

MODELOS PARA PREDIÇÃO DE ENSAIOS DINÂMICOS PARA A CAPTURA DE CO₂ VISANDO PROCESSOS CÍCLICOS DE SEPARAÇÃO POR MUDANÇA DE TEMPERATURA

XXXVII Encontro de Iniciação Científica

Pedro Gabriel Carvalho Fernandes, Diana Cristina Silva de Azevedo

A simulação de processos é uma etapa que vem sendo cada vez mais utilizada na Engenharia Química, tanto para uma melhor compreensão dos fenômenos que regem o sistema quanto para o projeto e otimização de processos industriais. Assim, o projeto executado buscou a simulação adequada de um processo de separação de uma mistura gasosa contendo CO₂, envolvendo adsorção, eluição e regeneração, para a sua possível utilização em unidades de TSA. Primeiramente, partiu-se de uma análise geral do modelo matemático anterior, através dos balanços de massa, energia e momentum, e da compreensão da ferramenta solver a ser utilizada nas simulações, o software comercial gPROMS, para um entendimento dos fatores que mais influenciavam a curva de breakthrough, isto é, a evolução da concentração de CO₂ à saída da coluna. Então, foi feita uma busca na literatura de constantes e variáveis, e uma análise mais minuciosa do modelo, em que se percebeu que as variáveis da equação de Langmuir, que tratam da quantidade de adsorbato a ser adsorvida e as constantes de transferência de massa são as variáveis que mais afetam o comportamento da curva. Porém, foi observado um comportamento distante do experimental quando utilizadas as variáveis de Langmuir calculadas a partir dos dados experimentais com a ferramenta Solver do Excel. Após otimização das variáveis, verificou-se que, mesmo com uma diferença entre erros de 0.004% nas isotermas de adsorção, as as curvas de breakthrough ainda apresentavam uma diferença média de 5.44%. Assim foram necessárias iterações manuais para encontrar os valores ideais. Por fim, chegou-se a um comportamento adequado da curva, validado a partir dos experimentos de gravimetria anteriores, porém estes resultados podem ser aperfeiçoados, com a utilização de uma ferramenta Solver mais aprimorada para as variáveis de Langmuir e com mais informações de algumas etapas do processo para serem implementadas, como na regeneração. O bolsista agradece ao CNPQ pelo apoio financeiro.

Palavras-chave: simulação. separação. TSA. modelagem.