

# DESENVOLVIMENTO DE MODELAGEM MATEMÁTICA PARA O PROCESSO DE PURIFICAÇÃO DE HIDROGÊNIO POR ADSORÇÃO EM COLUNAS DE RECHEIO POROSO



ISSN: 1984-3151

## DEVELOPMENT OF MATHEMATICAL MODELING FOR HYDROGEN PURIFICATION PROCESS BY ADSORPTION IN POROUS COLUMN

Paõlla Chrystine Pinheiro Patrício<sup>1</sup>; Márcio Ribeiro Vianna Neto<sup>2</sup>;  
Andréa Oliveira Souza da Costa<sup>3</sup>; Marcelo Cardoso<sup>4</sup>

- 1 Graduada em Engenharia Química. DEQ/UFMG, 2011. Mestre em Engenharia Química – UFMG. Belo Horizonte, MG. [paollachrys@ufmg.br](mailto:paollachrys@ufmg.br).
- 2 Mestre em Engenharia Química. DEQ/UFMG, 2016. Belo Horizonte, MG. [marciorneto@gmail.com](mailto:marciorneto@gmail.com).
- 3 Doutora em Engenharia Química. PEQ/COPPE/UFRJ, 2004. Professor adjunto do Departamento de Engenharia Química (DEQ) – UFMG. Belo Horizonte, MG. [andreacosta@deq.ufmg.br](mailto:andreacosta@deq.ufmg.br).
- 4 Doutor em Engenharia Química. UNICAMP, 1998. Professor titular do Departamento de Engenharia Química (DEQ) – UFMG. Belo Horizonte, MG. [mcardoso@deq.ufmg.br](mailto:mcardoso@deq.ufmg.br).

Recebido em: 19/03/2016 - Aprovado em: 06/11/2016 - Disponibilizado em: 30/11/2016

**RESUMO:** O Sistema de treinamento de Operadores (OTS) permite um treinamento sem riscos de acidentes e sem perdas de insumos e de tempo. A modelagem e simulação da operação associada aos dados de entrada no modelo, que são as variáveis manipuladas pelos operadores, geram resultados virtuais com comportamento similar aos que seriam gerados se o treinamento estivesse sendo feito nos equipamentos. O objetivo deste trabalho foi desenvolver um modelo matemático simples para o processo de purificação de hidrogênio em uma coluna de adsorção. Tal modelo poderá ser empregado na proposta de OTSs sem a necessidade de lidar com modelos com significativa complexidade matemática. O modelo proposto foi validado empregando-se dois casos reportados na literatura. Assim, foi possível concluir que esse descreve o processo de adsorção satisfatoriamente e poderá ser utilizado posteriormente no desenvolvimento de um OTS para todo o processo de purificação de hidrogênio.

**PALAVRAS-CHAVE:** Modelagem matemática. Adsorção por alternância de pressão.

**ABSTRACT:** Operator Training System allows training without risk of accident and no loss of material and time. Modeling and simulation of operation associated with inputs, which are manipulated variables by operators, generate virtual results with similar behavior to that would be generated if the training was being done on the equipment. The aim of this work was to develop a simple mathematical model for the adsorption process for hydrogen purification. This model can be used in the proposal for OTSs without having to handle models with significant mathematical complexity. The proposed model has been validated employing two reported cases in the literature. Thus, it was concluded that this model describes the adsorption process satisfactorily and it can be used for a future development of an OTS for the entire hydrogen purification process.

**KEYWORDS:** Mathematical modeling. Pressure Swing Adsorption.

## 1 INTRODUÇÃO

Os sistemas de treinamento de operadores (OTS – *Operator Training System*) é uma ferramenta que possibilita que operadores de processos sejam treinados e capacitados para operar determinada unidade industrial (BEQUETTE, 1998; NAZIR *et al.*, 2012). A modelagem e simulação dinâmica ajudam na construção desses sistemas de treinamento.

A modelagem matemática é capaz de representar fenômenos reais. Em alguns casos, tais modelos podem ser altamente complexos. Esses modelos são, em geral, resolvidos numericamente, o que necessita de tempo e de elevada capacidade computacional (INGHAM *et al.*, 2000; CHATURVEDI, 2010).

O desenvolvimento de uma modelagem simples, porém que represente de maneira satisfatória o sistema, é de grande importância quando se trata de criação de OTSs. Como são utilizadas com o propósito de treinamento, essas simulações têm que fornecer respostas rápidas para as decisões dos operadores de forma que estes aprendam as ações apropriadas a serem utilizadas no dia-a-dia de sua ocupação.

O objetivo deste trabalho é apresentar de forma detalhada o desenvolvimento de uma modelagem matemática para o processo de purificação de hidrogênio por adsorção com alternância de pressão em coluna de recheio. A proposta é testar o modelo proposto comparando-o com modelos previamente publicados em literatura aberta e que apresentam maior complexidade matemática (HWANG; JUN; LEE, 1995; JEE; KIM; LEE, 2001) e então, posteriormente, empregá-lo na construção de OTSs sem que seja necessário lidar com complexos modelos matemáticos. Ressalta-se nesse ponto que, embora o processo de purificação de hidrogênio por adsorção seja amplamente utilizado, o desenvolvimento detalhado de modelos matemáticos para este

processo não é comumente encontrado em literatura aberta. Assim, o trabalho é especialmente útil para os profissionais que desejam compreender os fenômenos inerentes ao sistema estudado.

## 2 PROCESSO DE PURIFICAÇÃO DE HIDROGÊNIO

Nas refinarias de petróleo, o hidrogênio ( $H_2$ ) é uma importante matéria-prima para diversas reações. Esse gás é obtido, principalmente, pela reforma a vapor do gás natural. A mistura gasosa proveniente desse processo, apesar de conter cerca de 50% de  $H_2$ , possui outros gases que são considerados impurezas e precisam ser removidos da mistura (FAHIM, 2012; DELGADO *et al.*, 2015).

O processo mais frequentemente utilizado para purificação do hidrogênio é a PSA (*Pressure Swing Adsorption*). A PSA, ou adsorção por alternância de pressão, é uma operação de transferência de massa da fase gasosa para a fase sólida a fim de se obter um produto gasoso de elevada pureza (FAHIM, 2012; DELGADO *et al.*, 2015; TAVAN; HOSSEINI; OLAZAR, 2015). A eficiência da adsorção depende do equilíbrio fluido-sólido e da taxa de transferência de massa. (McCABE; SMITH; HARRIOTT, 1993). No caso da purificação de  $H_2$ , o produto desse processo é uma mistura de cerca de 99% de hidrogênio (FAHIM, 2012; YANG, 2008).

O equipamento de PSA consiste em colunas constituídas de um meio poroso por onde a mistura gasosa sob alta pressão percola e as impurezas ficam retidas. Esse processo é chamado de adsorção. Após um determinado tempo de operação, a adsorção é interrompida para a remoção dos contaminantes desse meio. Nesse momento, um gás de purga sob baixa pressão percorre a coluna em sentido contrário ao da adsorção, removendo as impurezas adsorvidas. Esse processo é chamado de dessorção ou

regeneração do leito adsorvente. A diferença de capacidade de adsorção em diferentes pressões é dada pelas isotermas de adsorção (RUTHVEN; FAROOQ; KNAEBEL, 1994; TAVAN; HOSSEINI; OLAZAR, 2015).

Além das etapas de adsorção e dessorção, outras etapas podem ser incluídas no ciclo com o objetivo de melhorar a performance do processo, como o fornecimento e recebimento de equalização. Para um mesmo sistema, o aumento de etapas de equalização aumenta a recuperação do gás de interesse. Já um menor número de etapas de equalização aumenta a pureza do gás de saída do sistema (YAVARY; EBRAHIM; FALAMAKI, 2015).

O número de colunas que compõe o sistema de PSA pode variar a partir de duas. São usuais sistemas com 4, 5 e 6 colunas. (RUTHVEN; FAROOQ; KNAEBEL, 1994; LUBERTI *et al.*, 2014)

### 3 MODELAGEM MATEMÁTICA

Para o desenvolvimento da modelagem matemática foram realizadas as seguintes considerações:

- Os gases são considerados ideais;
- O escoamento é descrito pelo modelo de dispersão axial, ou seja, desconsideram-se variações radiais;
- A transferência de massa é representada pelo modelo de Força Motriz Linear;
- O equilíbrio gás-sólido é representado pelo modelo de Langmuir;
- Os efeitos difusivos da transferência de massa são desconsiderados;
- A velocidade intersticial no leito não varia ao longo de  $z$ .

Para um melhor entendimento do fenômeno de adsorção na coluna da PSA, é feita a dedução da equação do balanço de material. Para isso, considera-

se como volume de controle um volume de altura  $\partial z$ , como mostrado na Figura 1.

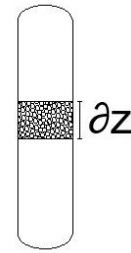


Figura 1 – Representação do volume de controle na coluna de adsorção.

Fonte – Próprio autor.

De uma forma geral, balanço de material por componente é dado pela Equação 1:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \left( \frac{\partial N_{ir}}{\partial r} + \frac{\partial N_{iz}}{\partial z} \right) V_{VC} = R_i \quad (1)$$

Na fase gasosa não existe a ocorrência de reações químicas. Logo, o termo do balanço referente à reação pode ser anulado (Equação (2)).

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \left( \frac{\partial N_{ir}}{\partial r} + \frac{\partial N_{iz}}{\partial z} \right) V_{VC} = 0 \quad (2)$$

Desconsiderando as variações radiais, conforme foi previamente apresentado nas considerações do modelo, tem-se a Equação 3.

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \left( \frac{\partial N_{iz}}{\partial z} \right) V_{VC} = 0 \quad (3)$$

O volume considerado na Equação 3 é representado somente pela fase gasosa presente nos poros do leito sólido. Logo, esse volume é o volume intersticial que é dado pela Equação 4.

$$V_L = \varepsilon V_{VC} = \varepsilon A dz \quad (4)$$

Como consequência, o volume de sólidos nesse mesmo volume de controle é dado pela Equação 5:

$$\begin{aligned} V_S &= V_{VC} - V_L = V_{VC} - \varepsilon V_{VC} = \\ &= (1 - \varepsilon) V_{VC} = (1 - \varepsilon) A dz \end{aligned} \quad (5)$$

O primeiro termo diferencial da Equação 3 representa acúmulo da espécie  $i$  no volume de controle. Esse

acúmulo está presente tanto na fase gasosa quanto sólida.

A concentração do componente  $i$  na fase gasosa é dada pela Equação 6:

$$C_i = \frac{n_i}{V_L} = \frac{n_i}{\varepsilon V_{VC}} \quad (6)$$

Sendo assim, tem-se, nas Equações 7 e 8, que:

$$n_i = C_i \varepsilon V_{VC} \quad (7)$$

e

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (C_i \varepsilon V_{VC}) = \varepsilon V_{VC} \frac{\partial C_i}{\partial t} \quad (8)$$

A concentração do componente  $i$  na fase sólida é dada pela Equação 9:

$$\bar{q}_i = \frac{n_i}{m_s} = \frac{n_i}{\rho_p V_s} = \frac{n_i}{\rho_p (1 - \varepsilon) V_{VC}} \quad (9)$$

Logo, na Equações 10 e 11, tem-se que:

$$n_i = \bar{q}_i \rho_p (1 - \varepsilon) V_{VC} \quad (10)$$

e

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\bar{q}_i \rho_p (1 - \varepsilon) V_{VC}) = \rho_p (1 - \varepsilon) V_{VC} \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t} \quad (11)$$

O segundo termo diferencial da Equação 3 representa a variação do fluxo molar total da espécie  $i$ , no sentido do escoamento, em relação a um referencial fixo. Esse fluxo é composto por uma parte difusiva e uma parte convectiva, segundo as Equações 12 e 13:

$$N_{iz} = J_i + C_i u = -D_L \frac{\partial C_i}{\partial z} + C_i u \quad (12)$$

Logo:

$$\frac{\partial N_{iz}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left( -D_L \frac{\partial C_i}{\partial z} + C_i u \right) = -D_L \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} + \frac{\partial u C_i}{\partial z} \quad (13)$$

Sendo assim, substituindo as Equações 4, 8, 11 e 13 na Equação 3, tem-se a Equação 14:

$$\left( \varepsilon V_{VC} \frac{\partial C_i}{\partial t} + \rho_p (1 - \varepsilon) V_{VC} \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t} \right) + \left( -D_L \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} + \frac{\partial u C_i}{\partial z} \right) \varepsilon V_{VC} = 0 \quad (14)$$

Dividindo a Equação (14) por  $\varepsilon V_{VC}$ , o resultado, na Equação 15, é:

$$\left( \frac{\partial C_i}{\partial t} + \rho_p \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon} \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t} \right) + \left( -D_L \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} + \frac{\partial u C_i}{\partial z} \right) = 0 \quad (15)$$

Rearranjando a Equação 15, tem-se a Equação 16 que representa o balanço molar da espécie  $i$  na fase gasosa.

$$-D_L \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} + \frac{\partial u C_i}{\partial z} + \frac{\partial C_i}{\partial t} + \rho_p \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon} \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t} = 0 \quad (16)$$

Aplicando-se as considerações apresentadas anteriormente, é possível desconsiderar o primeiro termo da Equação 16, pois os efeitos difusivos da transferência de massa são desconsiderados, e a velocidade  $u$  pode sair de dentro da derivada, uma vez que esta é considerada constante ao longo de  $z$ , resultando na Equação 17:

$$u \frac{\partial C_i}{\partial z} + \frac{\partial C_i}{\partial t} + \rho_p \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon} \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t} = 0 \quad (17)$$

Rearranjando a Equação 17, tem-se, na Equação 18:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -u \frac{\partial C_i}{\partial z} - \rho_p \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon} \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t} \quad (18)$$

Essa é a equação final que representa o balanço molar da espécie  $i$  na fase gasosa no elemento poroso unidimensional de extensão  $dz$ .

Outra forma de escrever a Equação 18 baseia-se na fração molar das espécies (Equação 19).

$$\frac{\partial y_i}{\partial t} = -u \frac{\partial y_i}{\partial z} - \rho_p \frac{RT}{P} \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon} \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t} \quad (19)$$

O termo  $\partial \bar{q}_i / \partial t$  representa a transferência de massa entre o gás e o sólido descrita pelo modelo de Força Motriz Linear, dada pela Equação 20:

$$\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t} = k_i (q_i^* - q_i) \quad (20)$$

Descrevendo o equilíbrio gás-sólido pelo Modelo de Langmuir, a quantidade da espécie  $i$  adsorvida no equilíbrio é dada pela Equação 21.

$$q_i^* = \frac{q_i^{sat} b_i P_i}{1 + \sum_{j=1}^n b_j P_j} \quad (21)$$

Os termos  $q_i^{sat}$  e  $b_i$  são obtidos a partir de correlações empíricas e são dados pela Equações 22 e 23.

$$q_i^{sat} = a_{1,i} + \frac{a_{2,i}}{T} \quad (22)$$

$$b_i = b_{0,i} e^{(b_{1,i}/T)} \quad (23)$$

Os parâmetros  $a_{1,i}$ ,  $a_{2,i}$ ,  $b_{0,i}$  e  $b_{1,i}$  são específicos para cada componente do gás e para cada leito adsorvente.

Para este trabalho, os componentes do gás de alimentação considerados foram hidrogênio ( $H_2$ ), metano ( $CH_4$ ), monóxido de carbono ( $CO$ ) e dióxido de carbono ( $CO_2$ ). No entanto, o  $H_2$  é considerado inerte. Sendo assim, para o cálculo da fração molar do  $H_2$  utiliza-se a seguinte restrição (Equação 24):

$$y_{H_2} = 1 - y_{CH_4} - y_{CO} - y_{CO_2} \quad (24)$$

### 3.1 RESOLUÇÃO DO SISTEMA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARCIAIS

O modelo proposto consiste na Equação 19 para cada um dos  $n-1$  componentes do sistema (a saber:  $CH_4$ ,  $CO$  e  $CO_2$ ), o que resulta em um sistema de equações diferenciais parciais (EDPs).

Para resolver essas EDPs, o software MATLAB é utilizado, empregando-se o Método das Diferenças Finitas para discretizar o domínio em  $z$ , transformando o modelo em um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs). As EDOs são, então, resolvidas utilizando-se a função ODE45 do MATLAB.

A Equação 19 reescrita utilizando-se o Método das Diferenças Finitas se torna (Equação 25):

$$\frac{\partial y_i}{\partial t} = -u \left( \frac{y_i(j) - y_i(j-1)}{\Delta z} \right) - \quad (25)$$

$$- \rho_p \frac{R T (1 - \epsilon)}{P} \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t}$$

sendo que  $j$  é a posição em  $z$  atual e  $j-1$  é a posição em  $z$  imediatamente anterior, como apresentado na Figura 2.

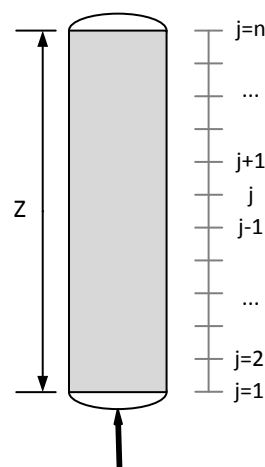


Figura 2 – Representação da discretização do domínio em  $z$ .

Fonte – Próprio autor.

Assim, a Equação 25 é utilizada para o cálculo das frações molares dos componentes adsorvidos ( $CH_4$ ,  $CO$  e  $CO_2$ ). Para o cálculo da fração molar do componente inerte ( $H_2$ ) é utilizada a derivada temporal da Equação (24) representada na Equação 26.

$$\frac{dy_{H_2}}{dt} = - \frac{dy_{CH_4}}{dt} - \frac{dy_{CO}}{dt} - \frac{dy_{CO_2}}{dt} \quad (26)$$

As condições de contorno e inicial utilizadas na simulação são (Equações 27, 28, 29, 30 e 31):

$$y_i = y_{i,alim}, \text{ para } \forall t \text{ e } z=0 \quad (27)$$

$$y_{H_2} = 1, \text{ para } t=0 \text{ e } z \neq 0 \quad (28)$$

$$y_{CH_4, CO, CO_2} = 0, \text{ para } t=0 \text{ e } z \neq 0 \quad (29)$$

$$q_i = 0, \text{ para } t=0 \text{ e } \forall z \quad (30)$$

$$\frac{\partial y_i}{\partial t} = 0, \text{ para } \forall t \text{ e } z=0 \quad (31)$$

## 4 ESTUDO DE CASOS PARA VALIDAÇÃO

O primeiro caso testado (CASO A) foi extraído do trabalho de Hwang, Jun e Lee (1995). Em seguida, foi testado o CASO B que foi extraído de Jee, Kim e Lee (2001).

### 4.1 CASO A: ADSORÇÃO DE UM COMPONENTE EM UM TIPO DE LEITO

O artigo de Hwang, Jun e Lee (1995) apenas uma espécie adsorvida (CO<sub>2</sub>) em leito com um tipo de adsorvente (carvão ativado).

O modelo matemático utilizado por Hwang, Jun e Lee (1995) é composto por um sistema das EDPs de balanço molar por componente e da EDP de balanço molar global. Esse modelo diferencia do modelo desenvolvido, pois este utiliza a restrição proposta pela equação (24) ao invés do uso da equação de balanço molar global. Além disso, o modelo dos autores considera a velocidade intersticial variável ao longo da coluna enquanto o modelo proposto considera essa velocidade invariável ao longo de z. A velocidade intersticial considerada (velocidade média) é igual a 0,0045 m/s.

Apesar do modelo de Hwang, Jun e Lee considerar variações de temperatura ao longo da coluna, ele apresenta também um resultado para o modelo isotérmico. Esse resultado é comparado ao modelo desenvolvido por este trabalho.

Os parâmetros utilizados na simulação estão listados da Tabela 1 (HWANG; JUN; LEE, 1995).

Tabela 1

Parâmetros para simulação extraídos da literatura.

Parâmetro	Valor	Unidade
L	0,5	m
diam	3,7	cm
y <sub>alim</sub> (CO <sub>2</sub> )	0,25	-
y <sub>alim</sub> (H <sub>2</sub> )	0,75	-
T	298	K
P	15	atm
ε	0,43	-
ρ	0,80	g/cm <sup>3</sup>
a <sub>1</sub> (CO <sub>2</sub> )	-5,0x10 <sup>-3</sup>	-
a <sub>2</sub> (CO <sub>2</sub> )	3,09	-
b <sub>0</sub> (CO <sub>2</sub> )	8,1x10 <sup>-4</sup>	-
b <sub>1</sub> (CO <sub>2</sub> )	2200	-
k (CO <sub>2</sub> )	0,02	1/s

Para os parâmetros de Langmuir, Hwang, Jun e Lee (1995) empregam para  $q_i^{sat}$  e  $b_i$  as unidades mol/g<sub>s</sub> e 1/atm, respectivamente.

Fonte – Próprio autor.

### 4.2 CASO B: ADSORÇÃO DE UM COMPONENTE EM LEITO MULTICAMADAS

O artigo de Jee, Kim e Lee (2001) considera o caso com adsorção de uma espécie (CO) em um leito de dois tipos de adsorvente (carvão ativado (CA) e zeólita 5A(Z5A)).

O modelo matemático utilizado por Jee, Kim e Lee (2001) se diferencia do modelo desenvolvido também pelo uso da restrição dada pela equação (24) no lugar do balanço molar global. Além disto, esse modelo considera o modelo de Langmuir-Freundlich para representar o equilíbrio entre as fases gás-sólido. Os parâmetros para a equação de Langmuir são, então, extraídos de Rahimpour *et al.* (2013).

Os parâmetros utilizados na simulação estão listados da Tabela 2 (JEE; KIM; LEE, 2001). Além disso, a velocidade intersticial média é estimada em 0,0021m/s.

Tabela 2

Parâmetros para simulação extraídos da literatura.

Parâmetro	Valor	Unidade
L	1	m
diam	0,0371	m
$y_{alim} (CO)$	0,3	-
$y_{alim} (H_2)$	0,7	-
T	299	K
P	10	atm
$\varepsilon (CA)$	0,61	-
$\varepsilon (Z5A)$	0,65	-
$\rho (CA)$	850	kg/m <sup>3</sup>
$\rho (Z5A)$	1160	kg/m <sup>3</sup>
$k_{CA} (H_2)$	0,7	-
$k_{CA} (CO)$	0,15	-
$k_{Z5A} (H_2)$	0,7	-
$k_{Z5A} (CO)$	0,063	-

Fonte – Próprio autor.

## 5 RESULTADOS

A validação do modelo matemático desenvolvido neste trabalho foi feita por meio de dados da literatura.

### 5.1 CASO A: ADSORÇÃO DE UM COMPONENTE EM UM TIPO DE LEITO

O comportamento simulado para o processo neste trabalho é comparado ao comportamento simulado por Hwang, Jun e Lee (1995) na Figura 3. O eixo horizontal representa a razão entre a posição em  $z$  e a altura total  $L$  e o eixo vertical representa a razão entre a fração molar do  $CO_2$  e a fração molar do  $CO_2$  na alimentação. É possível observar, analisando os resultados apresentados na Figura 3, que o comportamento simulado neste trabalho se aproxima do comportamento simulado por Hwang, Jun e Lee (1995).

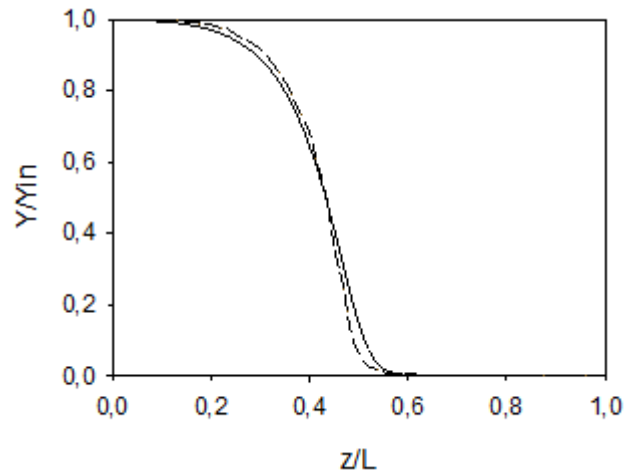


Figura 3 – Gráfico comparativo da simulação do CASO A (linha contínua) com resultado de Hwang, Jun e Lee (1995) (linha tracejada) para o perfil de concentração do  $CO_2$  no tempo de 5min.

Fonte – Próprio autor.

Por meio da simulação apresentada na Figura 4, é possível observar as concentrações tanto de  $CO_2$  quanto de  $H_2$ , em função do tempo, para o topo da coluna, ou seja,  $z = L$ . Como esperado, ocorre uma diminuição na concentração do hidrogênio ao longo do tempo e o gás que sai da coluna se torna mais rico em dióxido de carbono. Ainda de acordo com os resultados apresentados na Figura 4, o estado estacionário é atingido com cerca de 900 s de simulação, no qual o gás de saída da coluna tem mesma composição que o gás de alimentação e o leito adsorvente encontra-se saturado.

No gráfico da Figura 5, é possível observar os perfis de concentração de  $H_2$  e de  $CO_2$  ao longo da coluna de adsorção para os tempos de simulação de 100, 300, 500 e 700s. Ressalta-se nesse ponto que Hwang, Jun e Lee (1995) não apresentam informações similares às apresentadas na Figura 4 e na Figura 5.

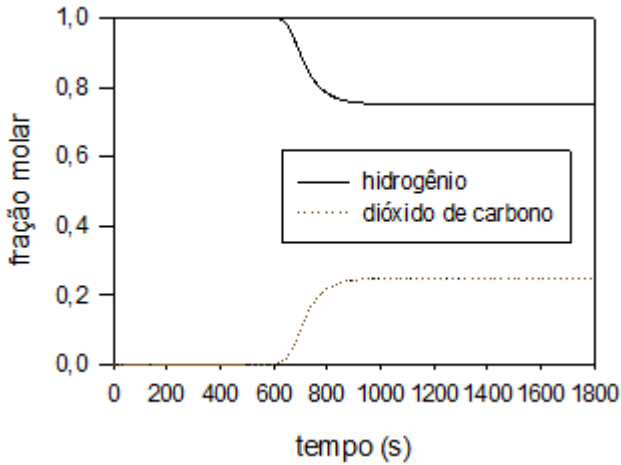


Figura 4 – Perfil da concentração de H<sub>2</sub> e CO<sub>2</sub> no topo da coluna gerado pela simulação ao longo do tempo. Fonte – Próprio autor.

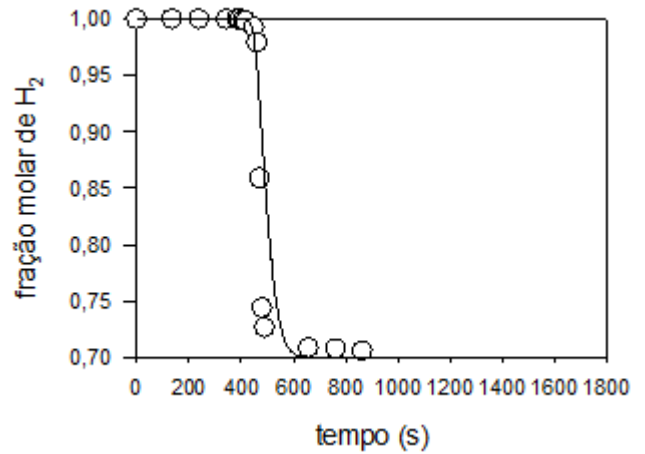


Figura 6 – Comparação entre dados experimentais (círculos) e a simulação do CASO B (linha contínua). Fonte – Próprio autor.

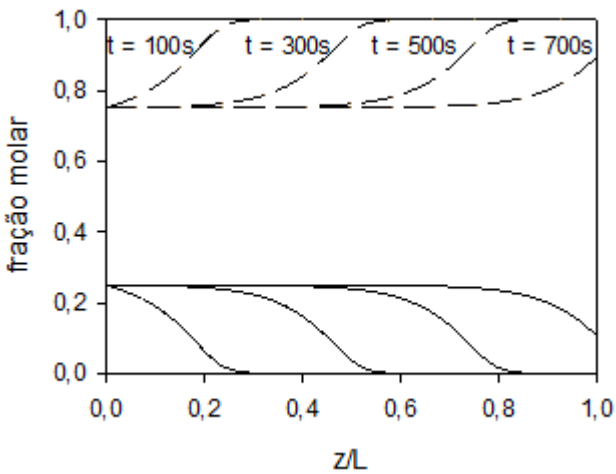


Figura 5 – Perfis de concentração de H<sub>2</sub> (linha tracejada) e CO<sub>2</sub> (linha contínua) ao longo da coluna para os tempos de 100, 300, 500 e 700s (da esquerda para direita). Fonte – Próprio autor.

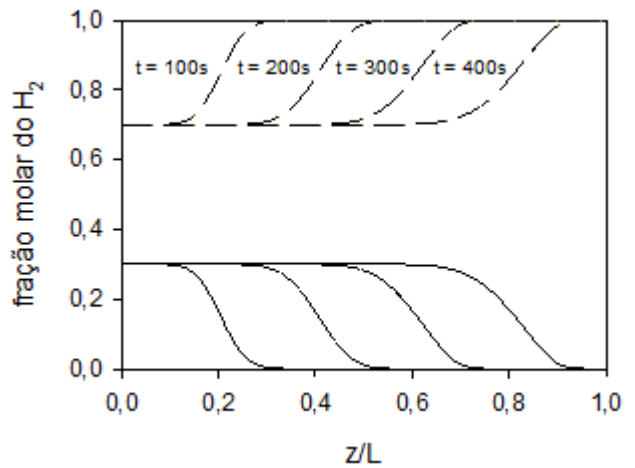


Figura 7 – Perfis de concentração de H<sub>2</sub> (linha tracejada) e CO<sub>2</sub> (linha contínua) ao longo da coluna para os tempos de 100, 200, 300 e 400s (da esquerda para direita). Fonte – Próprio autor.

## 5.2 CASO B: ADSORÇÃO DE UM COMPONENTE EM LEITO MULTICAMADAS

O gráfico da Figura 6 mostra o resultado da simulação comparado aos dados experimentais obtido por Jee, Kim e Lee (2001).

Na Figura 7, é possível observar os perfis de concentração de H<sub>2</sub> e de CO<sub>2</sub> ao longo da coluna de adsorção nos tempos de simulação de 100, 200, 300 e 400 s.

## 6 CONCLUSÕES

O processo de purificação de hidrogênio por meio da adsorção em coluna com recheio poroso foi analisado e simulado neste trabalho.

Um modelo matemático, que descreve uma única coluna, foi detalhadamente desenvolvido neste estudo. Todas as considerações realizadas na proposta das equações foram expostas.



O modelo foi resolvido considerando-se duas situações operacionais distintas. Para os dois casos analisados, os resultados simulados reproduzem satisfatoriamente sistemas reportados em literatura aberta. Tal resultado torna possível concluir que o modelo matemático proposto é capaz de descrever satisfatoriamente o processo. Logo, esse modelo simplificado é apropriado para construção de um OTS, que consiste na simulação de todas as colunas sistema de purificação de hidrogênio concomitantemente.

## AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à FAPEMIG e à CAPES pelo apoio financeiro.

## NOTAÇÃO

A	área da secção transversal	m <sup>2</sup>
a <sub>1,i</sub>	parâmetro de Langmuir	-
a <sub>2,i</sub>	parâmetro de Langmuir	-
b <sub>0,i</sub>	parâmetro de Langmuir	-
b <sub>1,i</sub>	parâmetro de Langmuir	-
b <sub>i</sub>	constante da isoterma de Langmuir	1/atm
C <sub>i</sub>	Concentração molar do componente i	mol/m <sup>3</sup>
diam	diâmetro interno da coluna	m

D <sub>L</sub>	coeficiente de dispersão axial	m <sup>2</sup> /s
k <sub>i</sub>	coeficiente de transferência de massa	1/s
L	altura da coluna	m
m <sub>s</sub>	massa de sólido	kg
n <sub>i</sub>	número de mols	mol
N <sub>i</sub>	fluxo molar do componente i	mol/(s m <sup>2</sup> )
P	pressão total	Pa
P <sub>i</sub>	pressão parcial do componente i	atm
q <sub>i</sub>	quantidade molar do componente i no sólido	mol/kg
q <sub>i</sub> <sup>*</sup>	quantidade molar de equilíbrio do componente i no sólido	mol/kg
q <sub>i</sub> <sup>sat</sup>	quantidade molar de saturação do componente i no sólido	mol/kg
r	raio da coluna	m
R <sub>i</sub>	taxa de reação química	mol/s
R	constante universal dos gases	J/(mol K)
t	tempo	s
T	temperatura	K
u	velocidade intersticial	m/s
V <sub>L</sub>	volume livre	m <sup>3</sup>
V <sub>s</sub>	volume os sólidos	m <sup>3</sup>
V <sub>vc</sub>	volume total do volume de controle	m <sup>3</sup>
y <sub>i</sub>	fração molar do componente i na fase gasosa	-
z	posição ao longo da altura da coluna	m
ε	Porosidade	-
ρ	densidade do sólido	kg/m <sup>3</sup>

## REFERÊNCIAS

BEQUETTE, B. W. **Process Dynamics: Modeling, Analysis and Simulation**. Upper Saddle River: Prentice Hall PTR, 1998. 621 p. ISBN 0-13-206889-3.

CHATURVEDI, D. K. **Modeling and simulation of systems using MATLAB and Simulink**. Boca Raton: CRC Press, 2010. Disponível em <<http://197.14.51.10:81/pmb/CHIMIE/Modeling%20and%20Simulation%20of%20Systems%20Using%20MATLAB%20and%20Simulink.pdf>>. ISBN 978-1-4398-0672-2.

DELGADO, J. A. *et al.* Hydrogen recovery from off-gases with nitrogen-rich impurity by pressure swing adsorption using CaX and 5A zeolites. **Adsorption**, v. 21, 107 – 123, 2015. ISSN 0929-5607.

DELGADO, J. A. *et al.* Hydrogen recovery from off-gases with nitrogen-rich impurity by pressure swing adsorption using CaX and 5A zeolites. **Adsorption**, v. 21, 107 – 123, 2015. ISSN 0929-5607.

FAHIM, M. A. *et al.* **Introdução ao Refino de Petróleo**. Rio de Janeiro: Elsevier, 2012. 457 p. ISBN 978-85-352-5114-2.

HWANG, K. S.; JUN, J. H.; LEE, W. K. Fixed-bed adsorption for bulk component system. Non-equilibrium, non-isothermal and non-adiabatic model. **Chemical Engineering Science**, v. 50, n. 5, 813 – 825, 1995. ISSN 0009-2509.

INGHAM, J. *et al.* **Chemical Engineering Dynamics: An introduction to modelling and computer simulation**. 2<sup>a</sup> Ed. Weinheim: Wiley, 2000. 646 p. ISBN 3-527-29176-6.

JEE, J. G.; KIM, M. B.; LEE, C. H. Adsorption characteristics of hydrogen mixtures in a layered bed: binary, ternary, and five-component mixtures. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 40, 868 – 878, 2001. ISSN 0888-5885.

LUBERTI, M. *et al.* Design of a H<sub>2</sub> PSA for cogeneration of ultrapure hydrogen and power at an advanced integrated gasification combined cycle with pre-combustion capture. **Adsorption**, v. 20, 511 – 524, 2014. ISSN 0929-5607.

MCCABE, W. L.; SMITH, J. C.; HARRIOTT, P. **Unit Operations of Chemical Engineering**. 5<sup>a</sup> Ed. Singapura: McGraw-Hill Science, 1993. 1130 p. ISBN 0-07-044844-2.

NAZIR, S. *et al.* Performance comparison of different training methods for industrial operators. Human Factors: a view from an integrative perspective. **Proceedings HFES Europe Chapter Conference Toulouse**, 2012. ISBN 978-0-945289-44-9.

RAHIMPOUR, M. R. *et al.* The enhancement of hydrogen recovery in PSA unit of domestic petrochemical plant. **Chemical Engineering Journal**, v. 226, 444 – 459, jun. 2013. ISSN 1385-8947.

RUTHVEN, D. M.; FAROOQ, S.; KNAEBEL, K. S. **Pressure Swing Adsorption**. New York: VCH Publishers, Inc., 1994. 352 p. ISBN 1-56081-517-5.

TAVAN, Y.; HOSSEINI, S. H.; OLAZAR, M. A note on an integrated process of methane steam reforming in junction with pressure-swing adsorption to produce pure hydrogen: mathematical modelling. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 54, 12937 – 12947, 2015. ISSN: 1520-5045.

YANG, S. Hydrogen separation by multi-bed pressure swing adsorption of synthesis gas. **Adsorption**, Boston, v. 14, n. 4-5, 583 – 590, out. 2008. ISSN 0929-5607.

YAVARY, M.; EBRAHIM, H. A.; FALAMAKI, C. The effect of number of pressure equalization steps on the performance of pressure swing adsorption process. **Chemical Engineering and Processing**, v. 87, 35 – 44, 2015. ISSN 0255-2701.