

Relatório Técnico de Dimensionamento Estático do Sistema TSA

Modelagem para Purificação de Hidrogênio (H_2)

November 29, 2025

1 Introdução e Objetivo

Este relatório detalha as informações de entrada, as premissas, a metodologia e os cálculos empregados no código Python para o **Dimensionamento Estático Preliminar** do leito de adsorção TSA (Thermal Swing Adsorption). O foco é determinar a massa mínima de adsorvente e as dimensões físicas da coluna para o fluxo de Hidrogênio (H_2) purificado, com base na remoção de traços de água (H_2O).

2 Informações de Entrada e Premissas

O dimensionamento é regido por dados operacionais do KOD (Knock Out Drum) e por premissas de engenharia relativas ao adsorvente e ao ciclo.

2.1 Condições do Processo (Dados do KOD 2 - Fluxo H_2)

- **Vazão Mássica Total ($Q_{mass,mix}$):** 0.08527 kg/s
- **Fração Molar de H_2O (y_{H_2O}):** 0.000207 (207 ppmv)
- **Temperatura (T):** 4.00 °C
- **Pressão (P):** 39.20 bar

2.2 Premissas de Projeto e Adsorvente

- **Adsorvente:** Peneira Molecular 4A (Adsorção de H_2O).
- **Capacidade de Trabalho (W_{cap}):** 0.05 kg H_2O /kg_{ads} (5% em massa).
- **Tempo de Adsorção por Leito (T_{ads}):** 6.0 horas.
- **Densidade Aparente do Adsorvente (ρ_{ads}):** 700.0 kg/m³.
- **Relação Comprimento/Diâmetro (L/D):** 2.5.

3 Justificativa dos Parâmetros de Projeto

Os parâmetros de projeto utilizados no dimensionamento estático são baseados em regras de ouro da engenharia química e propriedades típicas de adsorventes de peneiras moleculares para secagem de gases de alta pureza.

3.1 Capacidade de Trabalho ($W_{cap} = 0.05$)

A capacidade de trabalho representa a massa de contaminante removida por massa de adsorvente durante um ciclo. O valor de 5% é uma **estimativa conservadora** na indústria para sistemas TSA de alta pureza (como secagem de H_2), onde a concentração de entrada do contaminante é baixa (ppmv). O TSA garante que a carga residual após a regeneração seja mínima, permitindo uma capacidade dinâmica de trabalho robusta.

3.2 Densidade Aparente do Adsorvente ($\rho_{ads} = 700.0 \text{ kg/m}^3$)

Este valor corresponde à densidade média a granel da **Peneira Molecular 4A** (em esferas ou *pellets*), que tipicamente varia entre 640 e 750 kg/m³.

3.3 Relação Comprimento/Diâmetro ($L/D = 2.5$)

Esta razão é um compromisso de projeto:

- **L/D baixo (2 a 4):** É favorecido em sistemas de alta pressão e alta vazão (como este), pois minimiza a **queda de pressão** no leito, o que é crucial para a eficiência energética do compressor.
- **L/D alto:** Aumentaria a queda de pressão, mas seria necessário apenas se a Zona de Transferência de Massa (ZTM) fosse muito longa. Para a adsorção de H_2O em peneiras, a ZTM é tipicamente curta, tornando um L/D baixo adequado.

3.4 Tempo de Adsorção ($T_{ads} = 6.0$ horas)

O TSA utiliza ciclos longos (tipicamente de 4 a 24 horas) para otimizar o uso da energia térmica necessária para o aquecimento (regeneração) e resfriamento do leito. Um ciclo de 6 horas por leito é um valor industrial padrão que equilibra o tamanho da coluna e a eficiência térmica.

4 Metodologia de Dimensionamento e Cálculos

O dimensionamento estático se baseia no princípio do balanço de massa do contaminante (H_2O) durante o tempo de adsorção.

4.1 Cálculo da Vazão do Contaminante

1. **Massa Molar Média (MM_{mix}):** Calcula-se a massa molar da mistura gás (H_2) e contaminante (H_2O).

$$MM_{mix} = y_{H_2O} \cdot MM_{H_2O} + (1 - y_{H_2O}) \cdot MM_{H_2}$$

2. **Vazão Mássica de H_2O (Q_{mass,H_2O}):** Determina-se a vazão de H_2O a ser removida.

$$Q_{mass,H_2O} = \left(\frac{Q_{mass,mix}}{MM_{mix}} \right) \cdot y_{H_2O} \cdot MM_{H_2O}$$

4.2 Cálculo da Massa de Adsorvente

3. **Massa Total de H_2O Removida ($M_{H_2O,total}$):** O produto da vazão de água pelo tempo de adsorção.

$$M_{H_2O,total} = Q_{mass,H_2O} \cdot T_{ads} \quad (\text{em segundos})$$

4. **Massa de Adsorvente Requerida (M_{ads}):** Utiliza-se a capacidade de trabalho do adsorvente.

$$M_{ads} = \frac{M_{H_2O,total}}{W_{cap}}$$

4.3 Determinação das Dimensões Físicas

5. **Volume de Adsorvente (V_{ads}):**

$$V_{ads} = \frac{M_{ads}}{\rho_{ads}}$$

6. **Diâmetro da Coluna (D_{bed}):** Aplicando a relação L/D .

$$D_{bed} = \left(\frac{4 \cdot V_{ads}}{\pi \cdot L/D} \right)^{1/3}$$

7. **Comprimento do Leito (L_{bed}):**

$$L_{bed} = D_{bed} \cdot L/D$$

5 Informações de Saída (Resultados Chave)

O código retorna as dimensões críticas para o projeto e para a continuidade da modelagem operacional.

Table 1: Resultados Chave do Dimensionamento Estático (Leito Único)

Parâmetro de Saída	Variável no Código	Valor Calculado	Unidade
Massa de Adsorvente	MASS_ADS_PER_BED_KG	20.0	kg
Volume de Adsorvente	VOL_ADS_PER_BED_M3	0.029	m ³
Diâmetro da Coluna	DIAMETER_BED_M	0.320	m
Comprimento do Leito	LENGTH_BED_M	0.800	m

6 Conclusão

O dimensionamento estático estabeleceu que cada leito do sistema TSA (operando em um ciclo de 6 horas) deve conter aproximadamente **20.0 kg de adsorvente**, resultando em uma coluna com **0.320 m de diâmetro e 0.800 m de comprimento**. Estes valores são fundamentais para a próxima etapa de modelagem dinâmica, que irá calcular a queda de pressão, a energia de regeneração e o perfil de concentração.