



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO EM ENGENHARIA  
QUÍMICA



# Modelagem e simulação das etapas de uma unidade de PSA: Estudo de Caso

*Autor: Matheus Macedo Parisotto*

*Orientador: Jorge Otávio Trierweiler*

*Coorientador: Leonardo Mandler De Marco*

Porto Alegre, fevereiro de 2024



Autor: Matheus Macedo Parisotto

# **Modelagem e simulação das etapas de uma unidade de PSA: Estudo de Caso**

*Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à COMGRAD/ENQ da Universidade Federal do Rio Grande do Sul como parte dos requisitos para a obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química*

Orientador: Jorge Otávio Trierweiler  
Coorientador: Leonardo Mandler De Marco

Banca Examinadora:

Profa. Dra. Luciane Ferreira Trierweiler – UFRGS

Eng. Herbert Campos Gonçalves Teixeira – Petrobras

Enga. Maíra Andrade Rodrigues – Petrobras

Porto Alegre

2024

## AGRADECIMENTOS

Agradeço profundamente aos meus pais, pelo apoio constante e incentivo ao longo desta trajetória. Aos meus irmãos, pela amizade e por serem uma fonte constante de inspiração. Aos meus amigos, pelo suporte e momentos de descontração.

Ao meu orientador, prof. Jorge Trierweiler, pela sugestão do tema e pelas inúmeras oportunidades de aprendizado proporcionadas durante a execução deste trabalho.

Ao meu coorientador, Leonardo De Marco, pelo apoio inestimável, especialmente na parte de programação em Python, que foi essencial para a realização deste trabalho.

## RESUMO

A tecnologia de PSA (*Pressure Swing Adsorption*) há muitos anos tem sido amplamente utilizada nas indústrias para purificação de gases. Um exemplo notável é a produção de hidrogênio altamente puro, cuja utilidade abrange uma variedade de aplicações em diversos setores industriais.

Este estudo se concentrou na análise de uma unidade específica de PSA, a qual é composta por seis leitos de adsorção operando simultaneamente. O objetivo principal consistiu na modelagem das diversas etapas do processo e na posterior validação dos resultados obtidos por meio de simulação dinâmica. A modelagem foi realizada com base nas equações para escoamento em válvulas de controle, que surgem a partir da equação de Bernoulli com perda de carga, e na obtenção do balanço de massa, analisando-se cada etapa do processo separadamente. A partir disso, a simulação foi realizada por meio de implementação computacional dos modelos, nos quais foram utilizados dados reais de abertura das válvulas. Dessa forma, tornando possível uma comparação entre os dados obtidos diretamente por medidores de pressão na planta industrial e os resultados adquiridos por meio do modelo matemático. Para fins de comparação, simularam-se diferentes cenários, desde a obtenção do perfil de pressão para um único vaso em um ciclo que engloba todas as etapas do processo, até a visualização das pressões de ambos os vasos simultaneamente.

Os resultados obtidos demonstraram uma boa aderência do modelo em relação ao comportamento de cada etapa, no que se refere à dinâmica esperada. Desta forma, observou-se que, para o processo como um todo, o erro relativo entre os dados da planta e os obtidos pelo modelo foi de até 7,5%, evidenciando a representatividade do modelo para a compreensão do processo e a representação do sincronismo entre os leitos durante a operação. No entanto, no que diz respeito à obtenção dos valores de pressão com relativa exatidão, o modelo revelou-se menos representativo, apresentando desvios significativos em relação aos valores esperados. Esta consideração final destaca várias oportunidades de melhoria no modelo simplificado adotado, o que possibilitaria abordar novos aspectos relevantes no processo PSA, como a otimização de seus principais parâmetros e a identificação prévia de falhas em válvulas de controle.

**Palavras-chave:** *Pressure Swing Adsorption, Unidade PSA, Modelagem de Processos, Simulação Dinâmica, Válvulas de Controle.*

## ABSTRACT

For many years, Pressure Swing Adsorption (PSA) technology has been widely employed in industries for gas purification. A notable example is the production of highly pure hydrogen, with applications spanning various industrial sectors.

This study focused on the analysis of a specific PSA unit comprising six adsorption beds operating simultaneously. The main objective was to model the various stages of the process and subsequently validate the results through dynamic simulation. The modeling was conducted based on equations for flow through control valves, derived from the Bernoulli's Equation with pressure drop, and mass balance determination, analyzing each stage of the process separately. Subsequently, the simulation was executed through computational implementation of the models, utilizing real valve opening data. This allowed for a concise comparison between data obtained directly from pressure sensors in the industrial plant and results acquired through the mathematical model. Different scenarios were simulated for comparison, ranging from obtaining the pressure profile for a single vessel in a cycle encompassing all process stages to visualizing pressures from both vessels simultaneously.

The results demonstrated a good fit of the model to the expected dynamics of each stage. For the overall process, the relative error between plant data and model results was up to 7.5%, highlighting the model's effectiveness in understanding the process and representing the synchronization between beds during operation. However, concerning the accurate acquisition of pressure values, the model proved to be less effective, showing significant deviations from expected values. This final consideration underscores various opportunities for improvement in the adopted simplified model, enabling the addressing of new relevant aspects in the PSA process, such as optimizing its key parameters and pre-identifying control valve faults.

**Keywords:** *Pressure Swing Adsorption, PSA Unit, Process Modeling, Dynamic Simulation, Control Valves.*

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 2.1:</b> Fluxograma simplificado de uma UGH.....	2
<b>Figura 2.2:</b> Etapa 1 e 3 - Adsorção em alta pressão e purga; Etapa 2 e 4 – Pressurização com carga até a pressão de adsorção e despressurização até a pressão de purga.....	4
<b>Figura 2.3:</b> Perfil típico de pressão com o tempo.....	5
<b>Figura 2.4:</b> Representação de um gêmeo digital de uma unidade de PSA fictícia.....	6
<b>Figura 3.1:</b> Fluxograma simplificado do processo de purificação de hidrogênio.....	7
<b>Figura 3.2:</b> Representação esquemática dos seis leitos de adsorção da unidade.....	11
<b>Figura 3.3:</b> Diagrama sequencial de etapas no processo de PSA – Estado dos vasos ao longo do ciclo operacional.....	12
<b>Figura 3.4:</b> Fluxograma do ciclo completo para o vaso V-11.....	13
<b>Figura 3.5:</b> Representação esquemática das 5 linhas da unidade.....	14
<b>Figura 3.6:</b> Variação de pressão em cada etapa – Vaso V-11.....	15
<b>Figura 3.7:</b> Perfil de pressão sincronizado de todos os vasos na unidade de PSA ao longo do ciclo operacional.....	15
<b>Figura 4.1:</b> Representação ilustrativa de um vaso com fluxo de gás ao longo do eixo z.....	16
<b>Figura 4.2:</b> Representação esquemática da etapa de equalização entre dois vasos.....	18
<b>Figura 4.3:</b> Representação esquemática das pressões ao longo da tubulação entre os vasos.....	19
<b>Figura 4.4:</b> Representação esquemática da etapa de purga e promover purga entre dois vasos.....	22
<b>Figura 4.5:</b> Representação esquemática da etapa de adsorção.....	24
<b>Figura 4.6:</b> Representação esquemática da etapa de blowdown de um vaso.....	26
<b>Figura 4.7:</b> Representação esquemática da etapa de pressurização com produto de um vaso.....	27
<b>Figura 4.8:</b> Representação esquemática das pressões ao longo da tubulação na etapa de pressurização com produto.....	28

<b>Figura 5.1:</b> Comportamento temporal das válvulas de controle na unidade de PSA.....	30
<b>Figura 5.2:</b> Índices de identificação das válvulas da unidade.....	31
<b>Figura 5.3:</b> Fluxograma lógico do chaveamento da unidade de PSA.....	32
<b>Figura 5.4:</b> Fluxograma de implementação com entradas, processamento e saídas.....	33
<b>Figura 6.1:</b> Comparação entre o perfil de pressão simulado pelo modelo e o perfil obtido com dados reais da planta para o vaso V-11 ao longo de um ciclo completo.....	36
<b>Figura 6.2:</b> Perfil de pressão real do vaso V-11 e abaixo abertura da válvula X <sub>14</sub> durante um mesmo intervalo durante o ciclo operacional.....	37
<b>Figura 6.3:</b> Comparação temporal das fases de purga, evidenciando a discrepância entre os resultados do modelo e os dados reais.....	38
<b>Figura 6.4:</b> Comportamento de abertura da válvula X <sub>15</sub> ao longo do ciclo operacional.....	38
<b>Figura 6.5:</b> Comparativo entre múltiplos vasos ao longo da operação contínua.....	39
<b>Figura 6.6:</b> Perfil de pressão dos seis vasos da unidade ao longo de um ciclo completo.....	40

## LISTA DE TABELAS

<b>Tabela 2.1</b> Esquema das etapas do ciclo de Skarstrom.....	3
<b>Tabela 3.1:</b> Descrição das etapas do processo de PSA.....	9
<b>Tabela 3.2:</b> Modalidades operacionais da unidade, variações e configurações de processo....	11
<b>Tabela 3.3:</b> Tempo estimado para cada etapa no ciclo de PSA.....	13
<b>Tabela 3.4:</b> Linhas, válvulas e etapas da unidade de PSA.....	13
<b>Tabela 3.5:</b> Características das válvulas da unidade.....	14
<b>Tabela 5.1:</b> Parâmetros constantes utilizados no cálculo do modelo.....	30
<b>Tabela 5.2:</b> Parâmetros constantes usados como <i>inputs</i> no cálculo do modelo.....	34
<b>Tabela 6.1:</b> Valores de pressão medidos e simulados por etapa (Vaso V-11).....	41
<b>Tabela 6.2:</b> Valores do erro médio absoluto (EMA) para cada etapa.....	42
<b>Tabela 6.3:</b> Erro percentual por etapa.....	42
<b>Tabela 6.4:</b> Erro médio absoluto global para todos os vasos.....	43

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

PSA: *Pressure Swing Adsorption*

UGH: Unidade de Geração de Hidrogênio

HDT: Unidade de Hidrotratamento

RK4: Método de Runge-Kutta de quarta ordem

EDOs: Equações Diferenciais Ordinárias

DAE: *Differential Algebraic Equations*

SDCD: *Sistema Digital de Controle Distribuído*

EMA: Erro Médio Absoluto

## LISTA DE SÍMBOLOS

$g$ : Aceleração gravitacional

$\rho$ : Densidade absoluta

$\rho_w$ : Massa específica da água

$G_f$ : Densidade relativa

$u$ : Velocidade

$f_p$ : Perda de Carga

$K_f$ : Fator de atrito de Moody

$P$ : Pressão

$V$ : Volume

$T$ : Temperatura

$Q$ : Vazão volumétrica

$\dot{m}$ : Vazão mássica

$A$ : Área da seção transversal

$z$ : Fator de compressibilidade do gás

$M$ : Massa molar

$Y$ : Fator de Expansão

$x$ : Razão entre a queda de pressão através da válvula e a sua pressão na entrada

$x_t$ : Fator de queda de pressão crítica

$C_v$ : Coeficiente de vazão da válvula

$n$ : Quantidade de matéria (expressa em mol)

$m$ : Massa

$\theta$ : Fração de abertura efetiva da válvula

$k$ : Razão entre calores específicos ( $C_p/C_v$ )

## SUMÁRIO

1	Introdução	1
2	Revisão Bibliográfica	2
2.1	Funcionamento de uma Unidade de Geração de Hidrogênio (UGH)	2
2.2	Ciclo de Skarstrom	3
2.3	PSA para Purificação de Hidrogênio em Unidades Industriais	4
2.4	Modelagem Dinâmica e Simulação de Processos	6
3	Estudo de Caso	7
3.1	Visão Geral do Processo	7
3.2	Detalhamento do Processo de PSA	8
3.3	Descrição da Unidade de PSA	11
4	Modelagem Dinâmica	16
4.1	Hipóteses e Simplificações	16
4.2	Equação da Válvula de Controle	17
4.3	Balanço de Massa	18
4.3.1	Equalização	18
4.3.2	Purga – Promover Purga	22
4.3.3	Adsorção	24
4.3.4	Descarga (blowdown)	26
4.3.5	Pressurização com Produto	27
5	Simulação – Método e Ferramentas	29
5.1	<i>Software</i>	29
5.2	Conjunto de dados	29
5.2.1	Abertura das válvulas de Controle	29
5.2.2	Parâmetros Constantes	30
5.3	Metodologia	31
5.3.1	Lógica de Chaveamento	31
5.3.2	Implementação das Equações do Modelo	33
5.4	Estratégias de Simulação	35
5.4.1	Condições Iniciais	35
5.4.2	Tempo das Etapas e Resolução do Sistema	35
5.5	Abordagens de Simulação	35
6	Resultados e Discussões	36

---

6.1	Análise Gráfica Comparativa entre Simulação e Dados de Planta	36
6.2	Análise Numérica dos Desvios entre Simulação e Dados de Planta	40
7	Conclusões e Trabalhos Futuros	44
	REFERÊNCIAS	45
	APÊNDICE A	46
	ANEXO A	48
	ANEXO B	50



## 1 Introdução

O hidrogênio desempenha um papel vital nos processos industriais, sendo uma matéria-prima essencial em diversas aplicações, destacando-se pela sua versatilidade e contribuição para a sustentabilidade. A importância do hidrogênio na indústria, especialmente em refinarias, é destacada pelo seu papel fundamental em processos como o hidrotreatamento (HDT). No hidrotreatamento, o hidrogênio é utilizado para remover impurezas indesejadas, como enxofre e nitrogênio, dos produtos derivados do petróleo, aprimorando a qualidade dos produtos finais, em atendimento à legislação ambiental vigente.

Neste contexto, destacam-se as Unidades de Geração de Hidrogênio (UGH), que estão baseadas no processo de reforma a vapor, envolvendo a reação de hidrocarbonetos com vapor d'água, possibilitando a produção de hidrogênio. Esse método, embora amplamente utilizado, não garante a pureza desejada do hidrogênio, uma vez que impurezas residuais podem persistir no produto final.

Desse modo, o PSA (*“Pressure Swing Adsorption”*) emerge como uma tecnologia fundamental para atingir níveis de pureza mais elevados. No processo de PSA, adsorventes seletivos são utilizados para separar moléculas de gás com base em suas afinidades químicas. Esse método permite a obtenção de hidrogênio com pureza superior a 99%, atendendo aos rigorosos padrões de qualidade exigidos em diversas aplicações industriais, incluindo os processos de hidrotreatamento em refinarias, onde catalisadores podem ser desativados na presença de contaminantes.

O processo de PSA envolve a operação de múltiplos vasos simultaneamente, em que o sincronismo de suas operações é intermediado por meio de válvulas de controle. Essas válvulas estabelecem as conexões entre os leitos de adsorventes, assegurando uma transição adequada entre as etapas do processo. Essa coordenação minuciosa é essencial para garantir a eficácia da PSA, possibilitando uma produção de hidrogênio consistente com os elevados padrões de pureza exigidos pela indústria.

O estudo em questão tem como objetivo a obtenção de modelos matemáticos capazes de descrever a dinâmica da variação de pressão dos vasos durante cada etapa de uma unidade de PSA, que conta com 6 vasos operantes. A partir de simulações com dados reais de planta será possível acompanhar a evolução da pressão dos vasos, proporcionando assim uma oportunidade para validar os resultados obtidos pelo modelo.

Além disso, este estudo abre novas possibilidades para explorar conceitos inovadores na planta investigada, buscando aplicações práticas mais amplas. Isso inclui a capacidade de detecção de falhas em válvulas e otimização do processo, permitindo melhorias substanciais em termos de desempenho e eficácia operacional.

## 2 Revisão Bibliográfica

Neste capítulo, será apresentada uma introdução concisa aos principais conceitos que servem de base para este estudo. Explorando aspectos fundamentais do processo de PSA, com ênfase no âmbito da modelagem e simulação de processos.

### 2.1 Funcionamento de uma Unidade de Geração de Hidrogênio (UGH)

A UGH compreende diferentes configurações adaptadas para cada refinaria e carga processada, apresentando uma abordagem clássica que inclui uma seção de pré-tratamento, um reformador primário, um reator de deslocamento e um sistema de purificação PSA.

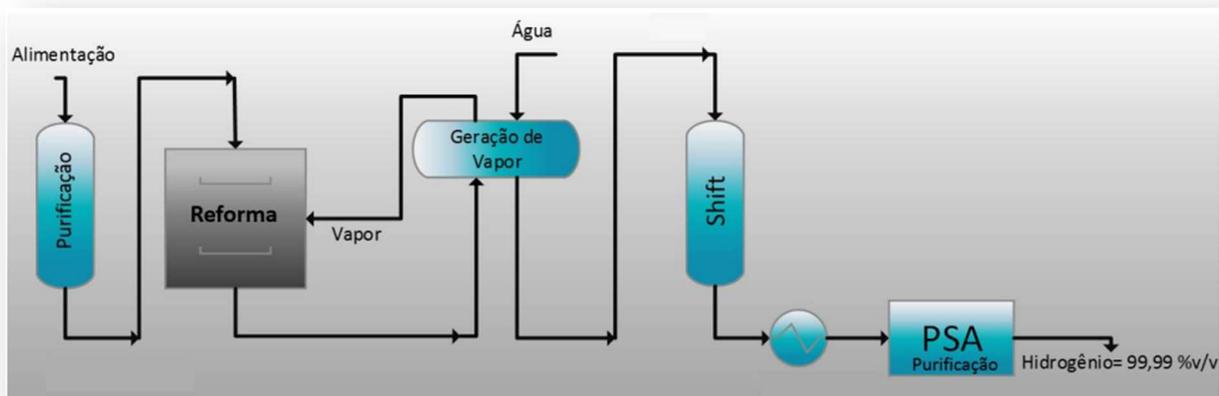


Figura 2.1: Fluxograma simplificado de uma UGH (Silva, 2017).

A seguir será feito um breve resumo de cada etapa de uma UGH:

- **Seção de pré-tratamento:** Adequação da carga para atender às limitações de contaminantes, como enxofre, cloro e olefinas. Sua importância se deve a remoção de contaminantes que impactam o desempenho de catalisadores subsequentes.
- **Reforma a Vapor:** Mistura do vapor superaquecido com a carga e alimentação no reformador. Seu objetivo é realizar a reação de reforma para a produção de hidrogênio, sendo para isso utilizado catalisadores a base de Níquel em tubos aquecidos.
- **Reator de Deslocamento (*Shift*):** Consiste em um reator de leito fixo onde ocorre a reação exotérmica de deslocamento. Nele ocorre a reação de CO com vapor d'água produzindo CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub> através de um catalisador a base de óxidos de ferro, zinco e cromo. Dessa forma, tem-se um aumento significativo na produção de hidrogênio e redução de CO residual.

Após o reator de *Shift*, os gases resultantes são resfriados para condensação do vapor antes de serem direcionados à unidade de PSA, que é o foco central deste estudo. A seguir, será apresentada uma revisão abrangente dessa etapa específica do processo, destacando sua importância na produção de hidrogênio puro.

## 2.2 Ciclo de Skarstrom

BARG (2000), descreveu o ciclo de Skarstrom como uma abordagem simplificada para compreender os ciclos empregados nos atuais processos industriais que fazem uso da tecnologia de adsorção por pressões alternadas (PSA).

Originalmente, a aplicação do sistema criado por Skarstrom era separação de O<sub>2</sub> e N<sub>2</sub> do ar. Esse sistema era composto de duas colunas e sua operação envolvia 4 etapas: Adsorção, Despressurização ou *Blowdown*, Purga (Dessorção) e Repressurização (YANG, 1997; RUTHVEN, FAROOQ e KNAEBEL, 1994, apud PATRÍCIO, 2016).

O sequenciamento das etapas do ciclo de Skarstrom pode ser resumido da seguinte forma:

- I) O vaso A está em adsorção a alta pressão, ao passo que o vaso B se encontra na fase de purga. Durante esta etapa de purga, uma fração da corrente de produto, caracterizada por ser rica no componente menos adsorvido, flui através do vaso B, o qual anteriormente passou por uma despressurização (*blowdown*).
- II) O vaso A passa por uma despressurização até atingir a pressão de purga, ao mesmo tempo em que o vaso B é submetido à pressurização com carga até atingir a pressão de adsorção.
- III) Equivalente a etapa I, porém o vaso A está em purga, enquanto o vaso B está na etapa de adsorção em alta pressão.
- IV) O vaso A está pressurizando com carga, enquanto o vaso B está na etapa de *blowdown*. Neste caso, os vasos estão se preparando parando as etapas de adsorção em alta pressão e purga, respectivamente. Posteriormente, o sistema retorna à etapa I, iniciando um novo ciclo.

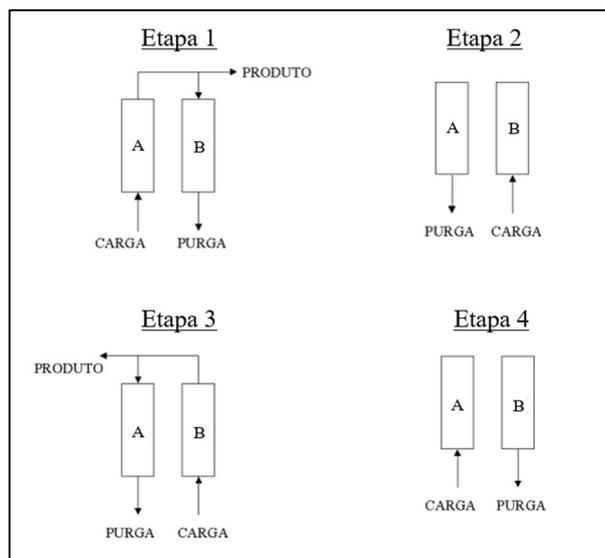
O motivo de realizar a purga dos vasos se deve ao fato de que uma parcela dos componentes que estão fortemente adsorvidos no leito, não conseguem dessorver após a etapa de despressurização. Sendo assim, com a passagem de uma corrente rica no composto fracamente adsorvido (produto), tem-se a redução da pressão parcial dos componentes fortemente adsorvidos na fase gás, facilitando a sua liberação.

As etapas do processo podem ser visualizadas de maneira esquematizada na Tabela 2.1 e ilustrada pela Figura 2.2.

**Tabela 2.1:** Esquema das etapas do ciclo de Skarstrom.

	Etapa 1	Etapa 2	Etapa 3	Etapa 4
Vaso A	Adsorção	<i>Blowdown</i>	Dessorção	Repressurização
Vaso B	Dessorção	Repressurização	Adsorção	<i>Blowdown</i>

Fonte: PATRÍCIO, 2016



**Figura 2.2:** Etapa 1 e 3 - Adsorção em alta pressão e purga; Etapa 2 e 4 – Pressurização com carga até a pressão de adsorção e despressurização até a pressão de purga. Adaptado de BARG, 2000.

O ciclo de Skarstrom, apesar de sua simplificação, apresenta características fundamentais que permanecem nos sistemas mais complexos. O tempo total do ciclo pode ser determinado com base em dois intervalos distintos: o período de duração das etapas 1 e 3, e o período correspondente às etapas 2 e 4. Essa característica continua a ser observada em instalações avançadas de purificação de hidrogênio. No entanto, é importante observar que nessas unidades específicas, o tempo de adsorção geralmente não necessita coincidir exatamente com o tempo de purga.

Embora o ciclo de Skarstrom seja uma abordagem mais antiga, seus princípios são frequentemente adaptados e incorporados em modelos mais complexos que são utilizados nas modernas plantas de purificação de gases. As etapas adicionais, como equalização e promover purga, são exemplos de elementos que foram posteriormente incluídos para otimizar o desempenho do processo.

Da mesma forma, hoje são encontrados sistemas de PSA com número de vasos variando entre 2 e 16. No entanto, os sistemas mais comuns apresentam 4, 5 ou 6 colunas (RUTHVEN, FAROOQ e KNAEBEL, 1994; LUBERTI et al., 2014, apud PATRÍCIO, 2016). Essa ideia surgiu como forma de garantir um fluxo ininterrupto de produto, viabilizando a operação do processo em modo contínuo.

### 2.3 PSA para Purificação de Hidrogênio em Unidades Industriais

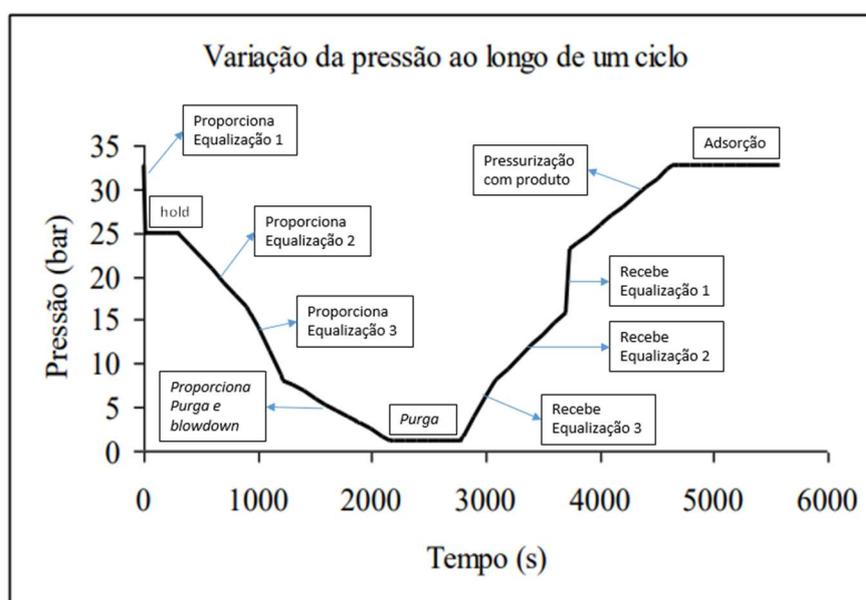
A purificação de hidrogênio consiste em uma das maiores aplicações dos processos de adsorção a pressões alternadas em escala industrial (MALEQ E FAROOQ, 1998 *apud* BARG, 2000). Este produz um gás com pureza final de hidrogênio maior que 99,9% (FAHIM, AL-SAHHAF e ELKILANI, 2012; YANG et al., 2008; RUTHVEN, 1984, apud PATRÍCIO, 2016).

Modificações posteriores ao ciclo de Skarstrom tornaram esse sistema capaz de oferecer uma economia energética importante para sua viabilidade econômica, a partir da utilização

de etapas de equalização de pressão e repressurização. A alternância entre essas etapas, classificadas como adsorção e regeneração (dos leitos), é responsável pela separação dos gases, resultando em correntes de hidrogênio de alta pureza (TRINDADE, 2023).

Outra modificação significativa em relação ao ciclo de Skarstrom reside na inclusão de mais leitos de adsorção operando simultaneamente. Segundo BARG (2000), a incorporação de múltiplos leitos em unidades de PSA destinadas à purificação de hidrogênio é justificada, uma vez que o maior investimento inicial é compensado pelo aumento na recuperação de hidrogênio.

Nesse sentido, é frequente encontrar sistemas de purificação de hidrogênio contendo seis vasos de adsorção. Sendo que diversas configurações de ciclos podem ser desenvolvidas para um sistema que opera nesse molde. A imagem abaixo representa um perfil típico de um vaso operando nesse sistema:



**Figura 2.3:** Perfil típico de pressão com o tempo.  
Adaptado de BARG, 2000.

O perfil mostrado na Figura 2.3 é uma representação para um leito de adsorção num sistema contendo 6 vasos e 12 etapas, as quais seriam, respectivamente, adsorção à alta pressão, proporciona equalização de pressões 1, *hold*, proporciona equalização de pressões 2, proporciona equalização de pressões 3, proporciona purga, *blowdown*, purga, recebe equalização de pressões 3, recebe equalização de pressões 2, recebe equalização de pressões 1 e repressurização com produto. Sendo que a etapa de *hold*, neste caso, está presente para fins de sincronismo entre os leitos. Além disso, nas etapas de pressão variável, a abertura das válvulas é usualmente controlada de forma que a pressão nos vasos varie linearmente com o tempo (BARG, 2000).

## 2.4 Modelagem Dinâmica e Simulação de Processos

A modelagem de um processo dinâmico desempenha um papel essencial na compreensão e otimização de operações industriais ao longo do tempo. Enquanto os modelos de estado estacionário são adequados para situações estáveis, processos inerentemente dinâmicos ou fases transitórias demandam abordagens que capturem sua complexidade temporal. A modelagem dinâmica proporciona uma visão aprofundada dos aspectos variáveis ao longo do tempo, sendo especialmente crucial para entender e antecipar fenômenos como inicialização, desligamento e variações operacionais.

Segundo Matzopoulos (2011), para ser útil na análise de projeto e operação, um modelo deve ter capacidade preditiva para que, por exemplo, dado um novo conjunto de condições de alimentação, operação ou parâmetros de projeto, ele calcule taxas revisadas precisas para os valores de saída de interesse. Para ser preditivo, um modelo precisa levar em consideração todos os fenômenos que afetam significativamente os valores de saída de interesse, com o grau de precisão necessário. Na melhor das hipóteses, um modelo é capaz de prever o comportamento real com precisão em uma ampla gama de condições sem reajustar os parâmetros do modelo, tornando possível explorar o espaço de projeto ou operação de maneira consistente e abrangente e ter confiança nos resultados.

No âmbito da simulação, destaca-se o conceito de gêmeos digitais, uma tecnologia que replica digitalmente sistemas físicos, oferecendo representações virtuais precisas e dinâmicas. Esses gêmeos digitais, alimentados por dados em tempo real, proporcionam uma compreensão abrangente e interativa dos processos industriais. Essa interconexão entre simulação e gêmeos digitais não apenas aprimora a compreensão dos processos industriais, mas também facilita a tomada de decisões embasadas, a predição de falhas e a implementação eficiente de estratégias de melhoria na operação.

Os gêmeos digitais podem ser cruciais no monitoramento e diagnóstico de falhas no processo de PSA. Algoritmos de controle e estratégias de otimização podem ser testados e validados no gêmeo digital antes de ser implementado em operações de plantas em tempo real (Martins et al., 2021; Núñez et al., 2022). Diferentes cenários de falhas podem ser simulados para gerar um conjunto de dados que poderá ser utilizado no treinamento de modelos baseados em técnicas de inteligência artificial, que poderão ser usados para reconhecer padrões operacionais normais e anômalos.



**Figura 2.4:** Representação de um gêmeo digital de uma unidade de PSA fictícia.  
Fonte: do autor.

### 3 Estudo de Caso

Nesta seção, é fornecida uma visão geral da unidade e do processo de PSA, que está detalhado no manual da unidade de geração de hidrogênio usada como referência neste trabalho. O objetivo principal consiste em desenvolver um modelo capaz de descrever as variações de pressão em cada leito de adsorção, capturando a dinâmica intrínseca das etapas e do ciclo de PSA. Compreender o processo em sua totalidade é indispensável, uma vez que a validação do modelo será conduzida por meio da comparação dos resultados de simulação com dados operacionais obtidos da unidade real. A seguir, apresentam-se detalhes sobre a unidade específica em foco.

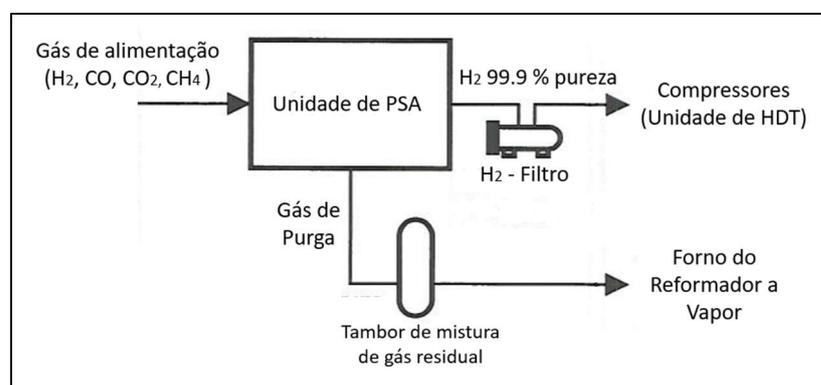
A unidade de PSA a ser analisada integra-se à Unidade de Geração de Hidrogênio (UGH), responsável pela produção de hidrogênio puro destinado a unidades de hidrotreatamento (HDT). Este sistema faz parte do parque de uma refinaria no Brasil, localizada no Rio de Janeiro.

#### 3.1 Visão Geral do Processo

Um reformador a vapor, que emprega gás natural como matéria-prima, gera um gás enriquecido em hidrogênio com, aproximadamente, 72% de pureza, contendo também compostos como monóxido de carbono, dióxido de carbono, metano e água. Esse gás é conduzido para a unidade de PSA, cuja finalidade é purificar o hidrogênio atingindo uma pureza maior que 99,9% molar. Ao passar pela unidade de PSA, duas correntes gasosas serão geradas, uma de produto ( $H_2$  puro) e outra contendo o gás de purga ( $H_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH_4$  e  $H_2O$ ).

O hidrogênio purificado na PSA é, então, descarregado a uma pressão de aproximadamente 20,5 bar para dois compressores. Esses compressores são responsáveis por fornecer hidrogênio puro na pressão de processo necessária para a unidade de HDT. No entanto, antes de entrar nos compressores, o hidrogênio passa por um filtro projetado para remover os resíduos de adsorvente proveniente dos leitos de adsorção. Isso é crucial para evitar que esses resíduos entrem nos compressores, mantendo a integridade do sistema.

Já as impurezas adsorvidas saem na corrente de gás de purga, onde serão homogeneizadas no vaso de mistura de gás residual. O gás residual que sai da unidade da unidade PSA é fornecido a uma pressão média de aproximadamente 0,5 bar para o forno do reformador a vapor. O esquema ilustrado na Figura 3.1 apresenta uma visão macro do processo.



**Figura 3.1:** Fluxograma simplificado do processo de purificação de hidrogênio.

Fonte: Manual da PSA avaliada.

### 3.2 Detalhamento do Processo de PSA

O processo de adsorção por pressão alternada (PSA) em UGHs é baseado em fenômenos de adsorção física, em que compostos altamente voláteis com baixa polaridade, como o hidrogênio, são essencialmente não adsorvíveis quando comparados com moléculas como CO, CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> e hidrocarbonetos. Portanto, a maioria das impurezas presentes em uma corrente contendo hidrogênio podem ser adsorvidas seletivamente, obtendo, assim, hidrogênio com elevada pureza.

De maneira geral, o processo de PSA, funciona alternando entre as fases de adsorção e dessorção, sendo esta última também chamada de etapa de regeneração:

- **Adsorção:** Nesta fase o gás de alimentação é pressurizado e passa através de uma coluna de adsorventes. As impurezas no gás de alimentação são adsorvidas, isto é, retidas na superfície sólida dos adsorventes, enquanto o hidrogênio passa através da coluna.
- **Dessorção ou Regeneração:** Nesta fase há a remoção de moléculas adsorvidas da superfície sólida. Para isso, esta etapa ocorre com a redução da pressão do leito, reduzindo a carga residual das impurezas o máximo possível.

Este processo ocorre a temperatura ambiente, não havendo a necessidade de calor para o processo de regeneração. Variações mínimas na temperatura são provocadas exclusivamente pela liberação de calor durante a adsorção e pela perda de calor durante a dessorção e despressurização. Isto leva a uma vida útil extremamente longa do material adsorvente, não havendo a desativação significativa deste por efeitos térmicos.

Além disso, uma unidade de PSA é projetada para purificar o hidrogênio bruto proveniente da alimentação de maneira contínua. Embora o processo de PSA externamente apareça como um processo contínuo, internamente este é um processo descontínuo periódico, o qual consiste em uma série de etapas ocorrendo em paralelo. Em geral, cada vaso de adsorção executa um ciclo de PSA específico que é repetido de forma cíclica. Um ciclo de PSA é composto por duas fases básicas: adsorção e regeneração. A fase de regeneração em si é uma cadeia de fases subsequentes, consistindo em:

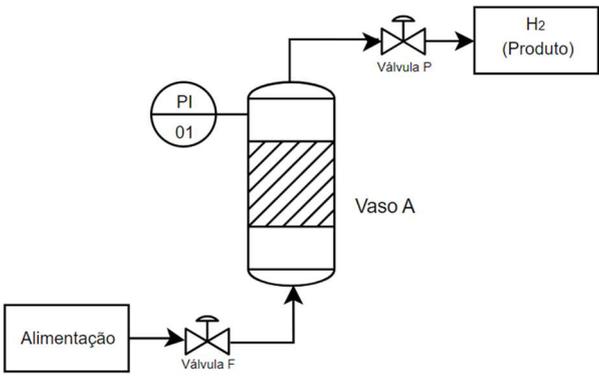
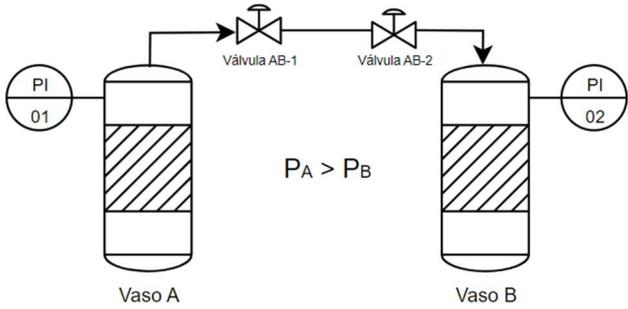
- 1) **EXPANSÃO, PROMOVER PURGA e DESCARGA** – Etapas que correspondem a uma transição de pressão do sistema, da pressão de adsorção (pressão máxima) até a pressão de purga (pressão mínima);
- 2) **PURGA** – Ocorre na pressão mínima de processo;
- 3) **PRESSURIZAÇÃO** – Etapa responsável pela restauração da pressão do sistema até a pressão de adsorção;

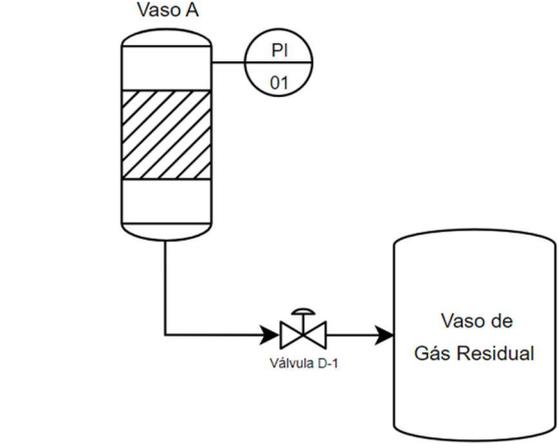
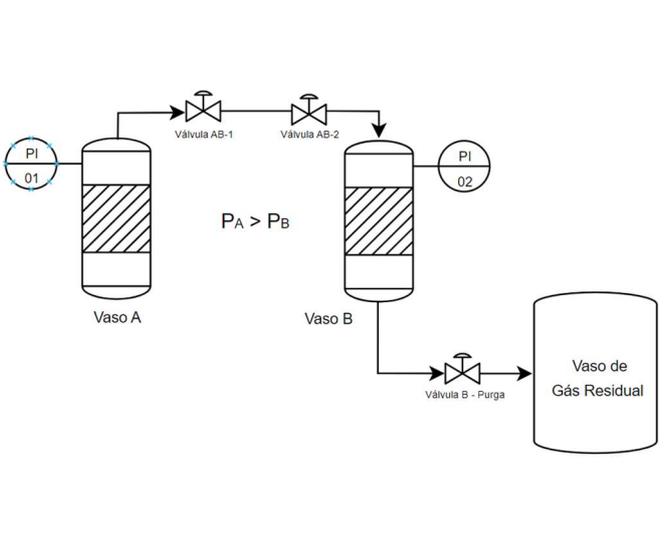
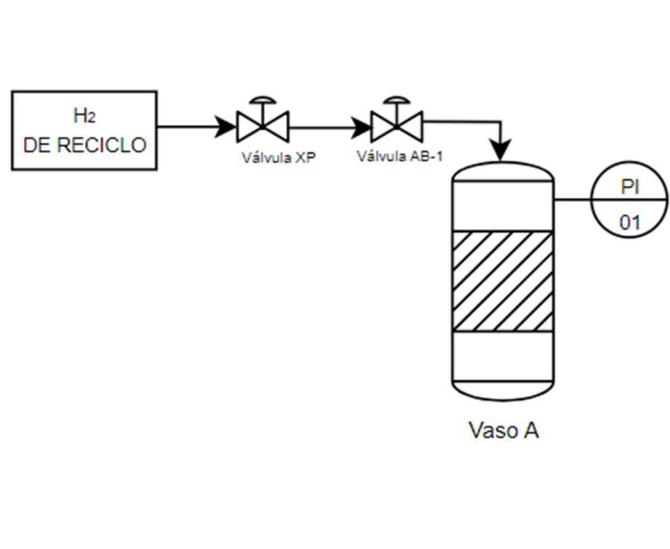
Cabe ressaltar que a etapa de expansão utiliza o hidrogênio remanescente, subsequente à conclusão da etapa de adsorção em alta pressão, a fim de pressurizar um leito secundário, o qual já passou pela fase de purga. Este procedimento é frequentemente designado como a etapa de equalização.

Esta etapa de equalização, representou um grande avanço em relação ao ciclo de Skarstrom, pois permitiu economizar energia e tornar a adsorção por pressões alternadas mais viável economicamente e industrialmente.

Assim, em um ciclo completo um único vaso de adsorção irá passar pelas fases de adsorção, promover equalização, promover purga, descarga, purga, receber equalização e pressurização com produto, respectivamente. O chaveamento entre válvulas é intermediado por meio de um sistema de controle que garanta o sequenciamento do processo. Isso implica que, enquanto um ou mais leitos realizam a adsorção, outros leitos estão constantemente em fase de regeneração, assegurando a substituição do leito adsorvente antes que sua capacidade de adsorção seja totalmente utilizada. A Tabela 3.1 descreve e ilustra as etapas do processo de PSA.

**Tabela 3.1:** Descrição das etapas do processo de PSA.

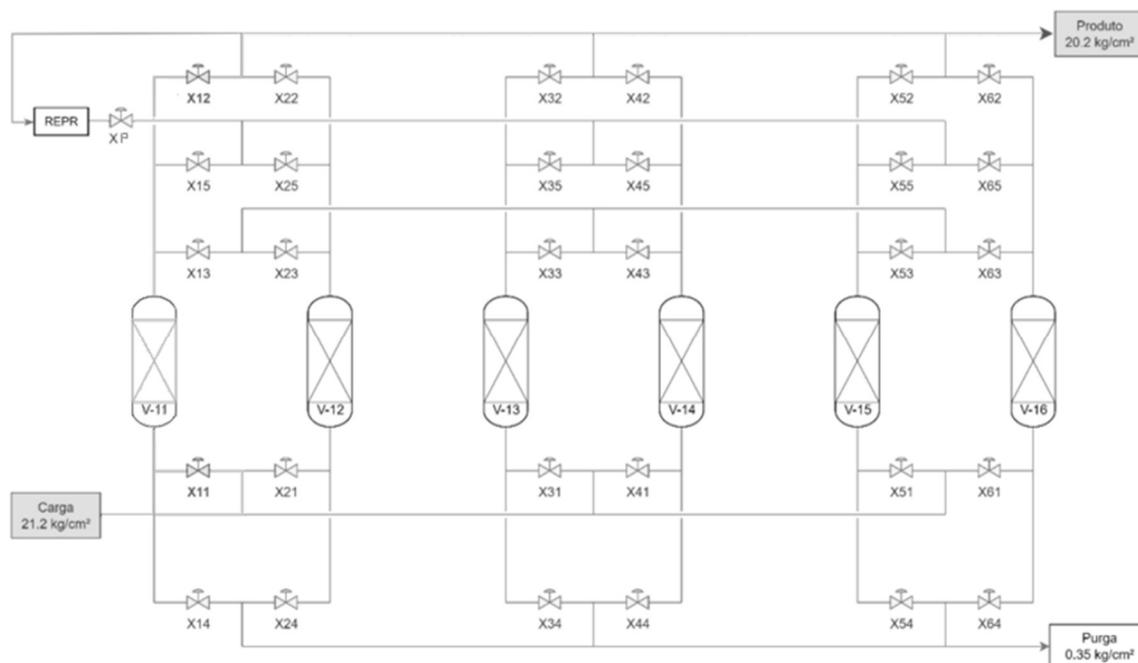
Fluxograma	Descrição
	<p><b>ADSORÇÃO:</b> Etapa em que ocorre a separação das impurezas, as quais ficam retidas no leito adsorvente, enquanto o hidrogênio purificado segue para ser fornecido as HDTs. A entrada de alimentação se dá na extremidade inferior do vaso, enquanto o produto é retirado na extremidade superior. Essa etapa opera na pressão máxima, tipicamente 20 bar.</p>
	<p><b>EQUALIZAÇÃO:</b> Nesta etapa um leito que passou pela etapa de adsorção realiza sua expansão, promovendo a pressurização de outro leito que saiu da etapa de purga e está se preparando para a etapa de adsorção em alta pressão. No fluxograma ao lado, considera-se que o vaso A está “Promovendo Equalização”, enquanto o vaso B está “Recebendo Equalização”.</p>

	<p><b>DESCARGA:</b></p> <p>Etapa final do processo de despressurização. Seu objetivo é garantir que o vaso atinja a pressão necessária para a etapa subsequente, a purga. Para isso, uma válvula na seção inferior do vaso de adsorção é aberta, permitindo que o gás escape para o vaso de gás residual. Durante este processo, as impurezas adsorvidas começam a se desorver. Etapa de menor pressão igual a 0,5 bar.</p>
	<p><b>PROMOVER PURGA e PURGA:</b></p> <p>Um vaso que está despressurizando descarrega o hidrogênio remanescente da etapa de adsorção em outro vaso que está na pressão de purga, dessa forma, possibilitando a desorção do leito. No fluxograma ao lado, tem-se que o vaso A está promovendo a purga do vaso B. O gás de purga (gás residual) do leito B é direcionado a um vaso de maior volume que encaminhará estes compostos desorvidos para queima.</p>
	<p><b>PRESSURIZAÇÃO COM PRODUTO:</b></p> <p>Uma corrente de produto volta como reciclo para pressurizar o vaso até a pressão necessária para a etapa seguinte, a adsorção. Esta é a etapa final do processo de repressurização, pois apesar de o vaso receber equalização de outros tanques previamente, ainda é necessário garantir que o sistema esteja na pressão máxima para ocorrência da adsorção. A alimentação ocorre no topo da coluna.</p>

Fonte: elaborado pelo autor.

### 3.3 Descrição da Unidade de PSA

A configuração da unidade de PSA em estudo, compreende a operação de seis leitos de adsorção, evidenciando uma corrente de entrada, uma corrente de produto ( $H_2$ ) e uma corrente de gases residuais, também conhecida como "tail gas" ou gás de purga. A figura 3.2 ilustra o conjunto da unidade.



**Figura 3.2:** Representação esquemática dos seis leitos de adsorção da unidade.  
Adaptado de TRINDADE, 2023.

O desenho fundamental do procedimento da unidade visa a operação de seis leitos de adsorção em serviço. No entanto, é importante reconhecer que eventuais falhas em algum instrumento de campo ou mau funcionamento de válvulas de controle podem ocorrer. Neste cenário, o sistema de controle retira o vaso defeituoso de operação, assegurando a continuidade operacional da planta com cinco ou quatro vasos em pleno funcionamento. O número mínimo de vasos para operação é quatro. A Tabela 3.2 exemplifica os diferentes modos de operação da unidade.

**Tabela 3.2:** Modalidades operacionais da unidade, variações e configurações de processo.

Modos de Operação			
Leitos em Operação	6	5	4
Leitos em Adsorção	2	1	1
Nº de Etapas no Ciclo	18	15	8
Vazão molar $H_2$ (kmol/h)	1040	780	780
% Recuperação $H_2$	85	85	84

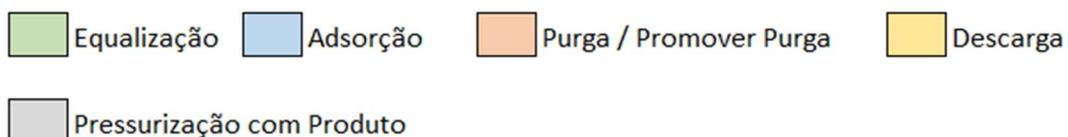
Fonte: Manual da PSA avaliada.

A escolha de operar a unidade com até 4 leitos parte da premissa de otimização entre a recuperação máxima e a vazão mássica de produto. Inicialmente, com os 6 leitos em operação,

atinge-se um percentual de recuperação elevado, em torno de 85%, acompanhado da máxima vazão mássica de produto. Ao reduzir para 5 leitos, a recuperação é mantida, porém observa-se uma redução de 25% na vazão de saída na linha de produto. Por fim, ao operar com 4 leitos, é possível manter a mesma vazão de produto, embora isso ocorra em detrimento de uma menor recuperação. Destaca-se que operar com um número menor de leitos torna o processo inviável, devido ao menor desempenho global da unidade. Embora não esteja ilustrado na tabela, operar com mais leitos leva a um menor consumo energético, pois há uma menor necessidade de comprimir mais o gás, uma vez que boa parte do processo de compressão dos leitos é feito pelos leitos em etapas intermediárias. Quando se reduz o número de leitos, maiores serão as variações de pressão que terão que ser atingidas pelo compressor, logo maior o consumo de energia elétrica associada.

Neste estudo, optou-se por descrever a unidade no seu modo padrão com seis leitos em operação. Sendo assim, tem-se que para cada ciclo completo, haverá 2 leitos simultaneamente em processo de adsorção, enquanto, os demais leitos estarão regenerando. Adicionalmente, cada leito percorre um conjunto de 18 etapas, estabelecendo conexões com diversos vasos e correntes em cada etapa por meio do processo de chaveamento das válvulas. O sequenciamento detalhado dessas etapas pode ser visualizado na Figura 3.3, o qual oferece uma representação sistemática do funcionamento da unidade ao longo do ciclo operacional.

Etapa	18	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Tempo (s)	15	30	50	15	30	50	15	30	50	15	30	50	15	30	50	15	30	50	15
<b>VASO</b>																			
V-11	A6	E1	PP1	E2	PP2	D1	D2	P2	P1	R2	R1	R01	R0	A1	A2	A3	A4	A5	A6
V-12	R2	R1	R01	R0	A1	A2	A3	A4	A5	A6	E1	PP1	E2	PP2	D1	D2	P2	P1	R2
V-13	A3	A4	A5	A6	E1	PP1	E2	PP2	D1	D2	P2	P1	R2	R1	R01	R0	A1	A2	A3
V-14	D2	P2	P1	R2	R1	R01	R0	A1	A2	A3	A4	A5	A6	E1	PP1	E2	PP2	D1	D2
V-15	R0	A1	A2	A3	A4	A5	A6	E1	PP1	E2	PP2	D1	D2	P2	P1	R2	R1	R01	R0
V-16	E2	PP2	D1	D2	P2	P1	R2	R1	R01	R0	A1	A2	A3	A4	A5	A6	E1	PP1	E2



**Figura 3.3:** Diagrama sequencial de etapas no processo de PSA – Estado dos vasos ao longo do ciclo operacional. Fonte: Adaptado do Manual da PSA avaliada.

Essa abordagem visa proporcionar uma compreensão abrangente do funcionamento da unidade e das interações complexas entre os leitos, etapas, vasos e correntes no contexto da operação cíclica.

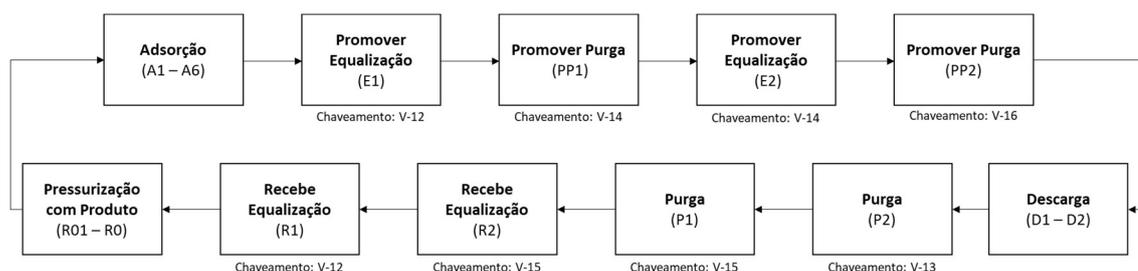
Além disso, é possível ter uma estimativa do tempo necessário para cada etapa, bem como o tempo para que um ciclo seja completado. A Tabela 3.3 resume os tempos de cada operação.

**Tabela 3.3:** Tempo estimado para cada etapa no ciclo de PSA.

Etapa	Tempo (segundos)
Adsorção (A1-A6)	190
Equalização (E1-R1 / E2-R2)	15-30
Descarga (D1 - D2)	65
Purga / Promover Purga (PP1-P1 / PP2-P2)	80
Pressurização com Produto (R01-R0)	65

Fonte: elaborado pelo autor.

Ainda assim, com o objetivo de facilitar a compreensão do ciclo, pode-se agrupar as etapas de 1 a 18 em conjuntos mais amplos, tornando o processo mais fácil de acompanhar. A Figura 3.4 mostra visualmente o ciclo realizado pelo vaso V-11, indicando os vasos conectados por meio do chaveamento nas etapas de equalização, promover purga e purga.

**Figura 3.4:** Fluxograma do ciclo completo para o vaso V-11.

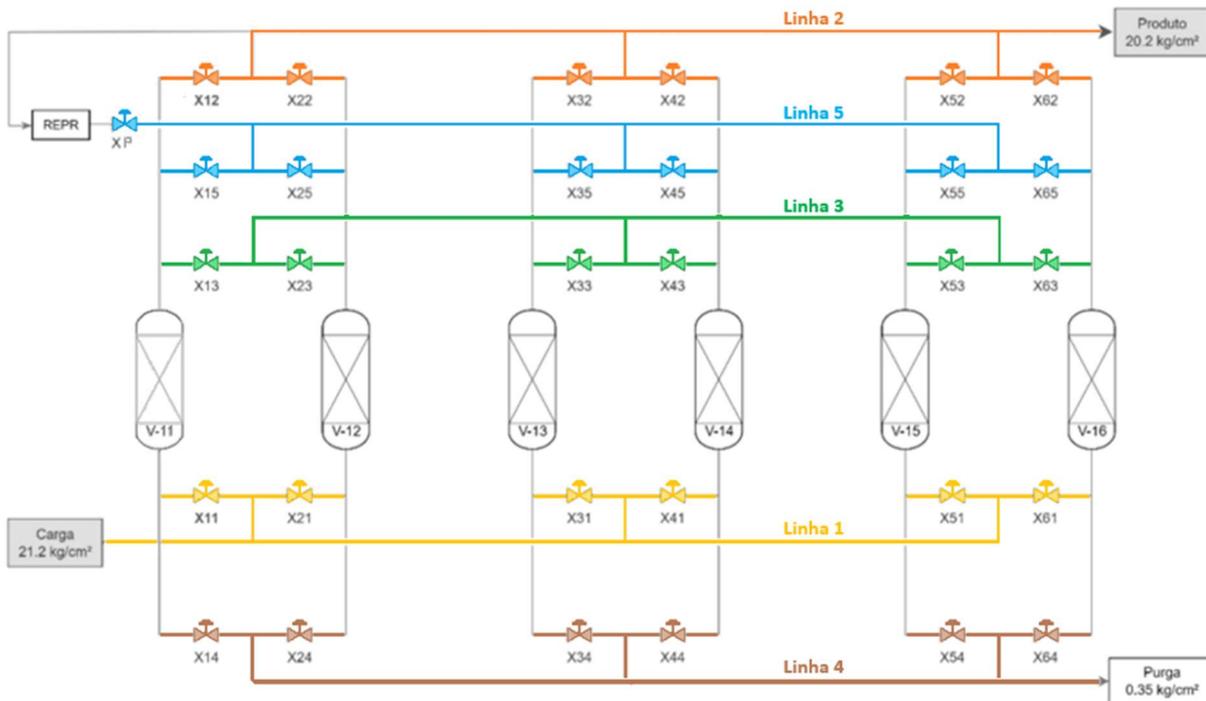
Fonte: elaborado pelo autor.

Nesse contexto, o papel crucial das válvulas de controle se destaca, sendo responsáveis pelo chaveamento que determina não apenas a etapa específica de cada vaso, mas também a sua interação com outros vasos. Cada leito de adsorção conta com cinco válvulas de comutação e controle, fundamentais para estabelecer as conexões necessárias durante o processo de PSA. Essa configuração permite a divisão da unidade em cinco linhas principais, conforme demonstrado na Tabela 3.4 e correspondentemente ilustrado na Figura 3.5.

**Tabela 3.4:** Linhas, válvulas e etapas da unidade de PSA

Linha	Função	Válvulas	Etapas
1	Entrada de gás de alimentação	X11, X21, X31, X41, X51, X61	A1, A2, A3, A4, A5, A6
2	H2 – Saída de Produto	X12, X22, X32, X42, X52, X62	A1, A2, A3, A4, A5, A6
3	Equalização / Promover Purga	X13, X23, X33, X43, X53, X63	PP1/P1, PP2/P2, E2/R2
4	Saída de gás de purga	X14, X24, X34, X44, X54, X64	D1, D2, P2, P1
5	Equalização / Repressurização	X15, X25, X35, X45, X55, X65, XP	E1/R1, R01, R0

Fonte: Adaptado do Manual da PSA avaliada.



**Figura 3.5:** Representação esquemática das 5 linhas da unidade.  
Adaptado de TRINDADE, 2023.

Adicionalmente, destaca-se que cada linha possui válvulas com especificidades particulares, incluindo variações no tipo (válvula globo ou borboleta), coeficiente de vazão e tipo de controle adotado. O controle pode ser de sinal analógico (4 a 20 mA) ou binário (ON/OFF, representado por 0 ou 1). A Tabela 3.5 resume os diferentes tipos de válvulas presentes na unidade.

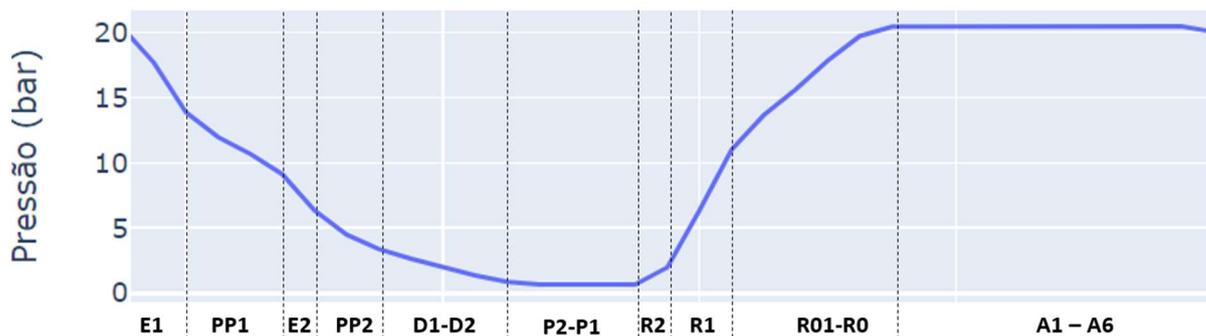
**Tabela 3.5:** Características das válvulas da unidade.

Linha	Tipo	$C_v$ 100% Abertura	Tipo de Controle
1	Válvula Borboleta	920	ON/OFF
2	Válvula Borboleta	400	ON/OFF
3	Válvula Globo	108	Analógico (4 a 20 mA)
4	Válvula Borboleta	3400	Analógico (4 a 20 mA)
5	Válvula Borboleta	400	Analógico (4 a 20 mA)
5 (XP)	Válvula Globo	82	Analógico (4 a 20 mA)

Fonte: do autor.

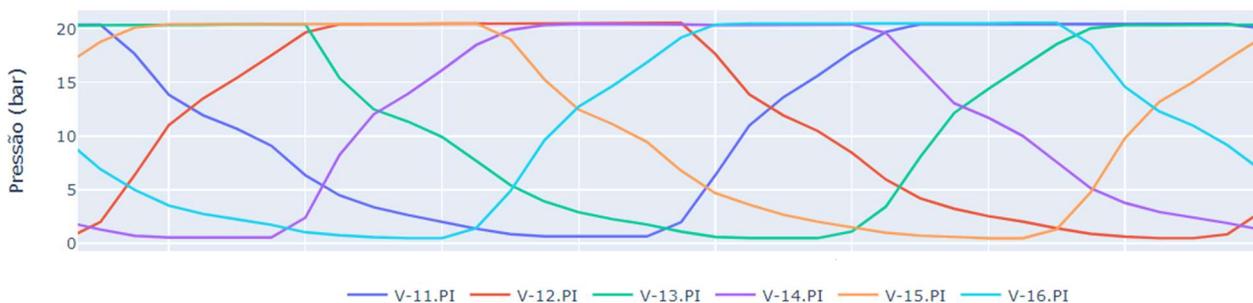
As características das válvulas na unidade foram estrategicamente escolhidas para atender às necessidades específicas de cada etapa do processo. As válvulas borboletas, nas correntes de alimentação e produto, são do tipo ON/OFF, ideais para uma rápida interrupção ou liberação total do fluxo. Já as válvulas globo, com um coeficiente de vazão ( $C_v$ ) menor, desempenham um papel crucial em etapas que exigem uma restrição mais significativa no fluxo, como promover purga e repressurização (válvula XP da linha 5).

Por outro lado, cada etapa da PSA é caracterizada por um perfil específico de pressão, sendo a obtenção deste um dos objetivos deste estudo. O foco reside na elaboração de um modelo que seja capaz de representar estas variações de pressão ao longo do tempo, de acordo com a etapa e o chaveamento estabelecido. Na unidade em análise, sensores de pressão estrategicamente posicionados nos vasos possibilitam a obtenção do perfil real ao longo do processo. A Figura 3.6, a seguir, apresenta de forma visual o padrão de pressão associado ao vaso V-11.



**Figura 3.6:** Variação de pressão em cada etapa – Vaso V-11.  
Fonte: elaborado pelo autor.

No entanto, para uma visão global do funcionamento da unidade, torna-se relevante a visualização do perfil de ambos os vasos simultaneamente, de forma que se consiga captar a dinâmica do sistema e seus chaveamentos. Ao observar as variações coordenadas de pressão em cada vaso, torna-se possível identificar momentos de transição entre as fases do ciclo, proporcionando uma visão mais rica da interação entre os mesmos. A Figura 3.7 apresenta o perfil de pressão sincronizado de todos os vasos na unidade de PSA durante um ciclo operacional.



**Figura 3.7:** Perfil de pressão sincronizado de todos os vasos na unidade de PSA ao longo do ciclo operacional. Fonte: do autor.

## 4 Modelagem Dinâmica

A aplicação de um modelo dinâmico viabiliza a análise da evolução temporal das variáveis de um processo. No contexto deste trabalho, a variável monitorada consiste nas pressões dos leitos de adsorção de uma unidade de PSA, seguindo as diversas fases de um ciclo completo.

Em uma unidade de PSA, tanto os vasos quanto as suas linhas de carga, produto e purga, encontram-se interligados por meio de válvulas. Dessa forma, como proposta de modelagem no estudo em questão, buscou-se relacionar as equações de escoamento em válvulas de controle, adaptadas para o escoamento de gases, conforme modelo de escoamento para fluidos compressíveis (PAVEGLIO, 2023), com equações provenientes do balanço de massa que se deduzem a partir da equação dos gases ideais, tal como descrito por TRINDADE (2023).

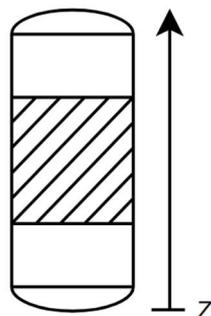
Dessa forma, o objetivo deste modelo fundamenta-se na obtenção de um sistema de equações diferenciais para cada etapa do ciclo, visando descrever as pressões nos seis leitos de adsorção, em termos das condições iniciais e perturbações nas variáveis do processo.

### 4.1 Hipóteses e Simplificações

Na elaboração de um modelo para a unidade de PSA, diversas considerações foram estabelecidas para viabilizar uma análise prática e eficiente do processo. Tais considerações incluem a simplificação do sistema para um estudo mais acessível acerca da problemática abordada.

As premissas adotadas na modelagem de uma unidade industrial de adsorção por pressões alternadas, destinada à purificação de hidrogênio, incluem:

- A fase gasosa exibe um comportamento ideal;
- Os vasos operam em condições isotérmicas;
- O escoamento nos dutos é turbulento, adiabático e sem atrito (não se considerou a perda de carga nas tubulações);
- O escoamento ocorre em dutos de área constante;
- A pressão em todo o vaso é uniforme.



**Figura 4.1:** Representação ilustrativa de um vaso com fluxo de gás ao longo do eixo z.

Fonte: elaborado pelo autor.

## 4.2 Equação da Válvula de Controle

A equação fundamental que governa a vazão mássica de um fluido compressível através de uma válvula de controle pode ser expressa pela seguinte equação:

$$\dot{m} = c_v \theta N_8 F_P Y P_1 \sqrt{\frac{x M}{Z T_1}} \quad (4.1)$$

Sendo:

$c_v$ : Coeficiente de vazão da válvula;

$\theta$ : Fração de abertura efetiva da válvula;

$N_8$ : Termo de conversão de unidades;

$F_P$ : Fator geométrico;

$Y$ : Fator de expansão;

$x$ : Razão entre a queda de pressão através da válvula e a sua pressão na entrada;

$P_1$ : Pressão na linha de entrada da válvula;

$M$ : Massa molar;

$Z$ : Fator de compressibilidade do gás;

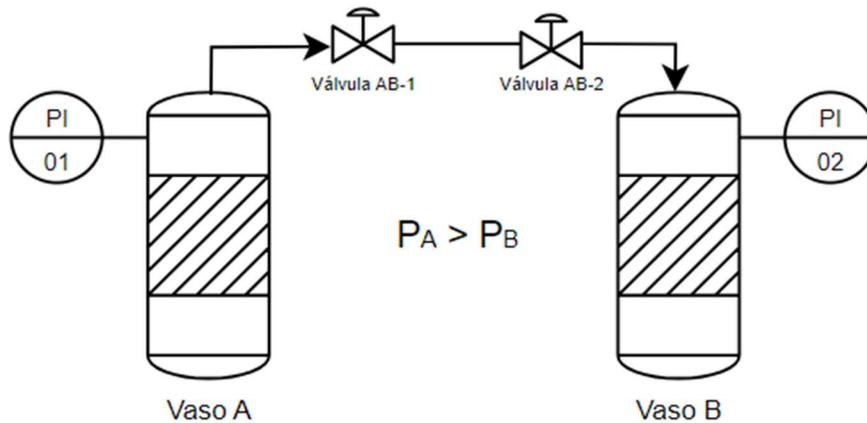
$T_1$ : Temperatura na linha de entrada da válvula.

A dedução completa da equação pode ser encontrada no Apêndice B. Neste apêndice, são apresentados os passos detalhados de derivabilidade, iniciando-se com a obtenção da equação básica da válvula por meio da equação de Bernoulli com perda de carga. O processo continua com a adaptação dessa equação para o caso de fluidos compressíveis. Para uma compreensão abrangente da evolução matemática, desde os princípios fundamentais até a aplicação específica ao nosso contexto, recomenda-se a consulta ao Apêndice B.

### 4.3 Balanço de Massa

Durante um ciclo de uma unidade de PSA, um único vaso acaba passando por distintas etapas, conectando-se por meio de válvulas com diferentes vasos e correntes no decorrer desse processo. Desse modo, torna-se coerente analisar cada etapa separadamente, para que se consiga descrever o ciclo completo.

#### 4.3.1 Equalização



**Figura 4.2:** Representação esquemática da etapa de equalização entre dois vasos.

Fonte: elaborado pelo autor.

Segundo FELDER e ROUSSEAU (2005), um balanço de uma quantidade conservada (massa total, massa de uma espécie particular, energia, momento) em um sistema (uma unidade de processo, uma série de unidades ou um processo completo) pode ser descrito da seguinte forma geral:

$$\text{entrada} - \text{saída} + \text{geração} - \text{consumo} = \text{acúmulo} \quad (4.2)$$

Dessa forma, considerando que se trata de um sistema fechado formado por dois vasos (A e B) e que toda a massa que sai de A é acumulada em B, pode-se concluir que não há variação na massa total do sistema. Expressando em termos da vazão mássica, tem-se:

$$-\dot{m}_A = \dot{m}_B \quad (4.3)$$

Sendo  $\dot{m}_A$  a vazão mássica que sai do tanque A e  $\dot{m}_B$  a vazão mássica que entra no tanque B. Para relacionar a pressão do vaso com a massa acumulada no mesmo, se pode fazer uso da equação dos gases ideais, dada por:

$$PV = \frac{m}{M} RT \quad (4.4)$$

onde  $R$  é a constante universal dos gases ideais e  $P$ ,  $V$ ,  $T$ ,  $M$  e  $m$  representam pressão, volume, temperatura, massa molecular e massa de gás contida no vaso analisado, respectivamente. Neste caso, o gás consiste em uma única espécie, o hidrogênio. Isolando o termo da massa de gás no vaso ( $m$ ), chega-se a:

$$m = \frac{VMP}{RT} \quad (4.5)$$

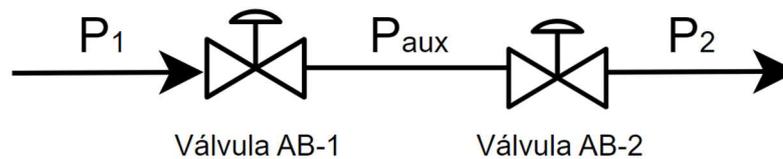
Conforme TRINDADE (2023), considerando um sistema adiabático e isotérmico, a parcela da expressão  $\frac{VM}{RT}$  permanece constante. A variação de massa dentro do vaso, então, pode ser determinada em função da variação de pressão:

$$\dot{m} = \frac{dm}{dt} = \frac{VM}{RT} \frac{dP}{dt} \quad (4.6)$$

A partir da equação (4.6) oriunda do balanço de massa, e a equação da válvula de controle (4.1), pode-se chegar num sistema de equações diferenciais que descreve as variações de pressões do leito ao longo do tempo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dP_1}{dt} = - \frac{RT}{VM} \left( c_v \theta N_8 F_P Y P_1 \sqrt{\frac{x M}{Z T_1}} \right) \\ \frac{dP_2}{dt} = \frac{RT}{VM} \left( c_v \theta N_8 F_P Y P_1 \sqrt{\frac{x M}{Z T_1}} \right) \end{array} \right\} \quad (4.7)$$

No entanto, para uma descrição mais fiel deste processo, é crucial levar em consideração a disposição apresentada na Figura 4.3. Nessa configuração, o fluxo de gás percorre um conjunto composto por duas válvulas dispostas em série. Como resultado, observa-se a existência de uma pressão intermediária ( $P_{aux}$ ) entre as válvulas. Essa pressão intermediária também exibe variações ao longo do tempo.



**Figura 4.3:** Representação esquemática das pressões ao longo da tubulação entre os vasos. Fonte: elaborado pelo autor.

Dessa forma, tem-se que para a pressão no vaso A ( $P_1$ ):

$$\frac{dP_1}{dt} = - \frac{RT}{VM} \left( c_v \theta_1 N_8 F_P Y_1 P_1 \sqrt{\frac{x_1 M}{Z T_1}} \right) \quad (4.8)$$

Onde:

$\theta_1$  é a fração de abertura efetiva da válvula AB-1;

$x_1$  é queda de pressão na válvula AB-1, dada pela relação  $x_1 = \frac{P_1 - P_{aux}}{P_1}$ ;

$Y_1$  é o fator de expansão na válvula AB-1, dada pela relação  $Y_1 = 1 - \frac{x_1}{3 \left( \frac{k}{1.4} \right) x_t}$ ;

De maneira equivalente, o mesmo pode ser aplicado para a pressão no vaso B ( $P_2$ ):

$$\frac{dP_2}{dt} = \frac{RT}{VM} \left( c_v \theta_2 N_8 F_P Y_2 P_{aux} \sqrt{\frac{x_2 M}{Z T_1}} \right) \quad (4.9)$$

Onde:

$\theta_2$  é a fração de abertura efetiva da válvula AB-2;

$x_2$  é queda de pressão na válvula AB-2, dada pela relação  $x_2 = \frac{P_{aux} - P_2}{P_{aux}}$ ;

$Y_2$  é o fator de expansão na válvula AB-2, dada pela relação  $Y_2 = 1 - \frac{x_2}{3 \left( \frac{k}{1.4} \right) x_t}$ ;

Dessa forma, tem-se que a pressão intermediária ( $P_{aux}$ ) é função de  $P_1$  e  $P_2$ .

$$P_{aux} = f(P_1, P_2) \quad (4.10)$$

Sendo assim, como forma de simplificação do caso em questão, é possível encontrar uma solução analítica para  $P_{aux}$  de forma que as expressões (4.8) e (4.9) formem um sistema de equações algébricas diferenciais (SEAD ou DAE em inglês, *Differential Algebraic Equations*).

Assim, como ponto de partida para desenvolvimento de uma equação analítica simplificada para  $P_{aux}$ , pode-se considerar que a vazão mássica é constante em todo o percurso ao longo da tubulação entre os vasos A e B.

A expressão para a vazão mássica na válvula AB-1 pode ser expressa pela equação:

$$\dot{m} = c_v \theta_1 N_8 F_P \left( 1 - \frac{1}{3 \left( \frac{k}{1.4} \right) x_t} \left( \frac{P_1 - P_{aux}}{P_1} \right) \right) P_1 \sqrt{\frac{M}{Z T_1}} \sqrt{\frac{P_1 - P_{aux}}{P_1}} \quad (4.11)$$

Tendo em mente que o termo

$$\frac{1}{3 \left( \frac{k}{1.4} \right) x_t} \left( \frac{P_1 - P_{aux}}{P_1} \right) \quad (4.12)$$

é pequeno e para facilitar a solução, será considerado inicialmente constante, sendo calculado através da aproximação  $P_{aux} = \frac{P_1 + P_2}{2}$ , que substituindo na expressão (4.12), permite que se reescreva da seguinte forma:

$$\frac{1}{6 \left( \frac{k}{1.4} \right) x_t} \left( \frac{P_1 - P_2}{P_1} \right) \quad (4.13)$$

A ideia é calcular esse valor no início e usar como constante nos cálculos, assim, pode-se agrupar todas as constantes da fórmula, de modo que esta será representada simplesmente como uma constante "C".

$$C_1 = c_v N_8 F_P \left( 1 - \frac{1}{6 \left( \frac{k}{1.4} \right) x_t} \left( \frac{P_1 - P_2}{P_1} \right) \right) \sqrt{\frac{M}{Z T_1}} \quad (4.14)$$

Isso nos permite reescrever a equação da válvula da seguinte forma:

$$\dot{m} = \theta_1 C_1 \sqrt{P_1 (P_1 - P_{aux})} \quad (4.15)$$

Considerando a vazão mássica para a válvula AB-1 é a mesma para a válvula AB-2

$$\theta_1 C_1 \sqrt{P_1 (P_1 - P_{aux})} = \theta_2 C_2 \sqrt{P_{aux} (P_{aux} - P_2)} \quad (4.16)$$

Em que a constante  $C_2$  pode ser obtida de maneira semelhante a constante  $C_1$ , sendo dada pela expressão abaixo:

$$C_2 = c_v N_8 F_P \left( 1 - \frac{1}{3 \left( \frac{k}{1.4} \right) x_t} \left( \frac{P_1 - P_2}{P_1 + P_2} \right) \right) \sqrt{\frac{M}{Z T_1}} \quad (4.17)$$

Para resolver a equação (4.16) foi utilizado o software *MapleSoft* que se justifica pela sua eficácia em lidar com manipulações simbólicas complexas, permitindo obter uma expressão simplificada de maneira precisa e eficiente.

Essencialmente a solução para a variável  $P_{aux}$  na equação (4.16) fundamenta-se numa função polinomial de segundo grau, conforme explicitado pela expressão a seguir:

$$\theta_2^2 C_2^2 P_{aux}^2 + P_{aux} (\theta_1^2 C_1^2 P_1 - \theta_2^2 C_2^2 P_2) - \theta_1^2 C_1^2 P_1^2 = 0$$

A solução analítica obtida apresenta-se como segue:

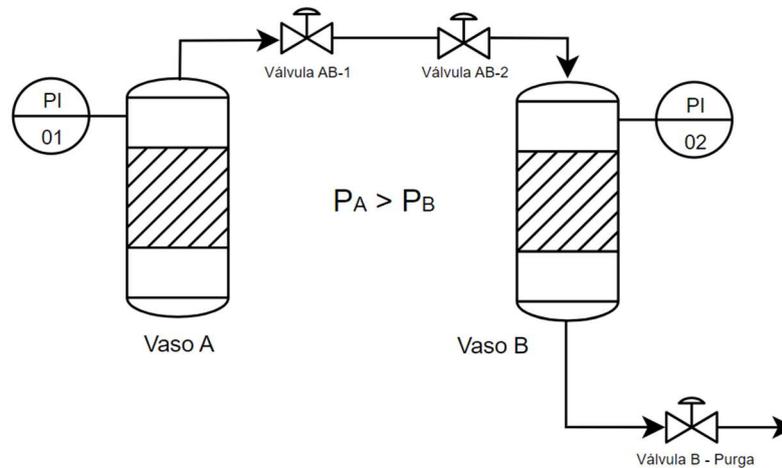
$$P_{aux} = \frac{-C_1^2 P_1 \theta_1^2 + C_2^2 P_2 \theta_2^2 + \sqrt{C_1^4 P_1^2 \theta_1^4 + 4 C_1^2 C_2^2 P_1^2 \theta_1^2 \theta_2^2 - 2 C_1^2 C_2^2 P_1 P_2 \theta_1^2 \theta_2^2 + C_2^4 P_2^2 \theta_2^4}}{2 \theta_2^2 C_2^2} \quad (4.18)$$

Por fim, pode-se chegar num sistema de equações algébricas diferenciais que governam as variações de pressões dos vasos no decorrer do tempo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dP_1}{dt} = - \frac{RT}{VM} \left( c_v \theta_1 N_8 F_P Y_1 P_1 \sqrt{\frac{x_1 M}{Z T_1}} \right) \\ \frac{dP_2}{dt} = \frac{RT}{VM} \left( c_v \theta_2 N_8 F_P Y_2 P_{aux} \sqrt{\frac{x_2 M}{Z T_1}} \right) \\ P_{aux} \xrightarrow{\text{conforme}} \text{eq. (4.18)} \end{array} \right. \quad (4.19)$$

Este modelo matemático descreve o processo dinâmico de equalização de pressão entre dois tanques, um de maior pressão ( $P_1$ ), o qual está promovendo equalização de outro tanque a uma pressão menor ( $P_2$ ).

### 4.3.2 Purga – Promover Purga



**Figura 4.4:** Representação esquemática da etapa de purga e promover purga entre dois vasos. Fonte: elaborado pelo autor.

Nesta abordagem, considera-se que ocorre a transferência de massa das espécies adsorvidas no material adsorvente em direção ao fluxo de gás hidrogênio proveniente do vaso A. Sendo assim, haverá também uma variação da massa molar do gás presente no vaso B, o qual está na etapa de purga. As variações mássicas em cada tanque podem ser expressas pelas relações advindas da equação dos gases ideais, com as seguintes adaptações:

$$\dot{m}_B = \frac{dm_B}{dt} = \frac{V}{RT} \frac{d(M P_B)}{dt}$$

$$\dot{m}_A = \frac{dm_A}{dt} = \frac{VM}{RT} \frac{dP_A}{dt}$$

Para o vaso A, não há correntes de entrada, de modo que toda a variação mássica se deve pela saída de gases deste vaso:

$$\frac{dm_A}{dt} = - \dot{m}_{\text{Sai A}}$$

A vazão mássica que sai do vaso A pode ser determinada utilizando a equação (4.1) para o escoamento em válvulas de controle. Dessa forma, a dinâmica de pressão deste vaso é representada pela equação diferencial abaixo:

$$\frac{dP_1}{dt} = - \frac{RT}{VM} \left( c_v \theta_1 N_8 F_P Y_1 P_1 \sqrt{\frac{x_1 M}{Z T_1}} \right)$$

No que diz respeito ao vaso B, é necessário considerar a presença de duas correntes, uma de entrada e outra de saída. Nesse contexto, a equação que descreve o balanço de massa no tanque B é expressa da seguinte forma:

$$\frac{dm_B}{dt} = \dot{m}_{Entra\ B} - \dot{m}_{Sai\ B}$$

Além disso, é importante ressaltar que a abordagem de dessorção do vaso B, introduz uma dinâmica particular. Ao considerar a corrente que entra no vaso B, percebe-se que esta representa o hidrogênio liberado pelo vaso A para promover sua purga. No entanto, na corrente de saída, é necessário observar um aumento na massa, indicativo da liberação de gases adsorvidos durante o processo de dessorção. Essa variação de massa pode ser expressa pelo incremento na massa molar na corrente de saída, que, além do hidrogênio, agora transporta os demais elementos adsorvidos (CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>). A massa molar na corrente de purga sendo representada por  $M_{purga}$ .

Logo, as taxas mássicas de entrada e saída podem ser representadas pelas seguintes equações:

$$\dot{m}_{Entra\ B} = c_v \theta_2 N_8 F_P Y_2 P_{aux} \sqrt{\frac{x_2 M}{Z T_1}}$$

$$\dot{m}_{Sai\ B} = c_v \theta_3 N_8 F_P Y_3 P_2 \sqrt{\frac{x_3 M_{purga}}{Z T_1}}$$

Ainda é necessário considerar que a massa molar no vaso B está variando ao longo do tempo, devido ao processo de dessorção. Para abordar essa dinâmica, seria necessário aplicar um balanço de massa por componente, no qual a taxa de variação da massa é influenciada pelas entradas, saídas e, crucialmente, por um termo de geração. Esse termo de geração seria derivado das isothermas de adsorção, que representaria as interações adsorvente-superfície durante o processo. No entanto, esse caminho levaria a uma modelagem rigorosa, a qual seria uma etapa subsequente a este estudo. Desta forma, a fim de simplificar, optou-se por considerar uma massa molar média. Neste contexto, na extremidade de entrada do gás, seu valor equivale à massa molar do hidrogênio ( $M$ ) e na extremidade de saída, igual a massa molar do gás de purga ( $M_{purga}$ ).

Desse modo, chega-se no sistema de equações algébricas diferenciais que de fato, descreve as variações de pressão dos vasos nesta etapa:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dP_1}{dt} = - \frac{RT}{VM} \left( c_v \theta_1 N_8 F_P Y_1 P_1 \sqrt{\frac{x_1 M}{Z T_1}} \right) \\ \frac{dP_2}{dt} = \frac{RT}{VM} \left( c_v \theta_2 N_8 F_P Y_2 P_{aux} \sqrt{\frac{x_2 M}{Z T_1}} \right) - \frac{RT}{VM_{purga}} \left( c_v \theta_3 N_8 F_P Y_3 P_2 \sqrt{\frac{x_3 M_{purga}}{Z T_1}} \right) \end{array} \right\}$$

$P_{aux} \xrightarrow{\text{conforme}} \text{eq. (4.18)}$

(4.20)

Onde:

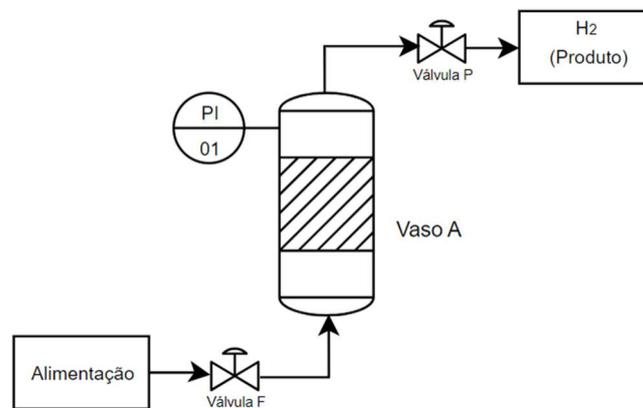
$\theta_1$ ,  $\theta_2$  e  $\theta_3$  são, respectivamente, a fração de abertura efetiva das válvulas AB-1, AB-2 e B-Purga;

$x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$  são, respectivamente, a queda de pressão nas válvulas AB-1, AB-2 e B-Purga. Sendo que:  $x_1 = \frac{P_1 - P_{aux}}{P_1}$ ,  $x_2 = \frac{P_{aux} - P_2}{P_{aux}}$ ,  $x_3 = \frac{P_2 - P_{purga}}{P_2}$ ;

$Y_1$ ,  $Y_2$  e  $Y_3$  são, respectivamente, o fator de expansão nas válvulas AB-1, AB-2 e B-Purga. Sendo que:  $Y_1 = 1 - \frac{x_1}{3\left(\frac{k}{1.4}\right)x_t}$ ,  $Y_2 = 1 - \frac{x_2}{3\left(\frac{k}{1.4}\right)x_t}$ ,  $Y_3 = 1 - \frac{x_3}{3\left(\frac{k}{1.4}\right)x_t}$ ;

Importante ressaltar que a pressão de purga ( $P_{purga}$ ) é um dado conhecido de processo, o qual representa a pressão no vaso de gás de purga. A obtenção de uma solução única para a equação (4.20) torna-se viável ao considerarmos as condições iniciais  $P_1(t = 0) = P_{1_{inicial}}$  e  $P_2(t = 0) = P_{2_{inicial}}$ , onde  $P_{1_{inicial}}$  corresponde à pressão do vaso A no início da etapa "Promover Purga", e  $P_{2_{inicial}}$  representa a pressão do vaso B no início do processo de purga.

### 4.3.3 Adsorção



**Figura 4.5:** Representação esquemática da etapa de adsorção.

Fonte: elaborado pelo autor.

De forma semelhante à abordagem proposta na etapa de purga, o processo de adsorção também ocorre com transferência de massa. No entanto, agora considera-se que moléculas de CO, CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> presentes na alimentação são adsorvidas pelo material adsorvente, enquanto o hidrogênio passa através do leito. Como consequência, tem-se que nesta etapa também ocorre uma variação da massa molar no vaso durante o processo.

Desse modo, a equação que relaciona as variáveis de estado do gás considerando o processo de adsorção se torna:

$$\frac{dm_A}{dt} = \frac{V}{RT} \frac{d(M P_A)}{dt}$$

Considerando o sistema em questão, o balanço de massa desse sistema é dado por:

$$\frac{dm_A}{dt} = \dot{m}_{Entra A} - \dot{m}_{Sai A}$$

As vazões mássicas de entrada e saída podem ser representadas pelas seguintes equações, provenientes da equação (4.1):

$$\dot{m}_{Entra A} = c_v \theta_1 N_8 F_P Y_1 P_{feed} \sqrt{\frac{x_1 M_{feed}}{Z T_1}}$$

$$\dot{m}_{Sai A} = c_v \theta_2 N_8 F_P Y_2 P_1 \sqrt{\frac{x_2 M}{Z T_1}}$$

De maneira equivalente ao modelo proposto na etapa de purga, considera-se uma massa molar média no vaso durante o processo de adsorção. Na extremidade de entrada tem-se que a corrente está a  $M_{feed}$  que corresponde à massa molar na alimentação, enquanto na saída tem-se a massa do hidrogênio puro ( $M$ ).

Desse modo, chega-se na equação diferencial que descreve a variação de pressão do vaso na etapa de adsorção:

$$\left\{ \frac{dP_1}{dt} = \frac{RT}{VM_{feed}} \left( c_v \theta_1 N_8 F_P Y_1 P_{feed} \sqrt{\frac{x_1 M_{feed}}{Z T_1}} \right) - \frac{RT}{VM} \left( c_v \theta_2 N_8 F_P Y_2 P_1 \sqrt{\frac{x_2 M}{Z T_1}} \right) \right\} (4.21)$$

Onde:

$\theta_1$  e  $\theta_2$  são, respectivamente, a fração de abertura efetiva das válvulas F e P;

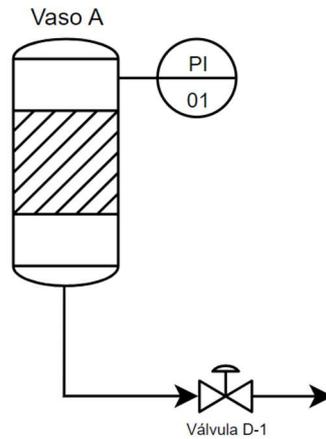
$x_1$  e  $x_2$  são, respectivamente, a queda de pressão nas válvulas F e P. Sendo que:  $x_1 = \frac{P_{feed} - P_1}{P_{feed}}$

e  $x_2 = \frac{P_1 - P_{produto}}{P_1}$ ;

$Y_1$  e  $Y_2$  são, respectivamente, o fator de expansão nas válvulas F e P. Sendo que  $Y_1 = 1 - \frac{x_1}{3\left(\frac{k}{1.4}\right)x_t}$  e  $Y_2 = 1 - \frac{x_2}{3\left(\frac{k}{1.4}\right)x_t}$ ;

A pressão da alimentação ( $P_{feed}$ ) e a pressão de produto ( $P_{produto}$ ) são dados conhecidos do processo. Para a obtenção de uma solução única da equação acima (4.21), considera-se a condição inicial  $P_1(t = 0) = P_{1inicial}$ , em que  $P_{1inicial}$  é a pressão do vaso no início do processo de adsorção.

#### 4.3.4 Descarga (blowdown)



**Figura 4.6:** Representação esquemática da etapa de blowdown de um vaso.

Fonte: elaborado pelo autor.

Nesta etapa, tem-se a despressurização do leito até a pressão de purga. Dessa forma, a vazão mássica está diretamente relacionada a diminuição de pressão no vaso, conforme é possível verificar na relação abaixo para este sistema:

$$-\dot{m}_A = \frac{dm_A}{dt} = \frac{VM_{purga}}{RT} \frac{dP_A}{dt}$$

Em que a variação temporal de pressão  $\left(\frac{dP_A}{dt}\right) < 0$ , indicando a diminuição da massa presente no vaso ao longo do tempo.

Considerando, portanto, o efeito da válvula presente na linha de descarga, a equação diferencial destinada a caracterizar a dinâmica desta etapa pode ser expressa da seguinte forma:

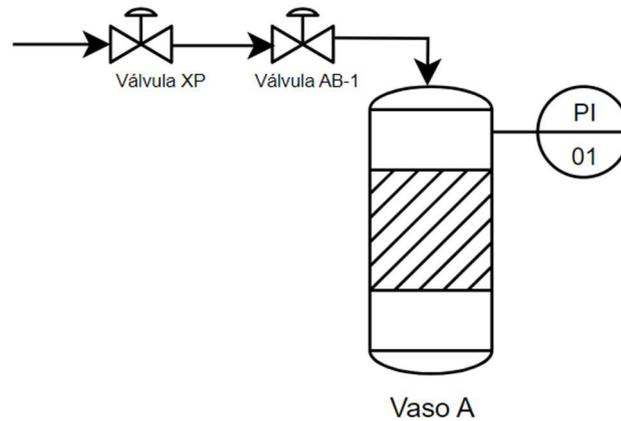
$$\left\{ \frac{dP_1}{dt} = - \frac{RT}{VM_{purga}} \left( c_v \theta N_8 F_P Y P_1 \sqrt{\frac{x M_{purga}}{Z T_1}} \right) \right\} \quad (4.22)$$

Neste contexto, a variável  $x$ , que denota a queda de pressão na válvula, será fixada em um valor terminal representado por  $P_{purga}$ , ou seja,  $x = \frac{P_1 - P_{purga}}{P_1}$ .

Observa-se, também, que nesta etapa ocorre o início do processo de dessorção das partículas adsorvidas, possibilitando a aproximação da massa molar do leito durante esse processo como sendo  $M_{purga}$ .

Finalmente, considerando a obtenção de uma solução única para a equação (4.22) acima, considera-se a condição inicial  $P_1(t = 0) = P_{1_{inicial}}$ , em que  $P_{1_{inicial}}$  é a pressão do tanque no início do processo de descarga.

#### 4.3.5 Pressurização com Produto



**Figura 4.7:** Representação esquemática da etapa de pressurização com produto de um vaso.  
Fonte: elaborado pelo autor.

Nesta fase do processo, uma corrente proveniente da linha de produto, composta pelo composto de interesse ( $H_2$ ), é redirecionada como reciclo. Essa corrente é utilizada para repressurizar um vaso que se encontra em fase de preparação para a etapa subsequente de adsorção em alta pressão.

Logo, a dinâmica deste sistema assemelha-se àquela apresentada anteriormente na etapa de descarga, no entanto, com a diferença de que o vaso está pressurizando até alcançar a pressão de adsorção.

Portanto, tem-se que toda a massa de hidrogênio gasoso que entra no vaso A está acumulando no mesmo.

$$\dot{m}_A = \frac{dm_A}{dt} = \frac{VM}{RT} \frac{dP_A}{dt}$$

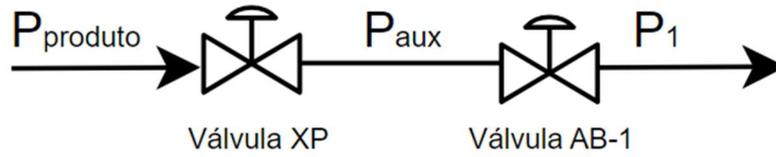
Na qual a variação temporal de pressão  $\left(\frac{dP_A}{dt}\right) > 0$ , indicando um aumento da massa presente no vaso ao longo do tempo.

Dessa maneira, ao levar em consideração a presença de ambas as válvulas existentes na linha de reciclo, tem-se que a equação diferencial que descreve a dinâmica desta etapa pode ser formulada da seguinte maneira:

$$\left\{ \frac{dP_1}{dt} = \frac{RT}{VM} \left( c_v \theta_2 N_8 F_P Y_1 P_{aux} \sqrt{\frac{xM}{ZT_1}} \right) \right\} \quad (4.23)$$

A variável  $x$  que representa a queda de pressão na válvula, tem a montante a pressão intermediária ( $P_{aux}$ ) entre as válvulas da linha de reciclo e a pressão no vaso a jusante. Dessa forma,  $x = \frac{P_{aux} - P_1}{P_{aux}}$ . Neste caso,  $\theta_2$  representa a abertura da válvula AB-1.

Importante ressaltar que a pressão intermediária ( $P_{aux}$ ), neste caso, não se calcula de maneira exatamente idêntica ao descrito na equação (4.18). Uma vez que agora tem-se uma pressão conhecida e constante na entrada ( $P_{produto}$ ), ao invés de  $P_1$ . Sendo assim basta reajustar as equações substituindo  $P_1$  por  $P_{produto}$  e  $P_2$  por  $P_1$ . A Figura 4.8 resume essa modificação:



**Figura 4.8:** Representação esquemática das pressões ao longo da tubulação na etapa de pressurização com produto. Fonte: elaborado pelo autor.

Logo, as constantes  $C_1$  e  $C_2$  devem ser reescritas da seguinte forma:

$$C_1 = c_{v1} N_8 F_P \left( 1 - \frac{1}{6\left(\frac{k}{1.4}\right)x_t} \left( \frac{P_{produto} - P_1}{P_{produto}} \right) \right) \sqrt{\frac{M}{Z T_1}} \quad (4.24)$$

$$C_2 = c_{v2} N_8 F_P \left( 1 - \frac{1}{3\left(\frac{k}{1.4}\right)x_t} \left( \frac{P_{produto} - P_1}{P_{produto} + P_1} \right) \right) \sqrt{\frac{M}{Z T_1}} \quad (4.25)$$

De maneira equivalente, adaptando a solução analítica de  $P_{aux}$ , obtém-se que no processo de pressurização com produto:

$$P_{aux} = \frac{-C_1^2 P_{produto} \theta_1^2 + C_2^2 P_1 \theta_2^2 + \sqrt{C_1^4 P_{produto}^2 \theta_1^4 + 4 C_1^2 C_2^2 P_{produto}^2 \theta_1^2 \theta_2^2 - 2 C_1^2 C_2^2 P_{produto} P_1 \theta_1^2 \theta_2^2 + C_2^4 P_1^2 \theta_2^4}}{2 \theta_2^2 C_2^2} \quad (4.26)$$

Assim, na verdade tem-se uma equação algébrica diferencial (DAE) que define a dinâmica do sistema na etapa de pressurização com produto:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dP_1}{dt} = \frac{RT}{VM} \left( c_v \theta_2 N_8 F_P Y_1 P_{aux} \sqrt{\frac{x M}{Z T_1}} \right) \\ P_{aux} \xrightarrow{\text{conforme}} \text{eq. (4.26)} \end{array} \right\} \quad (4.27)$$

Por fim, para se obter uma solução específica para equação (4.27) descrita anteriormente, considera-se a condição inicial  $P_1(t=0) = P_{1inicial}$ , em que  $P_{1inicial}$  é a pressão do vaso no início do processo de repressurização.

## 5 Simulação – Método e Ferramentas

A presente seção discorre sobre os elementos fundamentais empregados na simulação proposta, destacando materiais, *software* e o conjunto de dados que fundamentam este estudo. Assim, busca-se proporcionar uma compreensão abrangente das ferramentas e técnicas empregadas na condução da simulação, visando a elucidar o processo de modelagem adotado.

### 5.1 *Software*

A execução do estudo se deu mediante programação em *Python*, versão 3.11, utilizando o ambiente *Jupyter Notebook* como plataforma de desenvolvimento. A simulação foi apoiada em bibliotecas específicas para análise de dados, destacando-se a utilização de *Numpy* e *Pandas* para a manipulação e importação eficiente de dados provenientes da planta industrial. A análise e representação gráfica dos resultados foram realizadas por meio da biblioteca *Matplotlib*, enquanto a resolução numérica das Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs) representativas do modelo foi executada com o suporte da biblioteca *SciPy*, empregando a função *odeint* baseada no método Runge-Kutta de ordem 4 (RK4).

### 5.2 Conjunto de dados

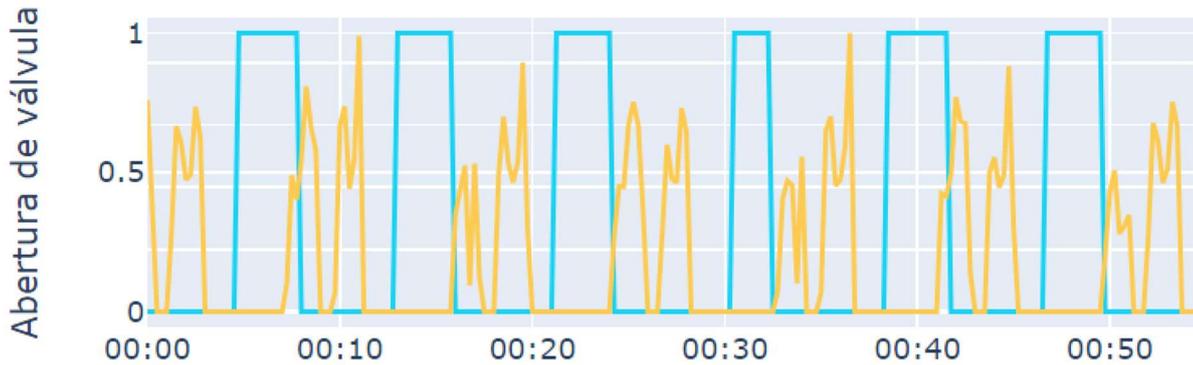
No âmbito da simulação dinâmica, parâmetros específicos do processo, inclusive aqueles que variam com o tempo, como a abertura das válvulas, são essenciais para uma representação fidedigna do sistema.

Desse modo, para assegurar a fidelidade da simulação às condições reais de operação, utilizaram-se dados reais da planta industrial. Estes dados abrangem características gerais sobre a unidade e o processo, como, por exemplo, o volume dos vasos, o coeficiente de vazão das válvulas de controle e a massa molar das correntes. Adicionalmente, foram incorporados dados dinâmicos que variam ao longo do tempo, no caso, a dinâmica de abertura das válvulas, desempenhando um papel crucial na compreensão da evolução do sistema operacional.

#### 5.2.1 Abertura das válvulas de Controle

As válvulas de controle desempenham um papel fundamental na unidade de PSA, sendo responsáveis pelo chaveamento entre os seis leitos de adsorção (V-11 a V-16). Na configuração específica da unidade em análise, observa-se a presença de duas categorias principais de válvulas: as válvulas de controle *on-off*, que operam em estados totalmente aberto ou fechado, e as válvulas de controle de abertura contínua, que possibilitam um fluxo controlado de gás ao longo da tubulação.

A representação gráfica abaixo demonstra o funcionamento de duas válvulas da unidade ao longo do tempo. A curva em azul exemplifica uma válvula do tipo *on-off*, enquanto a curva em amarelo representa uma válvula de abertura contínua:



**Figura 5.1:** Comportamento temporal das válvulas de controle na unidade de PSA.  
Fonte: do autor.

Nesse contexto, é importante ressaltar que esses dados foram coletados com uma frequência de amostragem de 15 segundos, correspondente ao intervalo de aquisição de dados do SDCD (Sistema Digital de Controle Distribuído). A frequência de amostragem exerce influência direta nos resultados da simulação, especialmente considerando que a delimitação das etapas do vaso está diretamente ligada à abertura das válvulas. Nos próximos tópicos, será explorado mais detalhadamente esse aspecto.

### 5.2.2 Parâmetros Constantes

Variáveis constantes específicas do processo também foram extraídas, enfatizando informações coletadas a partir de dados de projeto. Na Tabela 5.1 se apresenta um resumo de cada parâmetro que também será utilizado para o cálculo do modelo.

**Tabela 5.1:** Parâmetros constantes utilizados no cálculo do modelo.

Parâmetro	Símbolo	Valor	Unidade
Coeficiente de Vazão – Linha 1	$C_{v_1}$	920	$GPM/(psi)^{\frac{1}{2}}$
Coeficiente de Vazão – Linha 2	$C_{v_2}$	400	$GPM/(psi)^{\frac{1}{2}}$
Coeficiente de Vazão – Linha 3	$C_{v_3}$	108	$GPM/(psi)^{\frac{1}{2}}$
Coeficiente de Vazão – Linha 4	$C_{v_4}$	3400	$GPM/(psi)^{\frac{1}{2}}$
Coeficiente de Vazão – Linha 5	$C_{v_5}$	400	$GPM/(psi)^{\frac{1}{2}}$
Coeficiente de Vazão – Repressurização	$C_{v_{rp}}$	82	$GPM/(psi)^{\frac{1}{2}}$
Termo de Conversão de unidades	$N_8$	94,80	(Unidades definidas nas equações, onde vazão mássica em kg/h, pressão em bar e temperatura em K)
Fator Geométrico	$F_p$	1,00	—
Fator de compressibilidade	$Z$	1,00	—
Massa molar - Hidrogênio (H <sub>2</sub> )	$M$	2,00	$g/mol$
Massa molar – Alimentação	$M_{feed}$	10,82	$g/mol$
Massa molar - Gás de Purga	$M_{purga}$	24,84	$g/mol$
Volume dos Vasos	$V$	10,00	$m^3$
Temperatura dos Vasos	$T$	313,15	$K$
Razão entre calores específicos (Cp/Cv)	$k$	1,40	—
Fator de Queda de Pressão Crítica	$x_t$	0,35	—

Pressão na corrente de alimentação	$P_{feed}$	20,6	bar
Pressão na corrente de produto	$P_{produto}$	20,38	bar
Pressão na corrente de purga	$P_{purga}$	0,25	bar

Fonte: do autor.

Cabe ressaltar que a constante  $N_8$  listada na Tabela 5.1 tem unidades de  $\frac{N_1 \sqrt{\rho_w}}{\sqrt{R}}$ , em que  $N_1$  é expressa em unidades de  $\frac{m^3}{h \text{ GPM}} \sqrt{\frac{psi}{bar}}$ .

Desse modo, considerando a análise dimensional da expressão que descreve a variação da pressão em relação ao tempo em bar/s, a formulação genérica adquire a seguinte configuração:

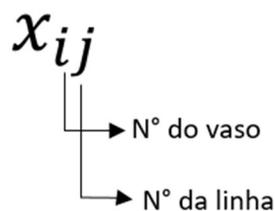
$$\frac{dP_i}{dt} = \pm \frac{\sqrt{10^{-5}}}{3600} \frac{RT}{VM_i} \left( c_{v_i} \theta_i N_8 F_P Y_i P_i \sqrt{\frac{x M_i}{Z T_1}} \right) \quad (5.1)$$

### 5.3 Metodologia

A seguir, será detalhado o processo de condução da simulação, evidenciando a lógica aplicada no chaveamento entre leitos e correntes. Adicionalmente, será demonstrado a implementação computacional, oferecendo explicações sobre as funções utilizadas e seus parâmetros correspondentes.

#### 5.3.1 Lógica de Chaveamento

Conforme abordado no estudo de caso, cada vaso possui um conjunto de 5 válvulas específicas. A nomenclatura das válvulas, tal como descrito nas Figuras 3.2 e 3.5 foram definidas de modo a facilitar a sua identificação na unidade. Cada válvula é representada por 2 índices, genericamente, "i" e "j", em que o índice "i" refere-se ao vaso ao qual a válvula pertence, e o índice "j" indica a linha em que está localizada esta válvula. A imagem a seguir exemplifica esta representação:



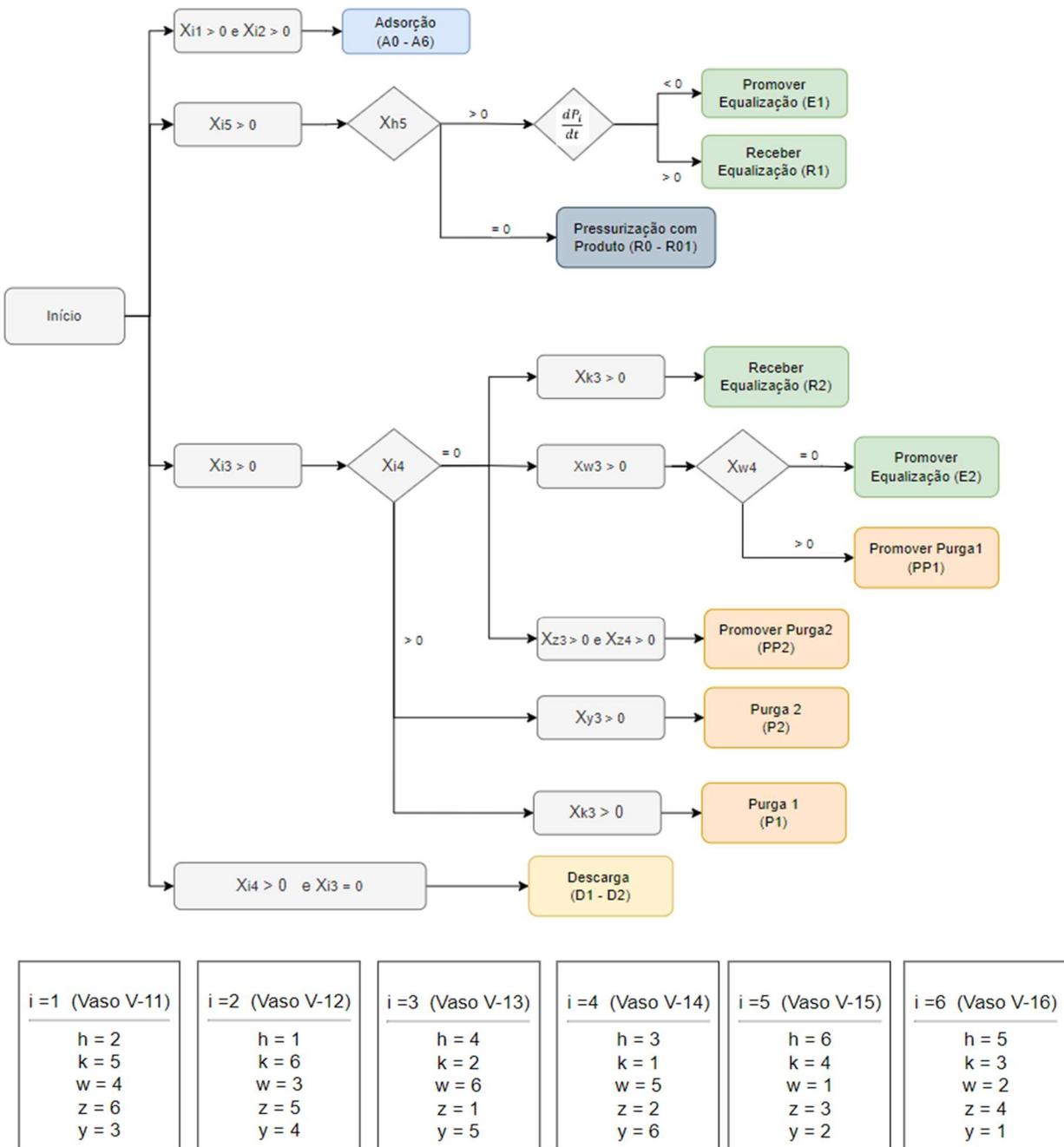
**Figura 5.2:** Índices de identificação das válvulas da unidade.

Fonte: elaborado pelo autor.

Para ilustrar, considera-se a válvula  $x_{23}$ , onde  $i=2$  representa o segundo vaso (V-12) e  $j=3$  indica que esta válvula está presente na linha 3. Essa notação permite uma categorização clara e sistemática das válvulas, facilitando a compreensão da sua localização e função dentro da unidade.

A dinâmica do processo é determinada pelo conjunto de válvulas abertas em um determinado momento. Dependendo da configuração em um dado instante, o vaso em foco executa uma etapa específica do processo. Esta etapa pode ocorrer de forma simultânea com outro vaso ou em interação direta com uma das três correntes principais da unidade: alimentação, produto e purga. A identificação das válvulas abertas, portanto, define a etapa do ciclo operacional em que o vaso se encontra.

Desse modo, a lógica do chaveamento empregada neste estudo é exemplificada na Figura 5.3 abaixo. Buscou-se representar as válvulas de forma genérica, levando em consideração a nomenclatura previamente definida, conforme descrito no início deste tópico.



i = 1 (Vaso V-11) h = 2 k = 5 w = 4 z = 6 y = 3	i = 2 (Vaso V-12) h = 1 k = 6 w = 3 z = 5 y = 4	i = 3 (Vaso V-13) h = 4 k = 2 w = 6 z = 1 y = 5	i = 4 (Vaso V-14) h = 3 k = 1 w = 5 z = 2 y = 6	i = 5 (Vaso V-15) h = 6 k = 4 w = 1 z = 3 y = 2	i = 6 (Vaso V-16) h = 5 k = 3 w = 2 z = 4 y = 1
--	--	--	--	--	--

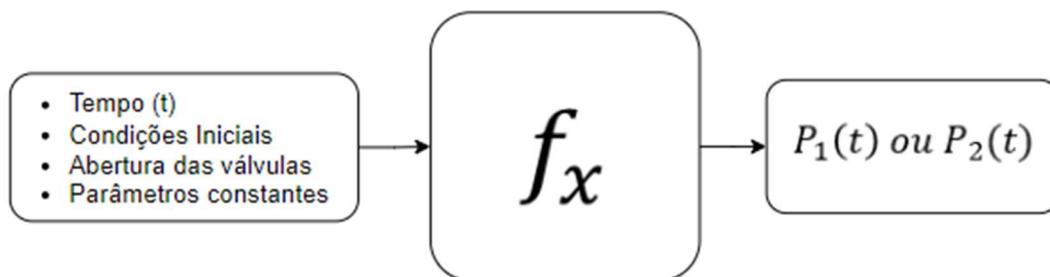
**Figura 5.3:** Fluxograma lógico do chaveamento da unidade de PSA.

Fonte: elaborado pelo autor.

O fluxograma apresentado na Figura 5.3 visa ilustrar todas as possíveis sequências lógicas associadas ao conjunto de válvulas de cada vaso na unidade. No contexto deste fluxograma,  $X_{ij} > 0$  indica que a válvula específica está aberta, enquanto  $X_{ij} = 0$  sugere que a válvula está fechada. Durante um instante específico do ciclo operacional, o processo inicia-se verificando quais linhas estão ativas para as válvulas do vaso 'i'. Em seguida, procede-se com a avaliação das interações possíveis com os demais vasos. Ao final, determina-se a etapa correspondente em que o vaso se encontra. Destaca-se que, durante o período de análise, haverá apenas uma sequência afirmativa para o vaso em questão. Importante ressaltar que as linhas da unidade, representadas por 'j', são predefinidas, uma vez que estas desempenham papéis específicos na unidade, determinando a etapa do vaso. Os quadros no lado inferior da imagem detalham as interações de cada vaso de adsorção com os demais, demonstrando que cada vaso possui um conjunto único de conexões e interações durante o ciclo.

### 5.3.2 Implementação das Equações do Modelo

Da mesma forma que um conjunto de válvulas abertas especifica a etapa em que o vaso está em um determinado instante, a etapa determina a equação do modelo que deve ser aplicada. Desse modo, ao identificar a etapa, uma função correspondente é invocada para calcular os valores de pressão em um determinado tempo.



**Figura 5.4:** Fluxograma de implementação com entradas, processamento e saídas.

Fonte: elaborado pelo autor.

Essa função requer todos os parâmetros presentes na equação (5.1) como entrada. A fim de simplificar a visualização desses parâmetros, a equação foi separada em termos das variáveis temporais, isto é, aquelas que variam com o tempo, e parâmetros constantes.

$$\frac{dP_i}{dt} = \pm \text{parâmetro}_j (\theta_{ij} Y_i P_i \sqrt{x}) \quad (5.2)$$

$$\text{parâmetro}_j = \frac{\sqrt{10^{-5}}}{3600} \frac{RT}{VM_j} \left( c_{vj} N_8 F_P \sqrt{\frac{M_j}{Z T_1}} \right) \quad (5.3)$$

Os valores do *parâmetro<sub>j</sub>* são definidos de acordo com a linha em que o fluxo de gás está percorrendo. Assim, é possível estabelecer seis diferentes possibilidades para essa constante, variando em termos do coeficiente de vazão da válvula e massa molar:

**Tabela 5.2:** Parâmetros constantes usados como *inputs* no cálculo do modelo.

Linha	Símbolo	Expressão
1	$parâmetro_1$	$\frac{\sqrt{10^{-5}}}{3600} \frac{RT}{VM_{feed}} \left( c_{v_1} N_8 F_P \sqrt{\frac{M_{feed}}{Z T_1}} \right)$
2	$parâmetro_2$	$\frac{\sqrt{10^{-5}}}{3600} \frac{RT}{VM} \left( c_{v_2} N_8 F_P \sqrt{\frac{M}{Z T_1}} \right)$
3	$parâmetro_3$	$\frac{\sqrt{10^{-5}}}{3600} \frac{RT}{VM} \left( c_{v_3} N_8 F_P \sqrt{\frac{M}{Z T_1}} \right)$
4	$parâmetro_4$	$\frac{\sqrt{10^{-5}}}{3600} \frac{RT}{VM_{purga}} \left( c_{v_4} N_8 F_P \sqrt{\frac{M_{purga}}{Z T_1}} \right)$
5	$parâmetro_5$	$\frac{\sqrt{10^{-5}}}{3600} \frac{RT}{VM} \left( c_{v_5} N_8 F_P \sqrt{\frac{M}{Z T_1}} \right)$
5 - reciclo	$parâmetro_{rp}$	$\frac{\sqrt{10^{-5}}}{3600} \frac{RT}{VM} \left( c_{v_{rp}} N_8 F_P \sqrt{\frac{M}{Z T_1}} \right)$

Fonte: elaborado pelo autor.

A função atribuída a cada etapa resume-se a um sistema de equações diferenciais que retorna a pressão do sistema em um determinado instante. Detalhes específicos, incluindo as funções aplicadas em cada etapa do ciclo, exemplificando os parâmetros e as válvulas da unidade envolvidas, bem como a pressão de saída correspondente, podem ser encontrados no Apêndice C.

## 5.4 Estratégias de Simulação

### 5.4.1 Condições Iniciais

No âmbito da simulação dinâmica, as condições iniciais são essenciais para definir o estado inicial do sistema. No modelo em questão, as condições iniciais foram atribuídas para cada caso de forma que a pressão ao final de uma etapa é a pressão inicial da etapa seguinte. Dessa forma, garante-se a continuidade na representação do ciclo, definindo apenas a pressão no início da simulação. Essa pressão no início foi definida como sendo igual à obtida com dados da planta industrial real. Logo, no contexto da simulação, tanto o modelo quanto as pressões reais partem do mesmo valor.

### 5.4.2 Tempo das Etapas e Resolução do Sistema

O tempo de cada etapa é delimitado de acordo com o tempo em que as válvulas envolvidas no processo estão abertas. Logo, assim como o valor da abertura efetiva das válvulas, o tempo de cada etapa durante a condução da simulação é um valor extraído dos dados da planta real. Cabe ressaltar que a amostragem para a curva do modelo é a mesma obtida com os dados reais, sendo esta igual a 15 segundos. Por fim, destaca-se que as equações diferenciais atribuídas a cada função são calculadas por métodos numéricos, especificamente, por meio do método de Runge-Kutta de quarta ordem (RK4).

## 5.5 Abordagens de Simulação

Para simular os resultados, buscou-se realizar duas abordagens distintas. Uma direcionada para a simulação em um intervalo que compreende um ciclo completo da PSA, contemplando todas as suas etapas. Simulando tanto a operação de um único vaso quanto a interação simultânea de todos os vasos. E a outra ampliando o escopo da simulação para um intervalo mais extenso, abrangendo a operação cíclica do processo.

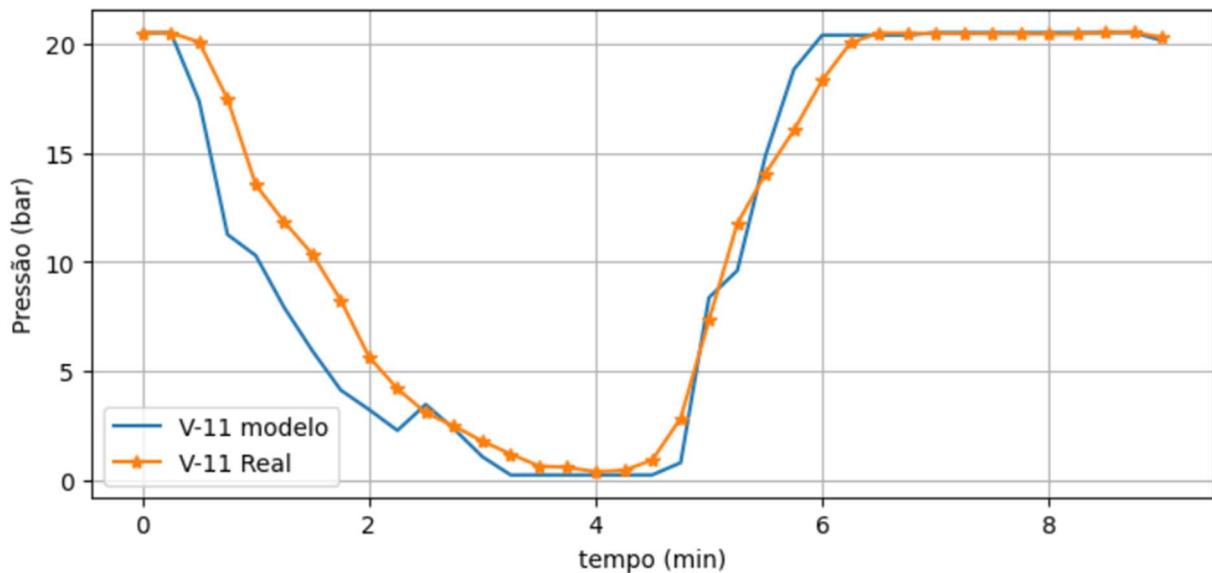
Os resultados dessas simulações serão apresentados no próximo capítulo, permitindo uma análise comparativa entre os dados reais e os dados obtidos com as funções definidas no modelo.

## 6 Resultados e Discussões

Nesta seção, buscou-se apresentar os resultados da simulação adotada para cada abordagem. Inicialmente, será discutido o comportamento da pressão em um único vaso ao longo de um ciclo completo. Em seguida, será abordado os resultados dos seis vasos em um contexto de operação contínua, demonstrando o caráter oscilatório do ciclo de PSA.

### 6.1 Análise Gráfica Comparativa entre Simulação e Dados de Planta

Para validação do modelo, comparou-se em um mesmo intervalo as curvas obtidas com dados reais da planta industrial (curva em laranja) e dados obtidos pela aplicação das equações do modelo (curva em azul).



**Figura 6.1:** Comparação entre o perfil de pressão simulado pelo modelo e o perfil obtido com dados reais da planta para o vaso V-11 ao longo de um ciclo completo.

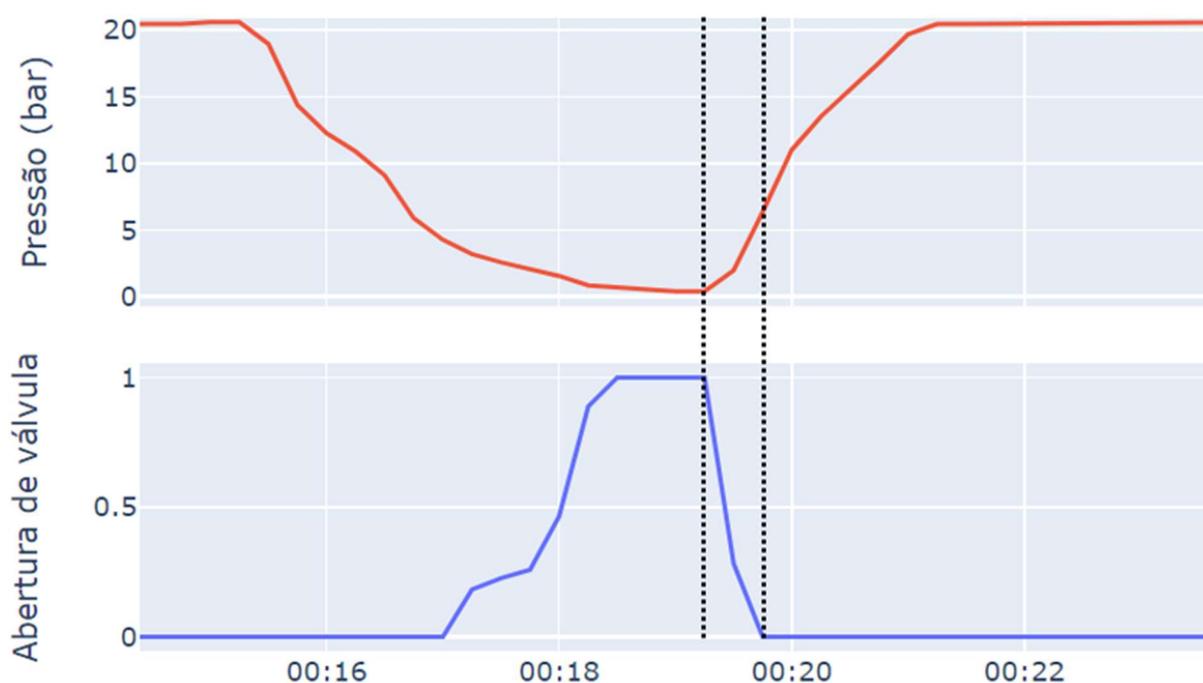
Fonte: elaborado pelo autor.

A partir da Figura 6.1 é possível extrair que o modelo matemático conseguiu capturar a dinâmica de cada etapa individual do ciclo de PSA, com diminuição gradual de pressão até a etapa de purga, seguido do aumento de pressão durante o processo de repressurização até a etapa de adsorção.

Nota-se também algumas divergências, como no caso da simulação apresentar um comportamento mais acelerado durante a despressurização do leito. Essa disparidade pode ser atribuída às aproximações adotadas no modelo, especialmente ao fato de que, nas etapas de equalização e promover purga, a pressão é calculada em função da variável "*Paux*", a qual foi aproximada por uma solução analítica. A incerteza gerada por essa aproximação também explica um aumento inesperado de pressão no início da fase de purga (etapa P2). No entanto, observa-se que esse comportamento se ajusta ao real em um curto intervalo de tempo, não comprometendo a validade global dos resultados.

Outro fator de incerteza pode ser atribuído ao elevado tempo de amostragem adotado neste estudo, fixado em intervalos de 15 segundos. Considerando a presença de válvulas de abertura contínua na unidade, a posição do obturador pode assumir valores intermediários até que a válvula esteja totalmente fechada ou aberta. Assim, com a frequência de amostragem utilizada, a abertura ( $\theta_{ij}$ ) é registrada como um valor constante a cada 15 segundos, servindo como *input* nas equações do modelo. No entanto, é sabido que em momentos específicos do ciclo, a válvula pode variar sua abertura de forma significativa durante esse intervalo, introduzindo distorções nos resultados do modelo. Essa distorção se manifesta tanto na discrepância entre as pressões simuladas pelo modelo e as medidas nos dados de planta quanto no tempo atribuído as etapas no modelo em comparação com os dados reais.

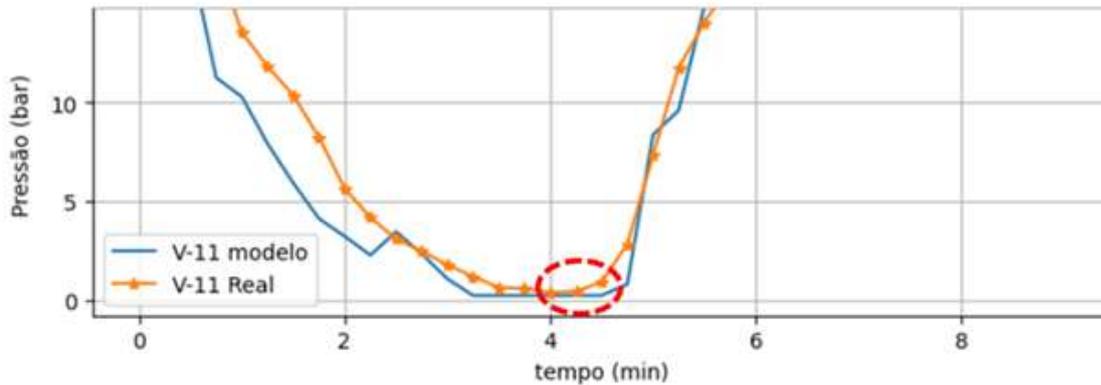
A figura abaixo com dados reais de planta visa ilustrar como a amostragem impacta no tempo das etapas pela lógica do modelo.



**Figura 6.2:** Perfil de pressão real do vaso V-11 e, abaixo, abertura da válvula X<sub>14</sub> durante um mesmo intervalo durante o ciclo operacional. Fonte: elaborado pelo autor.

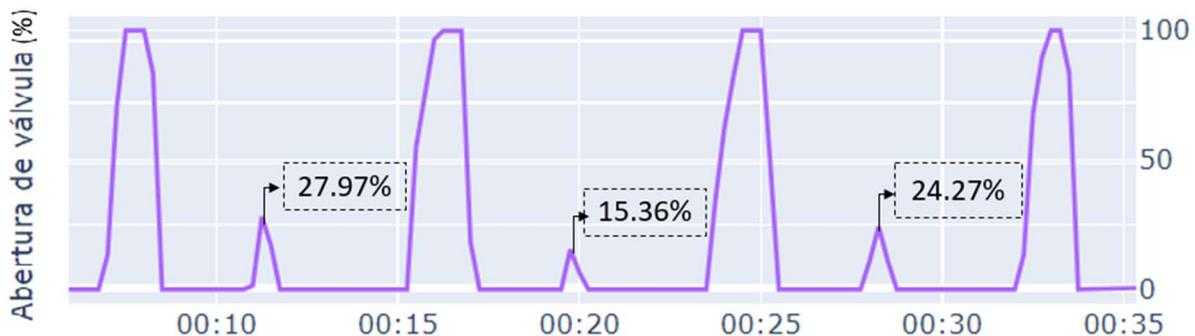
Sabe-se que a válvula X<sub>14</sub> está localizada na linha 4, participando, assim, das etapas de promover purga e descarga. Portanto, a válvula está vinculada ao processo de despressurização do leito. No entanto, observa-se que durante o intervalo delimitado pelas linhas pontilhadas, o vaso está em processo de pressurização, enquanto a válvula permanece aberta. Isso sugere que o fechamento da válvula de descarga após a etapa de purga (P1) não é instantâneo, levando alguns segundos para ser concluído. Como, na lógica do modelo, as etapas do PSA são determinadas pela abertura ou fechamento das válvulas, essa dinâmica de fechamento gradual impacta diretamente no tempo em que o vaso permanece na etapa de purga. Essa discrepância decorre da lógica de chaveamento adotada no modelo, que interpreta a fase de purga enquanto a válvula de descarga (X<sub>14</sub>) ainda está aberta, não reproduzindo com exatidão a transição adequada entre as etapas.

A Figura 6.3 ilustra as consequências de um intervalo elevado de amostragem na transição entre as etapas. Observa-se que, na realidade, o vaso já está na fase de repressurização, enquanto, no modelo, ainda permanece na etapa de purga.



**Figura 6.3:** Comparação temporal das fases de purga, evidenciando a discrepância entre os resultados do modelo e os dados reais. Fonte: elaborado pelo autor.

O elevado intervalo de amostragem também provoca imprecisões nos cálculos de pressão do modelo devido às variações consideráveis nos valores de abertura das válvulas durante cada intervalo de 15 segundos. A Figura 6.4 ilustra essa circunstância.



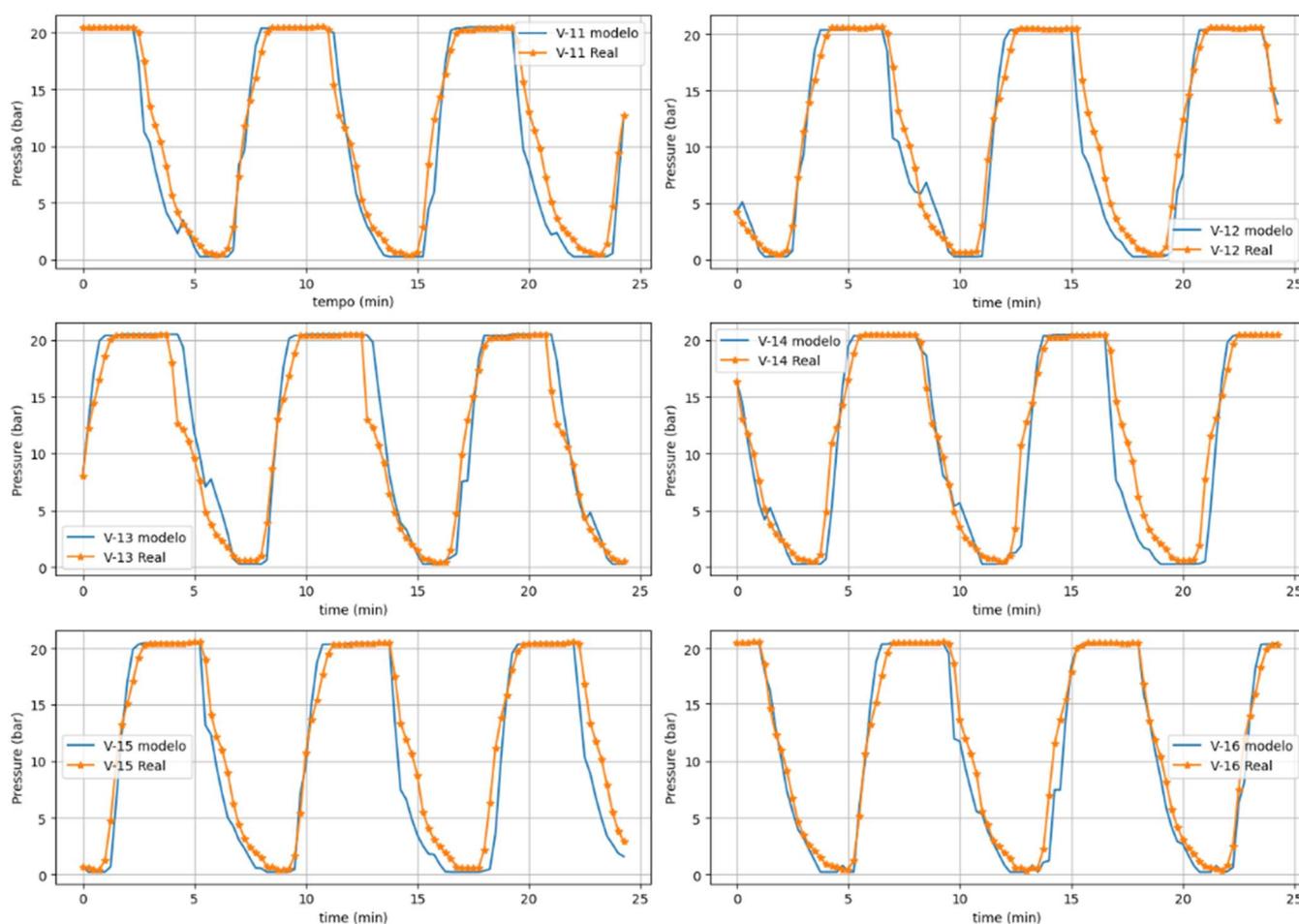
**Figura 6.4:** Comportamento de abertura da válvula X<sub>15</sub> ao longo do ciclo operacional. Fonte: elaborado pelo autor.

As válvulas da linha 5 estão relacionadas aos processos de repressurização com produto (R0 e R01) e equalização (E1 e R1). Na Figura 6.4, destacou-se os valores de abertura durante a etapa de promover equalização (E1), com uma duração estimada de 30 segundos. Observa-se que, nesse cenário, em que a etapa ocorre em um intervalo de tempo próximo ao período de amostragem, é capturado um único valor de abertura, representado por um pico. Esse valor, ao ser considerado constante ao longo da etapa, pode resultar na propagação de erros, dependendo do valor capturado no instante da amostragem.

Os valores apresentados pelas setas refletem as variações capturadas em três ciclos distintos, exemplificando essas oscilações. Em última análise, esse cenário revela que etapas com tempos próximos ao intervalo de amostragem tendem a apresentar maior propensão a erros nos resultados do modelo.

Outro ponto de atenção reside na aproximação da massa molar, em que se considerou um valor constante para a linha de alimentação e purga, baseando-se nos dados de projeto obtidos pelo manual da unidade de PSA em estudo. No entanto, é importante notar que, na prática, a composição de cada elemento nessas correntes pode sofrer pequenas variações ao longo do tempo, de acordo com a composição da carga e condições de operação da UGH. Portanto, não é garantido que esses valores coincidam exatamente com os dados de projeto.

Dado que o processo de PSA acontece de forma sincronizada com vários vasos operando simultaneamente, foram traçados os perfis de todos os vasos, comparando-os com seus respectivos dados de planta ao longo de um intervalo do ciclo operacional.

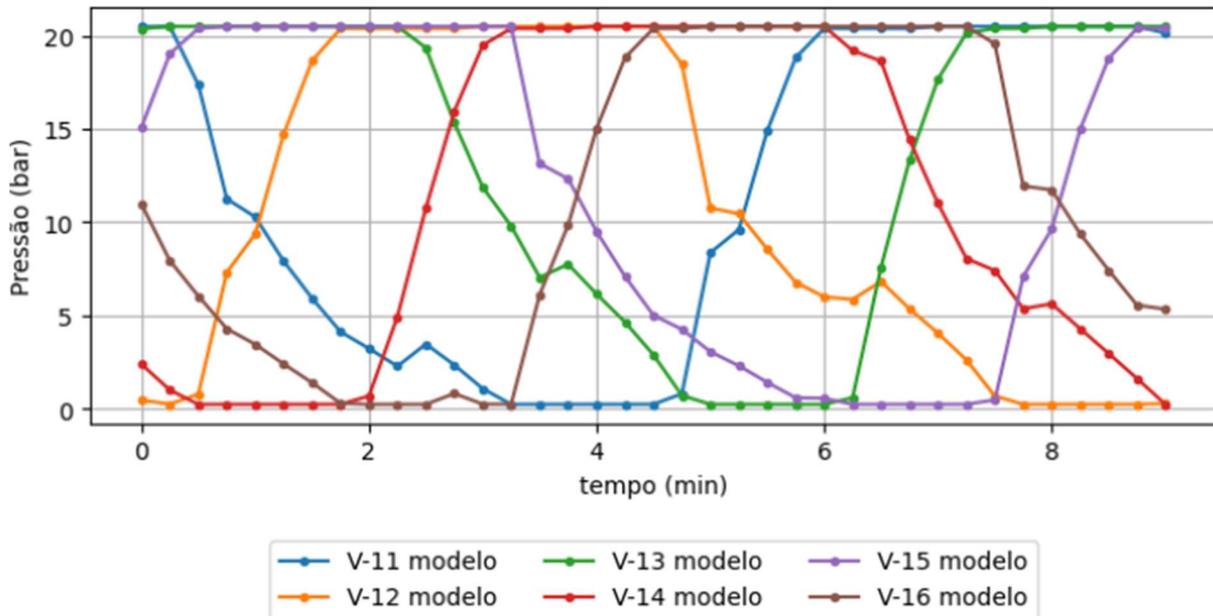


**Figura 6.5:** Comparativo entre múltiplos vasos ao longo da operação contínua.

Fonte: elaborado pelo autor.

No âmbito da operação cíclica contínua, é evidente que a implementação permanece válida, apresentando poucas distorções à medida que o sistema oscila entre novos ciclos. Adicionalmente, no que diz respeito à automação, a simulação se revela apropriada, progredindo automaticamente para novos ciclos a partir de um único valor inicial.

Por fim, plotou-se o perfil de ambos os vasos simultaneamente durante as dezoito etapas de um ciclo completo:



**Figura 6.6:** Perfil de pressão dos seis vasos da unidade ao longo de um ciclo completo.

Fonte: elaborado pelo autor.

A representação conjunta dos perfis de pressão possibilita a visualização das etapas individuais de cada vaso, destacando seus sincronismos e chaveamentos. Dessa forma, o modelo revela-se uma ferramenta eficaz para retratar o estado de cada vaso em momentos específicos do processo, capturando a essência do chaveamento entre os leitos e as diversas etapas.

## 6.2 Análise Numérica dos Desvios entre Simulação e Dados de Planta

Com o objetivo de quantificar a dimensão dos desvios entre os resultados obtidos na simulação do modelo e os dados provenientes da planta, buscou-se calcular o Erro Médio Absoluto (EMA). Assim, foi estimado o erro geral para cada vaso, contemplando todas as etapas da PSA, e o erro individual associado a cada etapa separadamente. Para essa análise, considerou-se o mesmo intervalo apresentado na Figura 6.5, o qual apresenta todas as etapas realizadas durante um intervalo que contempla múltiplos ciclos.

A Tabela 6.1 apresenta os valores medidos em bar para a pressão real ( $P_{real}$ ), provenientes dos dados da planta, e os valores simulados ( $P_{modelo}$ ) para o vaso V-11. Além disso, são fornecidos os desvios absolutos e as correspondentes etapas consideradas no modelo durante a simulação.

**Tabela 6.1:** Valores de pressão medidos e simulados por etapa (Vaso V-11).

<i>P</i> real (bar)	<i>P</i> modelo (bar)	Desvio Absoluto (bar)	Etapa - Modelo
20,48	20,49	0,01	Adsorção
20,06	17,36	2,70	Promover Equalização 1
17,46	11,26	6,21	Promover Equalização 1
13,53	10,61	2,92	Promover Purga 1
11,84	8,17	3,67	Promover Purga 1
10,35	6,11	4,24	Promover Purga 1
8,25	4,26	3,99	Promover Equalização 2
5,65	3,34	2,31	Promover Purga 2
4,20	2,36	1,84	Promover Purga 2
3,10	1,81	1,29	Promover Purga 2
2,49	0,95	1,54	Descarga
1,80	0,25	1,55	Descarga
1,21	0,25	0,96	Purga 2
0,66	0,25	0,41	Purga 2
0,59	0,25	0,34	Purga 2
0,40	0,25	0,15	Purga 1
0,46	0,25	0,21	Purga 1
0,94	0,26	0,68	Purga 1
2,85	0,81	2,04	Receber Equalização 2
7,33	8,36	1,03	Receber Equalização 1
11,75	9,60	2,15	Receber Equalização 1
14,05	14,88	0,83	Pressurização c/ Produto
16,03	18,82	2,79	Pressurização c/ Produto
18,32	20,38	2,06	Pressurização c/ Produto
20,02	20,38	0,36	Pressurização c/ Produto
20,47	20,38	0,09	Pressurização c/ Produto
20,47	20,38	0,09	Pressurização c/ Produto
20,46	20,49	0,03	Adsorção
20,45	20,49	0,04	Adsorção
20,44	20,49	0,05	Adsorção
20,43	20,49	0,06	Adsorção
20,42	20,49	0,07	Adsorção
20,42	20,49	0,07	Adsorção
20,51	20,49	0,02	Adsorção
20,51	20,49	0,02	Adsorção
20,28	20,13	0,15	Promover Equalização 1

Fonte: elaborado pelo autor.

Considerando os dados apresentados na tabela anterior, realizou-se o cálculo do Erro Médio Absoluto (EMA) para cada etapa específica do vaso V-11.

**Tabela 6.2:** Valores do erro médio absoluto (EMA) para cada etapa.

Símbolo	Etapa	EMA (bar)
A1- A6	Adsorção	0,04
E1	Promover Equalização 1	3,02
PP1	Promover Purga 1	3,61
E2	Promover Equalização 2	3,99
PP2	Promover Purga 2	1,81
D1-D2	Descarga	1,54
P2	Purga 2	0,57
P1	Purga 1	0,35
R2	Receber Equalização 2	2,04
R1	Receber Equalização 1	1,59
RO e R01	Pressurização c/ Produto	1,04

Fonte: elaborado pelo autor.

Os resultados apresentados permitem a quantificação dos erros em cada etapa. Por exemplo, na fase de equalização 1 (E1), a pressão simulada no vaso mostrou um desvio de  $\pm 3$  bar em relação aos dados reais da planta. Já na última etapa de purga (P1), o desvio foi de  $\pm 0,35$  bar.

No entanto, a fim de efetivamente avaliar a aceitabilidade do erro, levou-se em conta a amplitude de pressão associada a cada etapa. Para isso, foram examinados os intervalos de pressão em diversos ciclos, e uma amplitude média de pressão no vaso durante a respectiva etapa foi estimada. Com base nisso, o erro percentual relacionado à etapa em questão foi calculado.

**Tabela 6.3:** Erro percentual por etapa.

Etapa	EMA (bar)	Intervalo Médio Observado	Amplitude Média Observada (bar)	Erro (%)
Adsorção	0,04	20,30 - 20,50	0,20	20%
Promover Equalização 1	3,02	20,50 - 12,50	8,00	38%
Promover Purga 1	3,61	12,50 - 9,50	3,00	120%
Promover Equalização 2	3,99	9,50 - 5,00	4,50	89%
Promover Purga 2	1,81	5,00 - 3,00	2,00	91%
Descarga	1,54	3,00 - 0,65	2,35	66%
Purga 2	0,57	0,65 - 0,50	0,15	379%
Purga 1	0,35	0,50 - 0,35	0,15	231%
Receber Equalização 2	2,04	0,35 - 3,00	2,65	77%
Receber Equalização 1	1,59	3,00 - 12,00	9,00	18%
Pressurização c/ Produto	1,04	12,00 - 20,30	8,30	12%

Fonte: elaborado pelo autor.

Em que:

$$Erro (\%) = \frac{Erro\ Médio\ Absoluto\ (bar)}{Amplitude\ Média\ Observada\ (bar)} * 100\% \quad (6.1)$$

A análise dos resultados evidencia a capacidade do modelo em representar satisfatoriamente determinadas etapas do processo, ao passo que em outras demonstra menor eficácia. Destacam-se desempenhos superiores nas fases de Adsorção, Promover Equalização 1 (E1), Receber Equalização 1 (R1) e Pressurização com Produto. Entretanto, é notável que as etapas de "Purga 1" e "Purga 2" revelam erros percentuais consideravelmente significativos. Essa discrepância pode ser atribuída, em grande parte, à elevada frequência de amostragem, uma vez que esse parâmetro impacta em diversos fatores nos resultados, como anteriormente abordado.

Além disso, ressalta-se que a amplitude média observada, apresentada na tabela acima, não representa uma medida exata, mas sim um valor obtido por meio de análise visual dos dados reais medidos. Esses dados, por sua vez, também são coletados em intervalos de 15 segundos, podendo, assim, apresentar desvios em relação à realidade. Essa consideração é essencial ao interpretar os resultados, reconhecendo a limitação intrínseca da amostragem temporal na obtenção de medidas com relativa exatidão.

Ao final, procedeu-se à comparação dos resultados obtidos para todos os vasos em um intervalo abrangendo múltiplos ciclos contendo todas as suas etapas. Desta maneira, a tabela a seguir apresenta o Erro Médio Absoluto Global de cada vaso, sem distinguir etapas separadamente:

**Tabela 6.4:** Erro médio absoluto global para todos os vasos.

VASO	EMA Global (bar)
V-11	1,30
V-12	1,24
V-13	1,53
V-14	0,89
V-15	1,18
V-16	1,04

Fonte: elaborado pelo autor.

A análise global dos resultados, com os EMAs variando de 0,89 a 1,53 bar para os diferentes vasos, sugere que, embora o modelo não seja ideal para a obtenção exata de valores em etapas específicas, ele conseguiu capturar a dinâmica geral do processo PSA. Este desempenho é notável, considerando que o sistema global opera em intervalos de pressão consideráveis, variando de 20,5 bar a 0,35 bar. Nesse contexto, o erro percentual global fica em torno de 7,5%, o que torna o modelo aplicável em diversas situações práticas que não demandem um elevado grau de exatidão.

## 7 Conclusões e Trabalhos Futuros

Considerando que o erro médio absoluto global obtido para todos os vasos da unidade foi de até 1,53 bar, representando em um erro percentual médio de até 7,5%, pode-se afirmar que, de maneira geral, o modelo demonstrou-se um método capaz de capturar a dinâmica de cada etapa e do processo da PSA.

Desse modo, mesmo com todas as simplificações e considerações incorporadas ao modelo, este se mostra uma ferramenta útil para simular o comportamento do processo da PSA em tempo real. Ao aplicar dados de abertura da válvula em tempo real, torna-se possível uma análise contínua e detalhada do comportamento desse parâmetro ao longo de todo o processo, o que possibilitaria, inclusive, a identificação de falhas durante a operação.

No entanto, o modelo apresenta algumas limitações no que se refere às medidas de pressão, exibindo distorções em relação aos dados da planta. Dessa forma, pode-se concluir que a frequência de amostragem contribui no desempenho do modelo. Para amostragem em intervalos de tempo menores, é esperado que o modelo esteja mais aderente aos dados reais.

Considerando este trabalho como ponto de partida no desenvolvimento de um modelo capaz de simular uma unidade de PSA em tempo real, diversas melhorias podem ser exploradas em trabalhos futuros, visando obter resultados mais satisfatórios.

Aumentar a frequência de amostragem seria o ajuste mais essencial, melhorando substancialmente a identificação das etapas pelo modelo, o que possibilitaria a aplicação das equações corretas em cada momento. Isso resultaria na redução da propagação de erros e, conseqüentemente, na melhoria da aderência aos dados reais em todas as etapas.

Outras melhorias incluem ajustes mais sofisticados, como a realização de uma modelagem por componente presente na alimentação, incluindo conceitos como isotermas de adsorção. Isso possibilitaria identificar a quantidade adsorvida de cada espécie em um dado momento, eliminando as incertezas causadas pela aproximação da massa molar nas etapas que envolvem o fenômeno de adsorção.

Além disso, a massa molar foi aproximada a um valor constante em seus valores na linha de alimentação e purga. No entanto, é sabido que, na prática, a composição de cada elemento nessas correntes pode sofrer pequenas variações ao longo do tempo. Portanto, a introdução correta da massa molar nessas correntes, com base em análises recentes, poderia melhorar significativamente os resultados.

Adicionalmente, também poderiam ser explorados ajustes finos, como a inclusão de efeitos térmicos durante o processo, como efeito Joule-Thomson, e a consideração da não idealidade do gás ao longo do processo.

Por fim, o modelo dinâmico proposto permite a perturbação de diversas variáveis do processo, incluindo a abertura das válvulas da unidade. Desta forma, trabalhos futuros poderiam explorar essas simulações, aplicando técnicas de *Machine Learning* supervisionado à predição de falhas na unidade em questão, que representaria um dos caminhos promissores para aprimorar a aplicabilidade do modelo em cenários práticos.

## REFERÊNCIAS

BARG, Christian. Simulação e Otimização de Unidades Industriais PSA para Purificação de Hidrogênio. Porto Alegre, 2000.

Costa, E. A., Rebello, C. M., Schnitman, L., Loureiro, J. M., Ribeiro, A. M., & Nogueira, I. B. R. (2024). Adaptive digital twin for pressure swing adsorption systems: Integrating a novel feedback tracking system, online learning, and uncertainty assessment for enhanced performance. **Engineering Applications of Artificial Intelligence**, v. 127, Part B, 2024. ISSN 0952-1976. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.engappai.2023.107364>.

FELDER, R. M; ROUSSEAU R. **Princípios Elementares dos processos Químicos**. 3. Ed. Rio de Janeiro: LTC Editora, 2005.

Georgiadis, M. C.; Banga, J. R.; Pistikopoulos, E. N. (Eds.). **Process Systems Engineering. Volume 7: Dynamic Process Modeling**. Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2011.

PATRÍCIO, Paôlla Chrystine Pinheiro. Proposta de simulação dinâmica de colunas PSA (Pressure Swing Adsorption) para treinamento de operadores. Belo Horizonte, 2016.

PAVEGLIO, Rafael Rigon. Estudo de escoamento multifásico em válvulas choke através de fluidodinâmica computacional. Porto Alegre, 2023.

SILVA, Patrícia Rodrigues da. Modelagem e Simulação de uma Unidade de Geração de Hidrogênio para Desenvolvimento de Métricas de Eficiência Operacional. Porto Alegre, 2017.

TRINDADE, Daniel Sfredo. Detecção de falhas em válvulas borboleta em unidades de PSA. Porto Alegre, 2023.

ZHENG, L.; ZHANG, X. **Modeling and Analysis of Modern Fluid Problems**. 1. ed. London: Elsevier/Academic Press, 2017.

ÇENGEL, Yunus A.; CIMBALA, John M. Mecânica dos Fluidos - Fundamentos e Aplicações. 2012. ISSN 1259696537.v. 53

## APÊNDICE A

**Tabela A.1:** Funções e saídas correspondentes para cada etapa do vaso V-11.

Etapa	Conexão	Função ( $f_x$ )	Pressão (Saída)
A1 – A6	-	$\left\{ \frac{dP_1}{dt} = \text{parâmetro}_1 (\theta_{11} Y_1 P_{feed} \sqrt{x_1}) - \text{parâmetro}_2 (\theta_{12} Y_2 P_1 \sqrt{x_2}) \right\}$	$P_1(t)$
E1	V-12	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dP_1}{dt} = -\text{parâmetro}_5 (\theta_{15} Y_1 P_1 \sqrt{x_1}) \\ \frac{dP_2}{dt} = \text{parâmetro}_5 (\theta_{25} Y_2 P_{aux} \sqrt{x_2}) \end{array} \right\}$ $P_{aux} \xrightarrow{\text{conforme}} \text{eq. (4.18)}$	$P_1(t)$
PP1	V-14	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dP_1}{dt} = -\text{parâmetro}_3 (\theta_{13} Y_1 P_1 \sqrt{x_1}) \\ \frac{dP_2}{dt} = \text{parâmetro}_3 (\theta_{43} Y_2 P_{aux} \sqrt{x_2}) - \text{parâmetro}_4 (\theta_{44} Y_3 P_2 \sqrt{x_3}) \end{array} \right\}$ $P_{aux} \xrightarrow{\text{conforme}} \text{eq. (4.18)}$	$P_1(t)$
E2	V-14	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dP_1}{dt} = -\text{parâmetro}_5 (\theta_{15} Y_1 P_1 \sqrt{x_1}) \\ \frac{dP_2}{dt} = \text{parâmetro}_5 (\theta_{45} Y_2 P_{aux} \sqrt{x_2}) \end{array} \right\}$ $P_{aux} \xrightarrow{\text{conforme}} \text{eq. (4.18)}$	$P_1(t)$
PP2	V-16	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dP_1}{dt} = -\text{parâmetro}_3 (\theta_{13} Y_1 P_1 \sqrt{x_1}) \\ \frac{dP_2}{dt} = \text{parâmetro}_3 (\theta_{63} Y_2 P_{aux} \sqrt{x_2}) - \text{parâmetro}_4 (\theta_{64} Y_3 P_2 \sqrt{x_3}) \end{array} \right\}$ $P_{aux} \xrightarrow{\text{conforme}} \text{eq. (4.18)}$	$P_1(t)$
D1-D2	-	$\left\{ \frac{dP_1}{dt} = -\text{parâmetro}_4 (\theta_{14} Y P_1 \sqrt{x}) \right\}$	$P_1(t)$

P2	V-13	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dP_1}{dt} = -\text{parâmetro}_3 (\theta_{33} Y_1 P_1 \sqrt{x_1}) \\ \frac{dP_2}{dt} = \text{parâmetro}_3 (\theta_{13} Y_2 P_{aux} \sqrt{x_2}) - \text{parâmetro}_4 (\theta_{14} Y_3 P_2 \sqrt{x_3}) \end{array} \right\}$ $P_{aux} \xrightarrow{\text{conforme}} \text{eq. (4.18)}$	$P_2(t)$
P1	V-15	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dP_1}{dt} = -\text{parâmetro}_3 (\theta_{53} Y_1 P_1 \sqrt{x_1}) \\ \frac{dP_2}{dt} = \text{parâmetro}_3 (\theta_{13} Y_2 P_{aux} \sqrt{x_2}) - \text{parâmetro}_4 (\theta_{14} Y_3 P_2 \sqrt{x_3}) \end{array} \right\}$ $P_{aux} \xrightarrow{\text{conforme}} \text{eq. (4.18)}$	$P_2(t)$
R2	V-15	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dP_1}{dt} = -\text{parâmetro}_5 (\theta_{55} Y_1 P_1 \sqrt{x_1}) \\ \frac{dP_2}{dt} = \text{parâmetro}_5 (\theta_{15} Y_2 P_{aux} \sqrt{x_2}) \end{array} \right\}$ $P_{aux} \xrightarrow{\text{conforme}} \text{eq. (4.18)}$	$P_2(t)$
R1	V-12	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dP_1}{dt} = -\text{parâmetro}_5 (\theta_{25} Y_1 P_1 \sqrt{x_1}) \\ \frac{dP_2}{dt} = \text{parâmetro}_5 (\theta_{15} Y_2 P_{aux} \sqrt{x_2}) \end{array} \right\}$ $P_{aux} \xrightarrow{\text{conforme}} \text{eq. (4.18)}$	$P_2(t)$
R0-R01	-	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dP_1}{dt} = \text{parâmetro}_{rp} (\theta_{15} Y_1 P_{aux} \sqrt{x}) \end{array} \right\}$ $P_{aux} \xrightarrow{\text{conforme}} \text{eq. (4.26)}$	$P_2(t)$

Fonte: elaborado pelo autor.

## ANEXO A – MÉTODOS NUMÉRICOS PARA EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS

Métodos numéricos desempenham um papel fundamental na resolução de Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs), oferecendo soluções aproximadas para problemas complexos que não podem ser resolvidos analiticamente. Tais métodos são utilizados para encontrar aproximações numéricas das soluções de EDOs, também denominados como “integração numérica”. Nesse sentido, há uma variedade de métodos disponíveis na literatura, sendo que nesta seção, será apresentado a seguir uma revisão do método de Runge-Kutta de quarta ordem (RK4), conforme passos descritos por ZHENG e ZHANG 2017.

Para um dado problema de valor inicial de primeira ordem:

$$\begin{cases} y' = f(x, y), & a \leq x \leq b \\ y(a) = y_0 \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Para derivar o método de Runge-Kutta, dividimos o intervalo  $[a, b]$  em  $N$  subintervalos como  $[x_n, x_{n+1}]$  ( $n = 0, 1, \dots, N - 1$ ), integrando  $y' = f(x, y)$  ao longo de  $[x_n, x_{n+1}]$  e utilizando o teorema do valor médio para integrais, obtendo assim.

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx = hf(\xi, y(\xi)) \quad (\text{A.2})$$

Onde  $h = x_{n+1} - x_n$  e  $\xi \in [x_n, x_{n+1}]$ , i.e.,

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hf(\xi, y(\xi)) \quad (\text{A.3})$$

A equação (A.3) demonstra que existe pelo menos um ponto “ $\xi$ ” dentro do subintervalo  $[x_n, x_{n+1}]$ , cuja derivada da função assume um valor médio. Isso é uma aplicação do teorema do valor médio para integrais, que afirma que para uma função contínua em um intervalo fechado, há pelo menos um ponto onde a função atinge sua média ao longo desse intervalo.

Se aproximarmos  $f(\xi, y(\xi))$  pelos valores da combinação linear  $f(\xi_1, y(\xi_1)), f(\xi_2, y(\xi_2)), \dots, f(\xi_m, y(\xi_m))$  de  $f(x, y(x))$  no intervalo  $[x_n, x_{n+1}]$ , chegamos à forma geral do método de Runge-Kutta:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^m c_i f(\xi_i, y(\xi_i)) \quad (\text{A.4})$$

O uso da combinação linear na equação (A.4) é uma maneira de aproximar a derivada em  $\xi$  usando uma média ponderada dos valores da derivada em diferentes pontos. Os coeficientes  $c_i$  determinam como cada ponto contribui para a média. Já o termo “ $m$ ” representa o número de pontos intermediários utilizados para calcular uma média ponderada dos valores da derivada  $f(\xi_i, y(\xi_i))$ .

Ao escolher diferentes valores para os parâmetros  $m, c_i$  e  $\xi_i$  podemos obter diferentes fórmulas de cálculo para o método de Runge-Kutta. É possível obter uma fórmula de cálculo

de Runge-Kutta de ordem superior escolhendo valores adequados para esses parâmetros. A fórmula de Runge-Kutta mais amplamente utilizada é:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6} (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = hf(x_n, y_n) \\ K_2 = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}K_1\right) \\ K_3 = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}K_2\right) \\ K_4 = hf(x_n + h, y_n + K_3) \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

Esse sistema requer quatro valores da função em cada iteração do passo, também chamado de método de Runge-Kutta de quarta ordem.

## ANEXO B – DEDUÇÃO DA EQUAÇÃO DE ESCOAMENTO EM VÁLVULAS DE CONTROLE PARA FLUIDOS COMPRESSÍVEIS

A seguir será apresentado a equação básica empregada no dimensionamento de válvulas de controle para fluidos incompressíveis, explicando seu método de dedução com base no método proposto por Trierweiler (2021). Em seguida, esta equação será adaptada ao caso de fluidos compressíveis, assim como inserindo fatores de conversão de unidades, conforme apresentado por Paveglio (2023).

Primeiramente deve-se partir da equação de Bernoulli para fluidos incompressíveis com perda de carga:

$$g\Delta z + \frac{\Delta P}{\rho} + \frac{\Delta u^2}{2} = f_p = K_f \frac{u^2}{2} \quad (\text{B.1})$$

Sendo possível considerar desprezível a diferença de altura entre a entrada e saída da válvula ( $\Delta z = 0$ ), e considerando que os diâmetros de entrada e saída são iguais, a velocidade do fluido se mantém inalterada ( $\Delta u = 0$ ). Portanto, a equação pode ser simplificada da seguinte forma:

$$\frac{\Delta P}{\rho} = K_f \frac{u^2}{2} \quad (\text{B.2})$$

Isolando o termo de velocidade e reordenando a equação, tem-se:

$$u = \sqrt{\frac{2 \Delta P}{K_f \rho}} \quad (\text{B.3})$$

Definindo a vazão volumétrica como  $Q = u A$  e isolando o termo  $Q$  na equação:

$$Q = A \sqrt{\frac{2 \Delta P}{K_f \rho}} \quad (\text{B.4})$$

Ainda é possível multiplicar esta expressão por  $\sqrt{\rho_w}$  no numerador e denominador, sendo  $\rho_w$  a densidade da água, e assim, incluindo o termo de densidade relativa  $G_f (\rho/\rho_w)$  na equação:

$$Q = A \sqrt{\frac{2}{K_f \rho_w}} \sqrt{\frac{\Delta P}{G_f}} \quad (\text{B.5})$$

Conforme demonstrado por Paveglio (2023), a equação (B.5) pode ser convertida para o Sistema de Unidades Usuais dos Estados Unidos (USCS), em que a vazão volumétrica  $Q$  é expressa em galões por minuto (GPM), a área da seção transversal da tubulação  $A$  é dada em polegadas quadradas ( $\text{in}^2$ ), a densidade  $\rho$  em libra-massa por pé cúbico ( $\text{lbm}/\text{ft}^3$ ) e a pressão em psi. Dessa forma, a equação fica:

$$Q = \frac{38 A}{\sqrt{K_f}} \sqrt{\frac{\Delta P}{G_f}} \quad (\text{B.6})$$

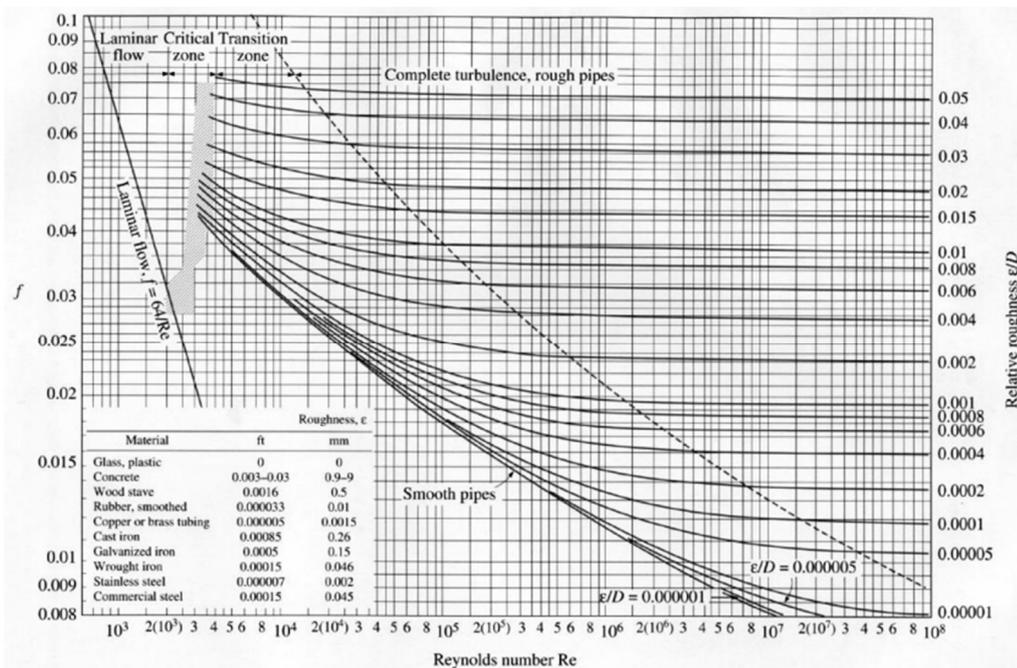
Por fim é possível definir o coeficiente de vazão ( $c_v$ ) da válvula como a relação dada por  $\frac{38.4}{\sqrt{K_f}}$ , chegando-se na expressão básica do dimensionamento de uma válvula de controle:

$$Q = c_v \sqrt{\frac{\Delta P}{G_f}} \quad (\text{B.7})$$

O  $C_v$  é um coeficiente relacionado à geometria de uma válvula, para uma determinada abertura, que pode ser usado para estabelecer a capacidade de vazão. Por definição é o número de galões por minuto (GPM) de água a 60 °F que fluirá através de uma válvula com uma queda de pressão de uma libra por polegada quadrada (psi) (EMERSON, 2005 apud PAVEGLIO, 2023). Dessa forma, o coeficiente de vazão ( $c_v$ ) tem como unidade  $\frac{\text{GPM}}{\sqrt{\text{psi}}}$ .

A equação (B.7) é válida para o escoamento de fluidos incompressíveis e newtonianos, em que o diâmetro de entrada é igual ao diâmetro de saída e o escoamento sendo totalmente turbulento.

A consideração de que o regime deve ser totalmente turbulento se deve ao fator de atrito de Moody,  $K_f$ , que nessas condições apresenta um valor constante que depende apenas da rugosidade relativa da superfície interna da tubulação. O diagrama de Moody na figura B.1 abaixo demonstra esse comportamento.



**Figura B.1:** Diagrama de Moody (ÇENGEL; CIMBALA, 2012).

Por outro lado, este também é o tipo de escoamento predominante nas indústrias, uma vez que os processos os quais ocorrem no regime totalmente turbulento, em geral, necessitam de menores comprimentos de tubulação para atingir um escoamento plenamente desenvolvido para uma dada vazão. Essa característica torna a equação (B.7) válida para uma ampla gama de casos práticos, podendo ser empregada em distintos processos industriais.

Conforme proposto por PAVEGLIO (2023), é possível incluir mais dois fatores,  $N_1$  e  $F_p$ , na equação básica da válvula (B.7), sendo  $N_1$  um termo de conversão de unidades e  $F_p$  um fator geométrico para corrigir casos em que o diâmetro da válvula é diferente da tubulação.

$$Q = c_v N_1 F_p \sqrt{\frac{\Delta P}{G_f}} \quad (\text{B.8})$$

Definindo a vazão mássica como  $\dot{m} = Q \rho$  e densidade relativa ( $G_f$ ) como a relação  $\frac{\rho}{\rho_w}$  a expressão para a vazão mássica fica:

$$\dot{m} = c_v N_1 F_p \sqrt{\rho_w} \sqrt{\Delta P \rho} \quad (\text{B.9})$$

Ainda, as constantes  $N_1$  e  $\sqrt{\rho_w}$  podem ser agrupadas em uma única constante  $N_6$ :

$$\dot{m} = c_v N_6 F_p \sqrt{\Delta P \rho} \quad (\text{B.10})$$

A equação acima (B.10) descreve a vazão mássica de um fluido incompressível que percorre uma válvula de controle. Como no estudo em questão o fluido se trata de uma corrente gasosa, é necessário realizar alguns ajustes para adequar esta equação ao escoamento de gases.

Sendo assim, é necessário incorporar o termo do fator de expansão  $Y$ , dessa forma as variações na massa específica do gás que escoam através da válvula são levadas em consideração.

$$\dot{m} = c_v N_6 F_p Y \sqrt{\Delta P \rho} \quad (\text{B.11})$$

Por definição, tem-se:

$$Y = 1 - \frac{x}{3\left(\frac{k}{1.4}\right)x_t} \quad (\text{B.12})$$

Em que  $x = \frac{\Delta P}{P_1}$ , isto é, a razão entre a queda de pressão através da válvula ( $\Delta P$ ) e a pressão na entrada da válvula ( $P_1$ ).  $k$  é a razão entre as capacidades caloríficas do gás a pressão e volume constante do gás  $\left(\frac{c_p}{c_v}\right)$ , que no caso do ar, esse valor é aproximadamente 1,4.  $x_t$  é o fator de queda de pressão crítica, sendo estabelecido pelo fabricante da válvula por testes laboratoriais. A importância significativa deste último parâmetro reside no fato de que, quando  $x > x_t$ , torna-se impossível aumentar a vazão, mesmo com o incremento na diferença de pressão entre a entrada e saída da válvula. Nesse cenário, o fluido entra em um regime denominado fluxo crítico.

Avaliando a massa específica nas condições de entrada para o caso de um gás real, tem-se por definição:

$$\rho_1 = \frac{P_1 M}{Z R T_1} \quad (\text{B.13})$$

Desse modo, a expressão resultante fica:

$$\dot{m} = c_v N_6 F_P Y \sqrt{\Delta P \frac{P_1 M}{Z R T_1}} \quad (\text{B.14})$$

Sendo  $\Delta P = x P_1$ , pode-se reajustar a equação da seguinte forma:

$$\dot{m} = c_v N_6 F_P Y P_1 \sqrt{\frac{x M}{Z R T_1}} \quad (\text{B.15})$$

Além disso, as constantes  $N_6$  e  $R$  podem ser agrupadas em um único valor  $N_8 = \frac{N_6}{\sqrt{R}}$

$$\dot{m} = c_v N_8 F_P Y P_1 \sqrt{\frac{x M}{Z T_1}} \quad (\text{B.16})$$

Por fim é necessário considerar que o coeficiente de vazão,  $C_v$ , depende da fração de abertura efetiva da válvula,  $\theta$ , sendo igual a 1 para o caso da válvula totalmente aberta e 0 para totalmente fechada, ou de maneira equivalente, uma abertura rotativa de 90° e 0° para o caso de uma válvula borboleta.

$$\dot{m} = c_v \theta N_8 F_P Y P_1 \sqrt{\frac{x M}{Z T_1}} \quad (\text{B.17})$$

O valor da constante  $N_8$  tem seus valores especificados na norma (ANSI/ISA 75.01.01, 2012), de acordo com o sistema de unidades de medida que será utilizado. Esses valores podem ser consultados na Tabela B.1 abaixo:

**Tabela B.1:** Valores da Constante  $N_8$ .

Constante $N$		Unidades Usadas nas Equações				
		$w$	$Q$	$P, \Delta P$	$\rho$	$T_1$
$N_8$	0,948	kg/h	-	kPa	-	K
	94,8	kg/h	-	Bar	-	K
	19,3	lbm/h	-	psia	-	°R

Fonte: ANSI/ISA 75.01.01 (2012) apud PAVEGLIO (2023).