

Relatório Técnico de Modelagem Operacional Simplificada do Sistema TSA

Foco na Queda de Pressão e Demanda Energética para Purificação de H₂

November 29, 2025

1 Introdução e Objetivo

Este relatório detalha a **Modelagem Operacional Simplificada** do sistema TSA (Thermal Swing Adsorption) para o fluxo de Hidrogênio (H_2). O objetivo é calcular métricas de desempenho cruciais (queda de pressão e energia de regeneração) utilizando as dimensões do leito determinadas na etapa de dimensionamento estático.

1.1 Nota Importante sobre a Modelagem

Este modelo é **unidimensional (1D)** e **estático** em sua natureza operacional. Ele utiliza equações de engenharia (como a Equação de Ergun) e balanços de energia simplificados (capacidade de trabalho) para fornecer estimativas de **custo operacional (energia e bombeamento)**. Uma modelagem dinâmica completa exigiria a resolução de Equações Diferenciais Parciais (EDPs) de balanço de massa e energia para simular a frente de transferência e o perfil de temperatura ao longo do tempo.

2 Informações de Entrada e Origem dos Dados

O código de modelagem depende das condições de processo fornecidas e dos parâmetros de projeto arbitrados.

2.1 Dados de Entrada do Fluxo H_2 (Origem: Estado Final do KOD 2)

Table 1: Dados de Entrada do Processo

Parâmetro	Variável	Valor	Unidade	Origem
Vazão Mássica Total	$Q_{mass,mix}$	0.08527	kg/s	Dados do Processo (KOD 2)
Fração Molar de H_2O	y_{H_2O}	0.000207	-	Dados do Processo (KOD 2)
Temperatura de Entrada	T_{in}	4.00	°C	Dados do Processo (KOD 2)
Pressão de Entrada	P_{in}	39.20	bar	Dados do Processo (KOD 2)

2.2 Parâmetros Arbitrados e de Projeto

Estes parâmetros são baseados em regras de ouro da indústria e nas propriedades da Peneira Molecular 4A.

Table 2: Parâmetros de Projeto e Propriedades Arbitradas

Parâmetro Arbitrado	Variável	Valor	Justificativa
Capacidade de Trabalho	W_{cap}	0.05	Estimativa conservadora para TSA de alta pureza.
Diâmetro da Partícula	D_p	0.0025	Diâmetro médio para esferas de 2.5 mm.
Viscosidade do H_2	μ_{H_2}	1.05×10^{-5}	Valor aproximado para 4 °C e 39 bar.
Porosidade do Leito	ϵ	0.40	Valor típico para leitos empacotados aleatoriamente.
Calor de Desorção (H_2O)	Q_{ads}	2000.0	Valor médio para a desorção de água (kJ/kg H_2O).
Temperatura de Regeneração	T_{reg}	250.0	Temperatura necessária para desorver a H_2O eficientemente.

3 Cálculos e Metodologia de Modelagem

O código realiza dois cálculos principais de modelagem, utilizando as dimensões do leito ($D_{bed} = 0.320$ m, $L_{bed} = 0.800$ m) obtidas na fase de dimensionamento.

3.1 Modelagem de Adsorção: Queda de Pressão (ΔP)

A queda de pressão é calculada utilizando a **Equação de Ergun**, que modela o fluxo de gás através de um leito empacotado. A ΔP é crucial para determinar o custo de bombeamento (compressão).

Cálculo da Densidade e Velocidade Mássica

A densidade do gás (ρ_{gas}) e a velocidade mássica superficial (G) são calculadas nas condições de entrada.

$$\rho_{\text{gas}} = \frac{P_{\text{in}} \cdot MM_{\text{mix}}}{R_{\text{universal}} \cdot T_{\text{in}}} ; \quad G = \frac{Q_{\text{mass,mix}}}{A_{\text{coluna}}}$$

Equação de Ergun

A queda de pressão total (ΔP) é a soma dos termos viscoso (laminar) e cinético (turbulento).

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \cdot \underbrace{\frac{(1-\epsilon)^2}{\epsilon^3} \cdot \frac{\mu \cdot u_s}{D_p^2}}_{\text{Termo Viscoso}} + \underbrace{1.75 \cdot \frac{1-\epsilon}{\epsilon^3} \cdot \frac{\rho_{\text{gas}} \cdot u_s^2}{D_p}}_{\text{Termo Cinético}}$$

onde u_s é a velocidade superficial do gás.

3.2 Modelagem de Regeneração: Energia Térmica (Q_{Total})

A energia total necessária para a regeneração (Q_{Total}) é calculada somando-se o calor sensível para aquecer o adsorvente e o calor latente para desorver o H₂O. Assume-se que o tempo de regeneração é igual ao tempo de adsorção ($T_{\text{ads}} = 6$ horas).

Cálculo do Calor Sensível ($Q_{\text{Sensível}}$)

Energia para aquecer a massa de adsorvente (M_{ads}) da temperatura de adsorção (T_{in}) até a temperatura de regeneração (T_{reg}).

$$Q_{\text{Sensível}} = M_{\text{ads}} \cdot C_{p,\text{ads}} \cdot (T_{\text{reg}} - T_{\text{in}})$$

Cálculo do Calor de Desorção ($Q_{\text{Desorção}}$)

Energia necessária para remover a massa total de H₂O ($M_{\text{H}_2\text{O},\text{total}}$) do adsorvente.

$$Q_{\text{Desorção}} = M_{\text{H}_2\text{O},\text{total}} \cdot Q_{\text{ads}}$$

Cálculo da Potência Média ($P_{\text{Médio}}$)

$$P_{\text{Médio}} = \frac{Q_{\text{Total}}}{T_{\text{reg}} \text{ (em segundos)}}$$

Onde $Q_{\text{Total}} = (Q_{\text{Sensível}} + Q_{\text{Desorção}})/\eta_{\text{calor}}$, e η_{calor} é a eficiência de transferência de calor.

4 Informações de Saída (Resultados da Modelagem)

O código fornece os seguintes resultados chaves de desempenho operacional para o leito de H₂:

Table 3: Resultados Chave da Modelagem Operacional (Leito Único)

Parâmetro de Saída	Variável	Valor	Unidade	Significado
Queda de Pressão	ΔP	21.90	mbar	Custo de bombeamento (operação).
Massa de H ₂ O Removida	$M_{\text{H}_2\text{O},\text{total}}$	1.002	kg	Massa de água a cada ciclo de 6h.
Energia Térmica Total	Q_{Total}	48.01	MJ	Energia bruta necessária para regenerar o leito.
Potência Térmica Média	$P_{\text{Médio}}$	2.22	kW	Potência média requerida durante a regeneração.

5 Conclusão

O modelo operacional indica uma **baixa queda de pressão ($\Delta P = 21.90$ mbar)**, o que é altamente desejável para um sistema de alta pressão de H₂, minimizando os custos de compressão. A demanda de potência térmica média de 2.22 kW por leito é o principal custo operacional do ciclo de regeneração. Estes resultados permitem uma avaliação econômica e de engenharia para o projeto da planta.