

Relatório: Modelagem Simplificada de Dimensionamento de PSA/Secador de H₂

Modelo de Equilíbrio de Adsorção

1 de dezembro de 2025

Resumo

Este relatório descreve o Modelo Simplificado de Equilíbrio de Adsorção utilizado para o dimensionamento preliminar de um sistema de Purificação por Adsorção de Oscilação de Pressão (PSA) ou um Secador de Adsorção para tratamento de um fluxo de Hidrogênio (H₂). O modelo foca na avaliação da massa de adsorvente necessária (Custo de Capital) e na estimativa do consumo energético e perda de produto (Custo Operacional), ignorando a complexidade da cinética e da transferência de massa.

1 Introdução e Objetivo do Modelo

O modelo desenvolvido é uma ferramenta de engenharia de processos que utiliza o princípio do balanço de massa no equilíbrio para determinar os requisitos básicos de um sistema de purificação por adsorção, como o PSA ou um Secador de Adsorção.

O sistema foca na remoção da impureza chave, que, após a etapa de Deoxo (desoxigenação catalítica), é a **Água (H₂O)** residual, essencial para atingir a pureza necessária para armazenamento de H₂ (pureza 5.0, 99.999%).

2 O que o Programa Modela e Dimensiona

O código em Python realiza as seguintes funções de dimensionamento e modelagem:

2.1 Dimensionamento Físico (Custo de Capital)

O modelo calcula o volume e a massa total de adsorvente.

- **Massa de Adsorvente Necessária (M_{ads}):** Determina a massa total de material adsorvente (por exemplo, Sílica Gel ou Alumina Ativada) exigida pelo processo para reter a impureza chave durante um ciclo de tempo.
- **Volume Total do Leito (V_{ads}):** Calcula o volume físico total a ser distribuído entre as colunas de adsorção, usando a densidade aparente do adsorvente.

A equação fundamental de dimensionamento é baseada no balanço de massa:

$$M_{ads} = F_w \times \frac{M_{impureza, ciclo}}{\Delta q}$$

Onde:

- $M_{impureza, ciclo}$ é a massa de impureza (H₂O) a ser removida durante o tempo de ciclo (t_{ciclo}).
- Δq é a **Capacidade de Trabalho** do adsorvente (diferença de capacidade entre as pressões de adsorção e regeneração).
- F_w é o Fator de Quebra do Leito (fator de segurança, ≈ 1.5).

2.2 Modelagem de Custo Operacional (Consumo de Energia)

O modelo estima os custos operacionais do sistema.

- **Perda de Produto (Custo Primário):** Modela a vazão mássica de H_2 que é perdida no **gás de purga**, diretamente determinada pela **Recuperação de H_2 Desejada** (η_{rec}).

$$\dot{m}_{H_2, \text{ purga}} = \dot{m}_{H_2, \text{ entrada}} \times (1 - \eta_{rec})$$

- **Potência Elétrica ($P_{estimada}$):** Estima a potência (kW) necessária para operar a bomba de vácuo (se VPSA) ou para re-comprimir o gás de purga de volta à pressão de adsorção. Utiliza a equação de trabalho isentrópico de compressão, corrigida pela eficiência do equipamento (η_{comp}).

3 Dados de Entrada Necessários ($D_{entrada}$)

O modelo requer a inserção de dados do fluxo e parâmetros de design do sistema:

1. Dados do Fluxo de Entrada (Saída do Deoxo):

- Vazão Mássica Total (\dot{m}_{total}).
- Temperatura (T) e Pressão (P) de entrada (Pressão de Adsorção, P_{alta}).
- Fração Molar da Impureza Chave (H_2O , y_{H_2O}).

2. Parâmetros de Design e Operacionais:

- Pressão de Regeneração (P_{baixa}).
- Recuperação de H_2 Desejada (η_{rec}).
- Tempo de Ciclo Total (t_{ciclo}).
- **Capacidade de Trabalho (Δq)** do adsorvente para a impureza chave nas condições de P_{alta} e P_{baixa} .
- Fator de Quebra do Leito (F_w) e Eficiência do Compressor (η_{comp}).

4 Dados de Saída do Modelo (D_{saida})

Os resultados fornecidos pelo programa são os valores críticos de engenharia e custo:

Tabela 1: Dados de Saída Chave do Modelo Simplificado

Parâmetro	Símbolo	Relevância
Massa Total de Adsorvente	M_{ads}	Dimensionamento do Leito (Custo de Capital)
Volume Total do Leito	V_{ads}	Geometria das Colunas
Vazão de H_2 Perdido na Purga	$\dot{m}_{H_2, \text{ purga}}$	Custo Operacional (Perda de Produto)
Potência Estimada de Vácuo/Compressão	$P_{estimada}$	Consumo de Eletricidade (Custo Operacional)
Vazão Mássica de H_2 Produto	$\dot{m}_{H_2, \text{ produto}}$	Produção Líquida do Sistema

5 Observações

Este modelo é adequado para o dimensionamento conceitual e estimativa de custo. Para um dimensionamento detalhado e otimização do ciclo, um modelo dinâmico (resolução de EDPs) seria necessário.