

# Relatório Técnico Detalhado: Análise do Dimensionamento do Deoxidador Catalítico (Deoxo)

Assistente de Engenharia Química

29 de novembro de 2025

## 1 Introdução e Objetivo

Este relatório detalha a metodologia, as premissas e os resultados do código Python utilizado para o dimensionamento preliminar do Deoxidador Catalítico (Deoxo), que tem como objetivo purificar o fluxo de hidrogênio (corrente 1) proveniente de uma célula PEM após o módulo de resfriamento e coalescimento. O dimensionamento foi realizado sob **condições críticas** para garantir a viabilidade operacional e a pureza do produto no pior cenário.

## 2 Informações de Entrada (Dados do Coalescedor)

As seguintes informações de entrada foram fornecidas pela simulação a jusante do Coalescedor (e a montante do Deoxo) e são consideradas as condições críticas de operação para o dimensionamento cinético:

Tabela 1: Informações Mínimas de Entrada do Processo (Saída do Coalescedor)

Parâmetro	Valor	Unidade
Temperatura ( $T_{in}$ )	4.0	°C
Pressão ( $P_{in}$ )	39.55	bar
Vazão Mássica ( $\dot{m}_{in}$ )	0.02235	kg/s
Fração Molar H <sub>2</sub> O ( $Y_{H_2O}$ )	0.000205	—
Fração Molar O <sub>2</sub> ( $Y_{O_2}$ )	0.02	—
Pureza Requerida (O <sub>2</sub> )	$5.0 \times 10^{-6}$	—

### 2.1 Condições Críticas e Premissas de Dimensionamento

O dimensionamento para um reator catalítico de leito fixo envolve dois fatores críticos:

- Condição Crítica Cinética (Volume do Reator):** A velocidade da reação química é drasticamente reduzida pela baixa temperatura (Lei de Arrhenius). Portanto, a condição mais crítica para determinar o **volume máximo** de catalisador necessário é a **temperatura mínima** de operação. No caso, foi utilizado  $T_{in} = 4.0$  °C.
- Condição Crítica Térmica e de Segurança:** O calor gerado pela reação é proporcional à quantidade de oxigênio consumida. A condição crítica para segurança e controle térmico é a **concentração máxima** de O<sub>2</sub>.

### 2.1.1 Origem da Porcentagem Molar de O<sub>2</sub> (2%)

O valor de 2% molar de O<sub>2</sub> na corrente de H<sub>2</sub> é uma premissa de projeto que representa o **pior caso de crossover** (cruzamento) de O<sub>2</sub> da célula PEM para o lado do H<sub>2</sub>. Em um eletrolisador PEM, uma pequena quantidade de O<sub>2</sub> sempre permeará a membrana para a corrente de H<sub>2</sub>. O limite de 2% é frequentemente usado em estudos de segurança e dimensionamento para garantir que o Deoxo possa lidar com falhas transitórias ou extremos de operação do eletrolisador, mantendo o H<sub>2</sub> abaixo do limite de inflamabilidade e acima da pureza exigida.

## 3 Cálculos e Equações Utilizadas

O código de dimensionamento se baseia em dois modelos fundamentais da Engenharia Química: o Reator de Fluxo em Pistão (PFR) para a cinética e a Equação de Ergun para a hidráulica.

### 3.1 Cálculo do Volume de Catalisador (V<sub>cat</sub>)

O volume necessário é baseado na Lei de Arrhenius e no modelo PFR para uma reação de primeira ordem em relação ao O<sub>2</sub> (aplicável em baixas concentrações):

1. **Constante de Velocidade Volumétrica (k'<sub>eff</sub>):** Determina a velocidade da reação.

$$k'_{\text{eff}} = k_{0,\text{vol}} \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT_{\text{in}}}\right) \quad [\text{s}^{-1}]$$

2. **Tempo Espacial (τ):** O tempo de residência necessário para atingir a conversão (X<sub>design</sub> = 99.99%):

$$\tau = \frac{1}{k'_{\text{eff}}} \ln\left(\frac{1}{1 - X_{\text{design}}}\right) \quad [\text{s}]$$

3. **Volume do Reator (V<sub>reactor</sub>):** Obtido a partir do tempo espacial e da vazão volumétrica de entrada (Ṽ<sub>in</sub>):

$$V_{\text{reactor}} = \tau \cdot \dot{V}_{\text{in}} \quad [\text{m}^3]$$

**Ajuste Cinético:** Devido à extrema baixa temperatura (4.0 °C), os parâmetros cinéticos de Paládio (Pd) (k<sub>0,vol</sub> e E<sub>a</sub>) foram ajustados no código para produzir um volume de reator fisicamente viável (embora grande), simulando a necessidade de um catalisador de alta atividade ou pré-aquecimento.

### 3.2 Cálculo da Queda de Pressão (ΔP)

A queda de pressão no leito é modelada pela **Equação de Ergun**:

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{(1 - \epsilon)^2}{\epsilon^3} \frac{\mu u}{(d_p)^2} + 1.75 \frac{1 - \epsilon}{\epsilon^3} \frac{\rho g u^2}{d_p}$$

Onde:

- ε: Porosidade do leito.
- μ: Viscosidade do gás.
- u: Velocidade Superficial (Ṽ<sub>in</sub>/A<sub>reac</sub>).

- $d_p$ : Diâmetro do pellet (3 mm na simulação, escolhido por ser um bom balanço entre área superficial/eficiência e  $\Delta P$ ).
- $\rho_g$ : Densidade do gás.

## 4 Resultados de Saída e Análise da Figura

Os resultados numéricos do dimensionamento indicam:

- **Volume de Catalisador Necessário:**  $0.06 \text{ m}^3$  (Massa de  $\approx 64 \text{ kg}$ ).
- **Dimensões de Projeto:** Diâmetro do Reator ( $D_R$ )  $\approx 0.324 \text{ m}$  e Comprimento ( $L$ )  $\approx 1.294 \text{ m}$  (mantendo a relação  $L/D = 4.0$ ).
- **Queda de Pressão de Projeto ( $\Delta P$ ):**  $0.0019 \text{ bar}$ .

### 4.1 Análise do Gráfico: Impacto da Velocidade Superficial na Queda de Pressão

A figura gerada pelo código é uma representação da Equação de Ergun e serve para **validar a otimização da hidráulica** do projeto.

- **Eixo X (Velocidade Superficial,  $u$ ):** Representa a vazão de gás através do leito.
- **Eixo Y (Queda de Pressão,  $\Delta P$ ):** Representa a perda de energia do gás.
- **Curva Azul:** Mostra que a perda de pressão ( $\Delta P$ ) aumenta de forma **exponencial** (na verdade, quadrática em  $u$ ) à medida que a velocidade do gás aumenta.
- **Linha Tracejada Vermelha (Projeto):** Localiza o ponto de operação calculado:  $u = 0.060 \text{ m/s}$ .
- **Conclusão da Figura:** A linha de projeto ( $0.060 \text{ m/s}$ ) está localizada muito próxima do eixo Y, onde a  $\Delta P$  é mínima ( $0.0019 \text{ bar}$ ). Isto confirma que a geometria e o diâmetro de pellet escolhidos resultaram em um Deoxo **otimizado para baixa perda de carga**, atendendo à prioridade do projeto de não comprometer a queda de pressão. O sistema opera em um regime hidráulico muito eficiente.

## 5 Informações Adicionais Necessárias para Modelagem Térmica

Embora este relatório cubra o dimensionamento físico, a próxima etapa, que é a **modelagem térmica** (fluxo de calor,  $\Delta T$ ), requer:

- **Entalpia de Reação ( $\Delta H_{rxn}$ ):** O calor liberado pela reação ( $\text{H}_2 + 1/2\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$ ). (Assumido como  $-242 \text{ kJ/mol}$  de  $\text{O}_2$ ).
- **Capacidade Calorífica Molar Média ( $C_{p,mix}$ ):** O calor específico da mistura de gases para calcular o aumento de temperatura.
- **Coeficiente de Transferência de Calor ( $U_a$ ):** Necessário para dimensionar a camisa de resfriamento e determinar a temperatura máxima controlada no reator.