componentes menos voláteis, como o oxigênio e o argônio, que acabam contaminando a corrente de topo. Assim, há um compromisso entre quantidade e qualidade, resultando em que maior produção total pode significar menor pureza.

Portanto, a operação ideal deve buscar um equilíbrio entre pureza e vazão, ajustando a potência do refervedor para garantir que a energia aplicada seja suficiente para a separação sem causar diluição indesejada do produto. Além de avaliar conjuntamente os impactos econômicos e operacionais ao selecionar os parâmetros de projeto e operação.

Com a obtenção do nitrogênio em alta pureza, foi possível avançar para a etapa final do processo. Nessa fase, os fluxos de H_2 e N_2 previamente ajustados foram utilizados como base para simular a síntese amoniacal, permitindo avaliar o desempenho do sistema.

A reação de síntese de amônia foi modelada com um reator estequiométrico, adotando uma conversão de 40% do N_2. Como mostra a Tabela 3, a corrente de alimentação ao reator contém cerca de 17,9 kmol/h de H_2 e 2,5 kmol/h de N_2. Na corrente de saída do reator, observa-se a formação de aproximadamente 3,94 kmol/h de NH_3, alinhada com valores típicos de uma única passagem industrial sob

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

alta pressão e temperatura moderada.

Tabela 3. Quantidade de produção da síntese de amônia

	N_2		H_2		NH_3	
	kg/h	kmol/h	kg/h	kmol/h	kg/h	kmol/h
Alimentação	70,03	2,5	14,11	7,00	-	-
Entrada reator	142,89	5,10	24,14	11,98	14,33	0,82
Saida reator	85,73	3,06	11,80	5,85	83,53	4,90
Produto	0,02	-	-	-	67,02	3,94
Refluxo	72,86	2,60	10,03	4,97	14,03	0,83
Purga	12,86	0,46	1,77	0,88	2,48	0,15

Fonte: elaboração própria.

Após a reação, o sistema conta com uma unidade de resfriamento e separação, onde o NH_3 é removido da mistura gasosa, que apresenta pureza superior a 95% em base mássica e vazão de aproximadamente 67 kg/h. O restante da corrente é dividido em duas frações; uma fração reciclada para o reator, e uma pequena fração de purga destinada a evitar o acúmulo de gases inertes, com 0,46 kmol/h de N_2 e 0,88 kmol/h de H_2.

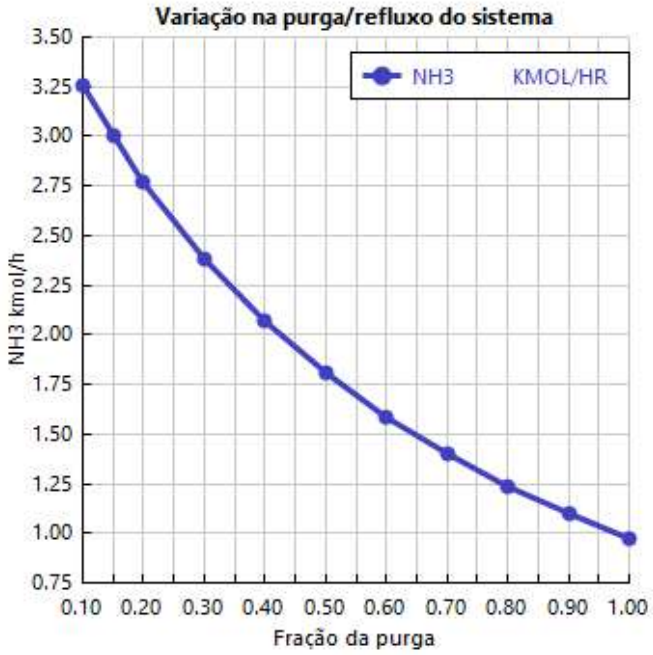
Esse arranjo de reciclo com purga controlada é essencial para manter a eficiência do sistema, garantindo alto aproveitamento dos reagentes e minimizando perdas. A escolha da fração de purga foi determinada com base na estabilidade da simulação, mas pode ser otimizada.

Nesse sentido, além da análise dos perfis de composição dos produtos, foram realizados estudos de sensibilidade visando avaliar o impacto de dois parâmetros operacionais fundamentais na etapa final de produção de amônia, a fração de purga do sistema e a vazão de nitrogênio disponível.

Na figura 18, o gráfico mostra o impacto da fração de purga sobre a produção de NH_3. Observa-se que o aumento da fração de purga leva a uma redução significativa da produção de amônia. Isso ocorre porque parte dos reagentes recicláveis são removidos do sistema junto com os inertes, o que diminui o aproveitamento do circuito de recirculação. No entanto, a purga é necessária para evitar o acúmulo desses inertes no reator de síntese, o que, se não controlado, comprometeria a eficiência e o equilíbrio da reação.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

Figura 18. Concentração de NH_3 na corrente final em função da purga

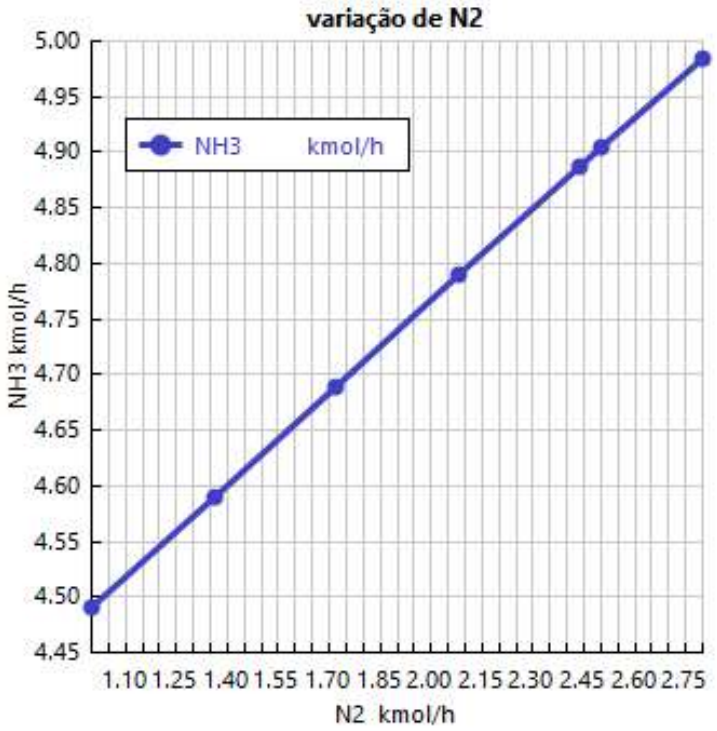


Fonte: elaboração própria.

Já a figura 19, referente à variação do N_2 e o impacto na produção de NH_3 evidencia uma relação praticamente linear entre os dois parâmetros. Isso confirma que o N_2 atua como reagente limitante dentro das condições adotadas na simulação, e que aumentos na sua alimentação refletem diretamente em maiores quantidades de NH_3 formado. Este comportamento é coerente com a estequiometria da reação de síntese da amônia da equação 4 onde a presença adequada de N_2 é essencial para maximizar a produção.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

Figura 19. Produção de NH_3 em função da alimentação de N_2



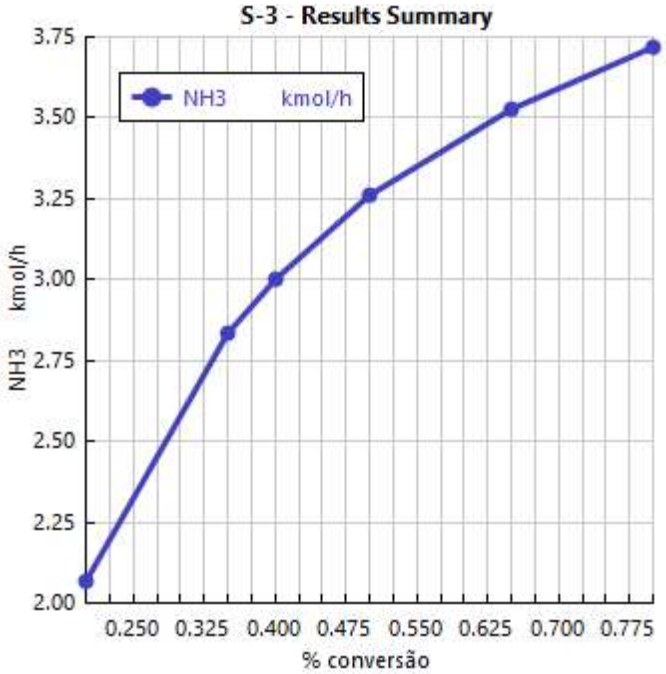
Fonte: elaboração própria.

Portanto, a operação ideal requer um compromisso entre a minimização da purga e a eliminação suficiente dos inertes para evitar sua acumulação. Também do ponto de operação entre a maximização da conversão de NH_3 e os aspectos econômicos associados ao consumo de reagentes e energia na recirculação.

Adicionalmente, foi realizada uma análise do impacto da conversão da reação de síntese na produção final de amônia. A Figura 20 mostra a variação da vazão de NH_3 em função da conversão percentual da reação. Cabe ressaltar que os valores de conversão foram definidos como parâmetros de entrada, de modo que os resultados apresentados não correspondem a simulações com base em condições termodinâmicas reais. Ainda assim, o gráfico tem valor ilustrativo, pois permite compreender a sensibilidade da produção de NH_3 em relação à eficiência da reação.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

Figura 20. Produção de NH_3 em função do % de conversão de N_2



Fonte: elaboração própria.

Observa-se uma tendência crescente na produção de amônia com o aumento da conversão, como era esperado. A curva possui uma forma suavemente exponencial, indicando que ganhos iniciais de conversão resultam em aumentos mais acentuados na produção, enquanto ganhos adicionais tendem a apresentar retornos decrescentes.

Esse comportamento evidencia a importância de se operar a reação em condições otimizadas que maximizem a conversão, mas também alerta para os limites técnicos e energéticos envolvidos. Atingir conversões muito elevadas pode requerer pressões e temperaturas extremas ou catalisadores de alto custo, o que deve ser considerado na análise econômica do processo. Em termos energéticos e de balanço de massa, o sistema mostrou-se coerente, com boa recuperação de produto e retorno eficiente dos reagentes.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O presente trabalho teve como objetivo principal a simulação de um processo integrado para a produção de amônia verde, utilizando como matérias-primas o biometano e o ar atmosférico. Para isso, foram modeladas três etapas fundamentais: a reforma a vapor do biometano, a separação criogênica do nitrogênio e a síntese da amônia, todas desenvolvidas no simulador Aspen Plus®. Com base nos resultados obtidos, foi possível analisar a viabilidade técnica da cadeia proposta e identificar os principais parâmetros que influenciam a eficiência e a seletividade de cada etapa.

Na etapa de reforma, verificou-se que o excesso de vapor é um fator determinante para a maximização da produção de hidrogênio, tanto na reação principal quanto nas etapas de deslocamento (WGS). A análise de sensibilidade demonstrou que a razão vapor-carbono deve ser cuidadosamente ajustada para equilibrar a conversão desejada com os custos energéticos associados à geração de vapor. Essa etapa revelou-se altamente dependente da integração térmica, sendo o aproveitamento energético essencial para tornar o processo mais sustentável.

A separação criogênica do ar para obtenção de nitrogênio também apresentou bons resultados. A pureza do N_2 obtido na corrente de topo foi superior a 96%, e análises de sensibilidade permitiram identificar a influência negativa do excesso de calor no refervedor, o que contribuiu para otimizar o número de estágios da coluna de destilação. Com base nos estudos, estabeleceu-se um número mínimo de pratos e uma faixa térmica ideal que permite alcançar alta pureza sem comprometer a eficiência energética da unidade.

Por fim, a etapa de síntese da amônia, modelada com base estequiométrica, permitiu a avaliação do desempenho do sistema em termos de conversão e recuperação de produto. A estrutura de purga e reciclo foi essencial para manter o equilíbrio de reagentes e minimizar perdas. Os resultados apontaram uma fração molar de NH_3 condensada superior a 99%, confirmando a viabilidade do processo simulado e reforçando o potencial do modelo como base para futuras otimizações.

Como proposta para trabalho(s) futuro(s), recomenda-se a aplicação de modelos termodinâmicos mais robustos, com reatores de equilíbrio para a síntese da amônia, além da análise econômica e ambiental do processo. A integração com fontes renováveis para geração de energia e vapor também pode ser considerada,

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

bem como o estudo da captura de CO_2 oriundo da reforma, visando aumentar o caráter sustentável da cadeia produtiva.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

REFERÊNCIAS

AMIN, M. R. *et al.* Simulation of Ammonia Synthesis. **American Journal of Chemical Engineering**, [*s. l.*], v. 1, n. 3, p. 59–64, 2013.

ATSDR, Agency for Toxic Substances and Disease Registry. **AMONÍACO (AMMONIA)**. [*S. l.: s. n.*], 2004. Disponível em: www.atsdr.gov/es/.

BRASIL. **PLANO NACIONAL DE FERTILIZANTES 2050 Uma Estratégia para os Fertilizantes no Brasil**. [*S. l.: s. n.*], 2022.

BRIGHTLING, John. Ammonia and the fertiliser industry: The development of ammonia at Billingham. **Johnson Matthey Technology Review**, [*s. l.*], v. 62, n. 1, p. 32–47, 2018.

DEFREIN, Bruna. **USO DE PROCESSOS INDUSTRIAIS ALTERNATIVOS PARA PROMOVER A ECONOMIA CIRCULAR NA INDÚSTRIA QUÍMICA: ESTUDO DE CASO NA INDÚSTRIA DE FERTILIZANTES**. 2021. - UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, São Paulo, 2021.

DORADO, Brizuela Juan. **Estudio de procesos para la producción de amoniaco a partir de H 2 obtenido mediante electrólisis desde recursos renovables**. Valladolid: [*s. n.*], 2022.

EL-MAGHRABY, Rehab M.; MOHAMED, Ahmed Y.; HASSANEAN, M. H.M. Improving energy efficiency in ammonia production plants using machine learning. **Fuel**, [*s. l.*], v. 363, 2024.

GONÇALVES, José Sidnei; FERREIRA, Célia R R P T; SOUZA, Sueli Alves Moreira. PRODUÇÃO NACIONAL DE FERTILIZANTES, PROCESSO DE DESCONCENTRAÇÃO REGIONAL E MAIOR DEPENDÊNCIA EXTERNA. São Paulo, v. 38, 2008.

HU, Tianmiao *et al.* Nitrogen production by efficiently removing oxygen from air using a perovskite hollow-fiber membrane with porous catalytic layer. **Frontiers in Chemistry**, [*s. l.*], v. 6, n. AUG, 2018.

IFA, International Fertlizer Association. **Market Intelligence and Agriculture Services International Fertilizer Association (IFA) IFA Virtual Strategic Forum**. [*S. l.: s. n.*], 2020.

IRENA. **Innovation outlook : renewable ammonia**. [*S. l.*]: International Renewable Energy Agency ; Ammonia Energy Association, 2022.

LEITÃO, João Pedro Vieira Teles de Menezes. **Haber-Bosch process alternatives for the production of green ammonia Chemical Engineering Examination Committee**. 2023. - Universidade de Lisboa, Lisboa, 2023.

LINDE. **Amoniaco Alta Pureza**. [*S. l.: s. n.*], [*s. d.*].

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40

MARKET RESEARCH FUTURE. **Ammonia Market Research Report**. [*S. l.*], 2025. Disponível em: https://www.marketresearchfuture.com/reports/ammonia-market-2405. Acesso em: 6 jul. 2025.

MURTA, Raphael Conde Pereira de Amorim. **SIMULAÇÃO DE PROCESSOS APLICADA NA UTILIZAÇÃO DE RESÍDUO SÓLIDO URBANO PARA PRODUÇÃO DE UREIA**. 2023. - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2023.

OSORIO-TEJADA, Jose; TRAN, Nam N.; HESSEL, Volker. Techno-environmental assessment of small-scale Haber-Bosch and plasma-assisted ammonia supply chains. **Science of the Total Environment**, [*s. l.*], v. 826, 2022.

RIBEIRO, Daniel. **A history of the international chemical industry**. [*S. l.*]: REVISTA DE CIÊNCIA ELEMENTAR, 2013. v. 1 Disponível em: Acesso em: 1 jul. 2025.

ROYAL SOCIETY. **Ammonia : zero-carbon fertiliser, fuel and energy store : policy briefing**. [*S. l.*]: Royal Society, 2020.

SALGARI, Fabio. **CONCEPTUAL DESIGN OF A GREEN-AMMONIA PRODUCTION PROCESS: COST AND SAFETY ASSESSMENT**. 2024. - UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA, [*s. l.*], 2024.

SCARPETTA, Aline. **POTENCIAL DE PRODUÇÃO DE AMÔNIA RENOVÁVEL A PARTIR DO BIOGÁS NO ESTADO DO PARANÁ**. 2024. - Universidade Federal do Paraná, Palotina, 2024.

TAVARES, Flavio V; MONTEIRO, Luciane P C; MAINIER, Fernando B. Indicators of energy efficiency in ammonia productions plants. **American Journal of Engineering Research (AJER)**, [*s. l.*], v. 02, p. 116–123, 2013. Disponível em: www.ajer.org.

TELINI, Rodrigo Oliveira. **UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO-ESCOLA POLITÉCNICA DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**. 2021. - Universidade de São Paulo, São Paulo, 2021.

VALERA-MEDINA, A. *et al.* Ammonia for power. **Progress in Energy and Combustion Science**, [*s. l.*], v. 69, p. 63–102, 2018.

WU, Yan *et al.* Research on design and multi-frequency scheduling optimization method for flexible green ammonia system. **Energy Conversion and Management**, [*s. l.*], v. 300, 2024.

Versão Final Homologada
04/09/2025 14:40