



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
ENG07053 - TRABALHO DE DIPLOMAÇÃO EM
ENGENHARIA QUÍMICA



Detecção de falhas em válvulas borboleta em unidades de PSA

Autor: Daniel Sfreddo Trindade

Orientador: Prof. Dr. Jorge Otávio Trierweiler

Porto Alegre, agosto de 2023

Autor: Daniel Sfreddo Trindade

Detecção de falhas em válvulas borboleta em unidades de PSA

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: Prof. Dr. Jorge Otávio Trierweiler

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Marcelo Farenzena, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Eng. Herbert Campos Gonçalves Teixeira, Petrobras

M. Sc. Leonardo Mandler, DEQUI, UFRGS

Porto Alegre

2023

À Kamila Costa da Silva, minha noiva e companheira em todas as horas,
por seu cuidado e amor constante e infalível.

AGRADECIMENTOS

À Deus, por me proporcionar saúde, força e determinação para concluir esta etapa de graduação, por me guiar e iluminar nos meus anos mais difíceis, e por sempre me manter firme em meus princípios.

Ao meu orientador, Jorge Trierweiler, pelas valiosas orientações, por acreditar em meu trabalho, pela paciência e auxílio a todo momento, e pela inspiração do tema. Ao Herbert Teixeira, Marcelo Farenzena e ao Leonardo Mandler, pelas valiosas sugestões que auxiliaram na finalização do trabalho.

Aos meus pais, Irene e Flávio, por sempre me apoiarem financeira e emocionalmente, pela educação e pelos ensinamentos da importância de se buscar conhecimento e uma educação superior, de lutar pelo que se quer, da importância da palavra, do esforço e do trabalho. Ao meu irmão Eduardo, por abrir caminho e ser uma grande inspiração na vida e na engenharia, por me ensinar e dar o exemplo de que é possível encarar todos os desafios, apesar de todas as adversidades que encontramos durante a graduação, de nunca desistir e de que sempre há esperança. À minha noiva Kamila, minha melhor amiga e amor da minha vida, por ser uma grande inspiração pessoal e profissional, por sempre acreditar em meu potencial, por seu amor incondicional, seu grande coração e sua luz que diversas vezes me tirou da escuridão. À minha cunhada Debora, pelo exemplo de determinação, disciplina, gentileza e paciência inesgotável, por sempre cuidar de nossa família, por ser uma grande pessoa, uma grande guerreira e uma grande engenheira.

À minha sogra Cláudia, minha avó Zeli, meu cunhado Leonardo e sogro Luciano, por todo o apoio, amor, carinho, preocupação e acolhimento que recebi nestes últimos oito anos, e por serem grandes pessoas, que me inspiram diariamente.

À Eliana “Tete” e minha tia Claudete por me criarem com tanto afeto e cuidado, por sempre me trazerem felicidade e alegria, por serem mulheres fortes e gentis.

À minha madrastra Marisa, por sempre cuidar de meu pai com tanta dedicação, carinho e afeto, por trazer paz para nossas vidas, por ser uma grande mulher e uma grande batalhadora, por ser uma pessoa que sempre segue seus princípios e por me inspirar em ser uma pessoa melhor.

Ao meu primo e grande irmão de coração Luciano, sua esposa Priscila e filha Milena, à tia Matilde e tio Idali, por serem pessoas tão doces, trabalhadoras e por terem feito parte de minha vida e formação, sempre com muitas risadas, aprendizados e grandes emoções.

Aos meus amigos e família de coração, os BDMs, Padrin, Cross, Dougal, Bi, Lary, Benga, Gustavin, Erick Afonso, Leandrão, Carnelos, Kike, Lagartola; aos amigos Erick Barcelos, Denyson, Carlos e Lucas; por terem me aceitado como sou, por todos os momentos de risadas, descontração e conversas sobre a vida que tanto me aliviaram durante todos esses anos, e por serem pessoas incríveis.

Aos amigos e ex-colegas da Braskem, por todos os ensinamentos e oportunidades de crescimento e aprendizado. Em especial ao coordenador Marcelo Guarita e aos engenheiros Alyne, Geovane e Pedro, pela grande amizade e ensinamentos, que me guiaram e inspiraram como futuro engenheiro.

Aos colegas da Trisolutions, em especial à Simone Marcon, por sua grande amizade e inspiração no jeito de ser, e à Anna, Cingrid e Giovani, pela amizade e parceria no dia-a-dia e por todo o apoio, compreensão e positividade durante o desenvolvimento deste trabalho.

RESUMO

Em unidades de PSA, o processo de purificação de hidrogênio é orquestrado por sincronismos rápidos e chaveamentos complexos de válvulas entre leitos de adsorção pressurizados, onde a operação correta dessas válvulas é crucial para garantir uma alta eficiência e pureza do produto final. Por ser uma unidade intermediária do processo, o correto funcionamento das válvulas em unidades de PSA afeta também as cadeias produtivas adjacentes da refinaria, que fornecem alimentação a essa unidade ou dependem de suas correntes de hidrogênio purificado, como as unidades de hidrotratamento (HDT). Desta forma, a detecção proativa de falhas em válvulas de PSA pode ser uma estratégia interessante a fim de se manter a operação contínua de uma refinaria e evitar perdas potenciais de produção. Considerando a importância de um bom desempenho das válvulas envolvidas no processo, este trabalho visa desenvolver uma metodologia para detectar falhas de válvulas borboleta em unidades de PSA, com o objetivo de se evitar perdas de produção e paradas não programadas ocasionadas pela falha crítica dessas válvulas, auxiliando na otimização de seu tempo de manutenção através de uma melhor sincronia entre a equipe de operação, engenharia e manutenção.

O presente trabalho também tem como objetivo abrir caminho para estudos mais avançados que visem auxiliar o monitoramento, tomada de decisões e projetos de engenharia no ambiente industrial, em unidades de PSA. Através de modelagem de uma válvula borboleta e do balanço de massa de uma etapa de equalização, foram realizadas simulações com válvulas em funcionamento normal e com mal funcionamento, ditas em falha e com coeficiente de vazão menor que o de projeto. Tal abordagem demonstrou diferenças no comportamento de abertura das válvulas rotativas dessas válvulas para um mesmo perfil de pressão em uma mesma etapa do processo, indicando a diminuição do coeficiente de vazão da válvula com o passar do tempo. Através do acompanhamento das curvas de tendência encontradas para a variação de abertura das válvulas, é possível determinar a proximidade da válvula com o comportamento de falha crítica. Para estudos mais avançados onde o interesse repouse no comportamento temporal do avanço da falha, essa metodologia também pode ser aplicada. Desta forma, o estudo contribui para a detecção preventiva de falhas de válvulas borboleta em unidades de PSA, analisando uma etapa de equalização de pressão, através de uma estratégia com abordagem prática para o ambiente industrial, utilizando dados de pressão dos leitos de adsorção e abertura rotativas de válvulas durante operação. Os resultados obtidos demonstraram uma diferença perceptível no padrão de abertura das válvulas para uma mesma etapa do processo, onde válvulas em falha demonstraram variações de abertura maiores e posição de abertura mais próximas do máximo de 90°, indicando um desvio de eficiência no comportamento de abertura das válvulas simuladas com falha.

Palavras-chave: *Prevenção de falhas, Adsorção por pressões alternadas, Escoamento compressível monofásico, Válvulas Borboleta, Equalização de pressão, Modelagem e simulação, Unidades de PSA.*

ABSTRACT

In PSA units, the hydrogen purification process is orchestrated by rapid synchronization and complex valve switching between pressurized (adsorption) packed beds, where proper valve operation is crucial to ensure high efficiency and product purity. Being an intermediary process unit, the proper functioning of these valves on PSA units also impacts the adjacent production chains of the refinery, which provide feedstock or rely on their purified hydrogen streams, like hydroprocessing units (HDTs). Therefore, proactively detecting faults in PSA valves can be an interesting strategy to maintain continuous refinery operations and avert potential production losses. Acknowledging the importance of optimal valve performance in the process, this work aims to develop a methodology for detecting failures in butterfly valves within PSA units. The goal is to prevent production losses and unscheduled shutdowns caused by critical valve failures, aiding in maintenance optimization through better coordination among operational, engineering, and maintenance teams.

This work also aims to pave the way for advanced studies aimed at supporting monitoring, decision-making, and engineering projects in the industrial environment, particularly in PSA units. By modeling a butterfly valve and conducting mass balance analysis of a pressure equalization step, simulations were performed with normally functioning valves and valves with malfunctions, indicative of failure and reduced flow coefficient. This approach demonstrated differences in the rotary valve opening behavior for the same pressure profile in the equalization step, indicating a decrease in the valve's flow coefficient over time. By monitoring the trend curves for valve opening variation, it is possible to determine the proximity of the valve to critical failure behavior. For more advanced studies focusing on the temporal behavior of failure progression, this methodology can also be applied. Thus, the study contributes to the proactive detection of butterfly valve failures in PSA units, analyzing a pressure equalization step through a practical approach for the industrial setting, utilizing pressure data from the packed beds and rotary valve openings during operation.

Keywords: *Failure prevention, Pressure Swing Adsorption, Compressible single-phase flow, Butterfly valves, Pressure equalization, Modeling and simulation, PSA units.*

Sumário

Sumário	1
1 Introdução	2
1.1 Motivação	2
1.2 Objetivo	3
2 Revisão Bibliográfica	4
2.1 Simulação de Unidades Industriais PSA	4
2.2 Estudo de escoamento em válvulas	4
2.3 Modelagem de uma etapa de equalização de pressão (PSA)	5
3 Estudo de Caso	6
3.1 Unidade de geração de hidrogênio (UGH)	6
3.2 Descrição do processo e da unidade de PSA	7
4 Modelagem de Balanço de massa	17
4.1 Ideia básica	18
4.2 Modelagem	20
4.2.1 Válvula de controle – borboleta	20
4.2.2 Balanço de massa entre os vasos	24
5 Teste através de simulação da proposta	25
5.1 Válvula em funcionamento normal	28
5.2 Válvula com mau funcionamento	30
5.3 Comparação entre válvulas	32
6 Conclusões e sugestões para trabalhos futuros	34
Referências	36
Apêndice A - Dados de fabricante, válvulas borboleta PHC Series	37
Apêndice B - Modelagem rigorosa dos leitos de adsorção	38
B.1 Modelo e considerações	38
B.2 Isotermas de adsorção	39
B.3 Transferência de massa	39
B.4 Balanço de massa global	39
B.5 Balanço de massa por componente	40
B.6 Balanço de energia	40
B.7 Balanço de quantidade de movimento	40
B.8 Equação dos gases ideais	40
B.9 Cinética de transferência de massa	41
B.11 Pressão de equalização	41

1 Introdução

Refinarias desempenham um papel fundamental na economia e na sociedade, desencadeando impactos significativos tanto no âmbito financeiro quanto no desenvolvimento regional, contribuindo para a geração de receitas substanciais ao processar petróleo bruto e produzir derivados valiosos, tais como gasolina, diesel, querosene, lubrificantes e produtos petroquímicos, entre outros.

Nas unidades de hidrotreatamento (HDT) em refinarias ocorre uma etapa crucial no refino, onde impurezas, como enxofre e nitrogênio, são removidas do petróleo, resultando em produtos de maior qualidade e maior valor agregado. Essa melhoria na qualidade dos produtos finais não apenas garante uma ampla gama de produtos refinados, mas também otimiza o processo de produção, auxiliando na eficiência global. Além de ser um recurso valioso com diversas aplicações, o hidrogênio desempenha um papel preponderante nas unidades de hidrotreatamento (HDT), onde a utilização de hidrogênio de alta pureza é fundamental.

Neste cenário, a busca por hidrogênio de alta pureza tem impulsionado o desenvolvimento de tecnologias de purificação e produção. De acordo com essa perspectiva, as unidades PSA (*"Pressure Swing Adsorption"*) são a alternativa mais adequada uma vez que realizam a adsorção de impurezas através de leitos adsorventes pressurizados. Estas unidades permitem a obtenção de hidrogênio de alta pureza, podendo ser superior a 99,9% molar, graças ao seu processo de remoção seletiva de impurezas, empregando adsorventes específicos.

1.1 Motivação

A operação das unidades de PSA, em sua essência, é sustentada pelo ciclo de Skarstrom (1960), originalmente projetado para um sistema com dois leitos e quatro etapas, capaz de possibilitar um fluxo virtualmente ininterrupto de produto. Modificações posteriores a esse ciclo 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, classificados como adsorção e regeneração (dos leitos), é responsável pela separação dos gases, resultando em correntes de hidrogênio de alta pureza.

A precisão na alternância sequencial das etapas de regeneração e a etapa de adsorção é crucial ao processo de uma unidade de PSA. Esse sequenciamento é feito de uma forma que, enquanto um leito está na etapa de adsorção, os demais estão em processo de regeneração. A alternância entre essas etapas é diretamente influenciada pelo adequado funcionamento das válvulas envolvidas, onde a sincronização precisa e abertura correta desses componentes é responsável pelo desempenho e otimização da unidade, o que assegura a pureza do hidrogênio produzido e viabiliza seu fornecimento ininterrupto.

Por extensão, o bom funcionamento das válvulas de uma unidade de PSA se torna essencial não apenas para o funcionamento da própria unidade, mas também para as unidades que dependem de sua produção constante. Válvulas com o funcionamento inadequado têm o potencial de prejudicar a eficiência geral da unidade, podendo gerar impactos na qualidade do produto final e em unidades adjacentes.

1.2 Objetivo

A detecção de falhas nas válvulas de unidades de PSA se apresenta como uma solução potencial no auxílio à manutenção da operação contínua das unidades de PSA, visto que uma válvula em falha pode levar à retirada de um dos leitos de operação, afetando a produção e possivelmente toda a cadeia de suprimento de uma refinaria. Dessa forma, a identificação preventiva de falhas pode assumir um papel crucial no processo como um todo, tendo em vista que falhas não identificadas podem suscitar essas perdas substanciais de produção e até mesmo levar a paradas de manutenção inesperadas.

A prevenção dessas ocorrências, viabilizada pela detecção de falhas em válvulas, assume um papel ímpar na busca pela eficiência e produção ininterrupta em refinarias, auxiliando na minimização de perdas e estabilidade de produção, além de preservar a continuidade operacional.

Portanto, o objetivo deste trabalho é desenvolver uma metodologia que auxilie a detecção de falhas de válvulas em unidades de PSA, viabilizando o desenvolvimento de uma métrica que monitore o desempenho das válvulas de controle usadas nos chaveamentos dos vasos de forma a auxiliar a tomada de decisão e o acompanhamento de objetivos específicos.

2 Revisão Bibliográfica

2.1 Simulação de Unidades Industriais PSA

BARG (2000) apresentou um modelo para simulação de unidades industriais de purificação de hidrogênio, se diferenciando de trabalhos anteriores por levar em consideração várias camadas de adsorventes e operando as unidades de PSA em diferentes etapas, portanto mais complexas, a fim de representar as plantas de forma quantitativa e com maior fidelidade. Também foi feita modelagem matemática que proporcionou a oportunidade de otimização de variáveis operacionais. Expôs o processo de unidades de PSA, fornecendo informações valiosas para o desenvolvimento de outros trabalhos que utilizem unidades ou sistemas parecidos, como é o caso do atual trabalho.

PATRÍCIO (2016) desenvolveu um estudo sobre Sistemas de Treinamento de Operadores (OTS), ferramentas eficazes e econômicas com o objetivo de garantir operações seguras e eficientes unidades industriais, oportunizando treinamento adequado dos operadores, permitindo a capacitação de operadores de forma segura e com baixo custo.

PATRÍCIO (2016) desenvolveu um modelo matemático dinâmico para uma coluna de adsorção usada na purificação de hidrogênio. Esse modelo foi validado por dados da literatura e também comparado com resultados de uma planta industrial real. Parâmetros como temperatura, pressão e fluxo foram variados para avaliar o comportamento da simulação em comparação com a teoria.

A unidade modular, representando a coluna de adsorção, foi integrada a um simulador comercial chamado DYNOSIM, utilizando o Excel para comunicação. O sistema modular pôde receber dados de entrada e enviar resultados de saída para o simulador durante a etapa de adsorção. A operação da unidade foi controlada usando cenários definidos no simulador, o que permitiu a simulação do ciclo de operação do processo de adsorção.

A simulação desenvolvida permite que os operadores acompanhem o processo e ganhem experiência em um ambiente virtual sem riscos, lembrando um *digital twin*. Os resultados da simulação foram semelhantes aos obtidos em uma planta real.

O trabalho destaca a importância da modelagem matemática, simulação dinâmica e integração com simuladores comerciais na construção de sistemas de treinamento de operadores para unidades de purificação de hidrogênio. A simulação proporciona um ambiente seguro e eficiente para capacitar operadores, permitindo que eles adquiram experiência prática sem expor a riscos reais (e possíveis perdas financeiras para a refinaria).

No sentido desse trabalho, forneceu muitas informações valiosas acerca do processo de unidades de PSA, principalmente nos dados de tempo e perfil de pressão das diferentes etapas, com diferentes quantidades de leitos, que auxiliaram no desenvolvimento do estudo de caso simplificado (dois vasos e uma válvula).

2.2 Estudo de escoamento em válvulas

PAVEGLIO (2023) desenvolveu um estudo com o objetivo de avaliar a aplicação de correlações de válvulas de controle, especificamente em uma válvula choke localizada no topside da plataforma, para estimar a vazão do fluido. Semelhantemente, o estudo foi

aproveitado no atual trabalho para modelar uma válvula borboleta em escoamento compressível monofásico.

A medição de vazão precisa é importante para monitorar e gerenciar o processo de exploração e produção de petróleo e gás. A natureza complexa da mistura de fluidos e os diferentes padrões de escoamento dificultam a medição precisa da vazão. Nesse sentido, foram empregados diversos métodos, como testes de poço e medidores multifásicos, mas cada um possui limitações em termos de custo, precisão e aplicabilidade.

O estudo buscou explorar o potencial das correlações de válvulas de controle aplicadas à válvula choke para estimar a vazão do fluido. Foi exposto que a abordagem numérica oferece vantagens em termos de flexibilidade para simular diferentes cenários, mas também possui desafios, como refinamento de malha e escolha de modelos numéricos.

O objetivo geral desse estudo foi avaliar a aplicação de correlações de válvulas de controle para estimar a vazão em uma válvula choke em plataformas petrolíferas. A pesquisa contribui para a busca de métodos mais eficazes e precisos para a estimação de vazão em plataformas petrolíferas.

2.3 Modelagem de uma etapa de equalização de pressão (PSA)

Chahbani et al. (2017) desenvolveram uma modelagem precisa da etapa de equalização de pressão em ciclos de PSA, visto que é de extrema importância para a previsão acurada do desempenho global do ciclo. A equalização de pressão entre um leito de adsorção e um tanque exerce um efeito considerado importante nesse processo. No entanto, estudos que abordam especificamente a equalização de pressão entre esses componentes tem sido escassos na literatura. Diversos fatores podem afetar a precisão da simulação dinâmica da equalização de pressão entre um leito e um tanque vazio. O método empregado para avaliar a pressão de equilíbrio tem um impacto significativo nos resultados da simulação. Devido à complexidade do conjunto de equações diferenciais parciais envolvidas, a pressão de equilíbrio exata (P_{eq}) obtida ao conectar uma coluna de adsorção a um tanque vazio só pode ser determinada por meio de simulação numérica.

Chahbani et al. (2017) demonstrou que, com algumas simplificações, é possível determinar analiticamente a pressão de equilíbrio com uma precisão satisfatória. A solução analítica proposta permite avaliar rapidamente a pressão de equilíbrio e a fração molar de equilíbrio das espécies adsorvíveis no tanque (Y_{eq}), sem a necessidade de recorrer a uma modelagem complexa. Com base nas comparações apresentadas, pode-se concluir que o acordo entre os resultados experimentais e numéricos em relação a pressão de equalização é bastante satisfatório. A abordagem analítica proposta oferece uma alternativa eficaz para avaliar a pressão de equilíbrio e as frações molares de equilíbrio, reduzindo a necessidade de modelagem intrincada.

3 Estudo de Caso

O tema do presente trabalho trata da detecção de falhas de válvulas (borboletas) em unidades de PSA (*Pressure Swing Adsorption*), para purificação de Hidrogênio. A provocação do estudo surgiu através da necessidade de um desenvolvimento tecnológico nessa área em conjunto com uma equipe parceira da Petrobras, intermediado pelo GIMSCOP/UFRGS (Grupo de Intensificação, Modelagem, Simulação, Controle e Otimização de Processos).

A partir da equipe parceira, houve o relato da necessidade de uma melhor sincronia – ou *timing* – entre o operador e a manobra de retirada de um vaso do processo durante operação, o que seria facilitado caso fosse possível a detecção preventiva do início da falha das válvulas envolvidas. Tal retirada de equipamento durante operação pode ocorrer de forma automática pelo sistema de controle ou ser feita de forma manual pelo operador.

Sempre que possível, quando é observada falha de uma válvula durante o processo, é preferível a retirada do equipamento de forma manual pelo operador, pois o mesmo pode decidir o melhor momento para a manobra. Quando não é possível observar uma falha de válvula, seja por erro humano ou falta de sensibilidade de indicação, o equipamento é retirado do processo de forma automática pelo sistema de controle quando a válvula em questão apresenta falha crítica, isto é, um desempenho de válvula incapaz de atender aos tempos e movimentos necessários às etapas do processo, principalmente nas etapas de equalização de pressão. Tal retirada de equipamento representa risco de parada da unidade de PSA, podendo ocasionar perda de produção para a unidade, bem como a parada de equipamentos ou unidades adjacentes que forem dependentes das correntes do processo.

Portanto, fez-se necessário o estudo do problema e elaboração de uma solução que ajude na detecção do início de falha de válvulas no processo de uma unidade de PSA, a fim de auxiliar o operador na sincronia e decisão do melhor momento para a retirada do equipamento de forma a possibilitar a continuidade do processo e a manutenção do equipamento em tempo hábil para retorno do mesmo. Espera-se que tal situação será possibilitada a partir de um programa de detecção de falhas de válvulas, minimizando perdas de produção.

3.1 Unidade de geração de hidrogênio (UGH)

A unidade de geração de hidrogênio (UGH) em refinarias desempenha um papel crucial na matriz de processos de refino de petróleo, visto a necessidade e importância do hidrogênio na cadeia de produção.

O hidrogênio detém propriedades químicas únicas, caracterizado por sua versatilidade em várias etapas do processo de refino, sendo utilizado como um agente redutor em reações químicas, contribuindo para a remoção de impurezas, como enxofre e nitrogênio, presentes no petróleo bruto. Esse processo, conhecido como hidrotreatamento, resulta na produção de produtos finais com menor teor de poluentes, o que é crucial para atender aos padrões de qualidade ambiental e regulamentações governamentais.

Além disso, o hidrogênio desempenha um papel fundamental na produção de hidrocarbonetos mais leves e valiosos, como gasolina e diesel, através de processos de hidrocrackeamento e isomerização. Esses processos permitem a conversão seletiva de

moléculas complexas em compostos mais simples e desejáveis, resultando em uma gama mais ampla e eficiente de produtos finais.

A unidade de geração de hidrogênio também é estrategicamente importante para a maximização do rendimento de produtos refinados de alto valor, visto que, ao otimizar o uso de hidrogênio em diferentes processos, é possível aumentar a eficiência geral da refinaria, minimizar perdas e aumentar a produção de produtos de maior valor agregado.

Nesse contexto, a unidade de PSA em estudo faz parte da Unidade de Geração de Hidrogênio (UGH) responsável pelo fornecimento de hidrogênio puro para a unidade de Hidrotratamento (HDT), localizados na Refinaria Duque de Caxias (REDUC).

3.2 Descrição do processo e da unidade de PSA

A alimentação da unidade de PSA se origina de uma etapa de reforma a vapor do gás natural, responsável por produzir uma mistura de gás rica em hidrogênio, sendo composta também por monóxido e dióxido de carbono e metano. O objetivo da unidade de PSA é processar essa corrente gasosa, removendo os demais componentes da mistura e produzindo uma corrente pura de hidrogênio, especificada em 99,9% molar, servindo como hidrogênio de reposição para a unidade de Hidrotratamento (HDT).

A unidade de PSA conta com 6 leitos de adsorção em serviço, sendo caracterizada por uma corrente de alimentação, uma corrente de produto (H2) e uma corrente de gases residuais (denominado “tail gas”), conforme figura 1. Apesar da configuração ótima da unidade ser representada por 6 leitos em serviço, caso ocorram falhas em válvulas ou mau funcionamento de instrumentação, o programa de controle da unidade de PSA remove os leitos correspondentes de operação, podendo manter seu funcionamento com até 4 leitos.

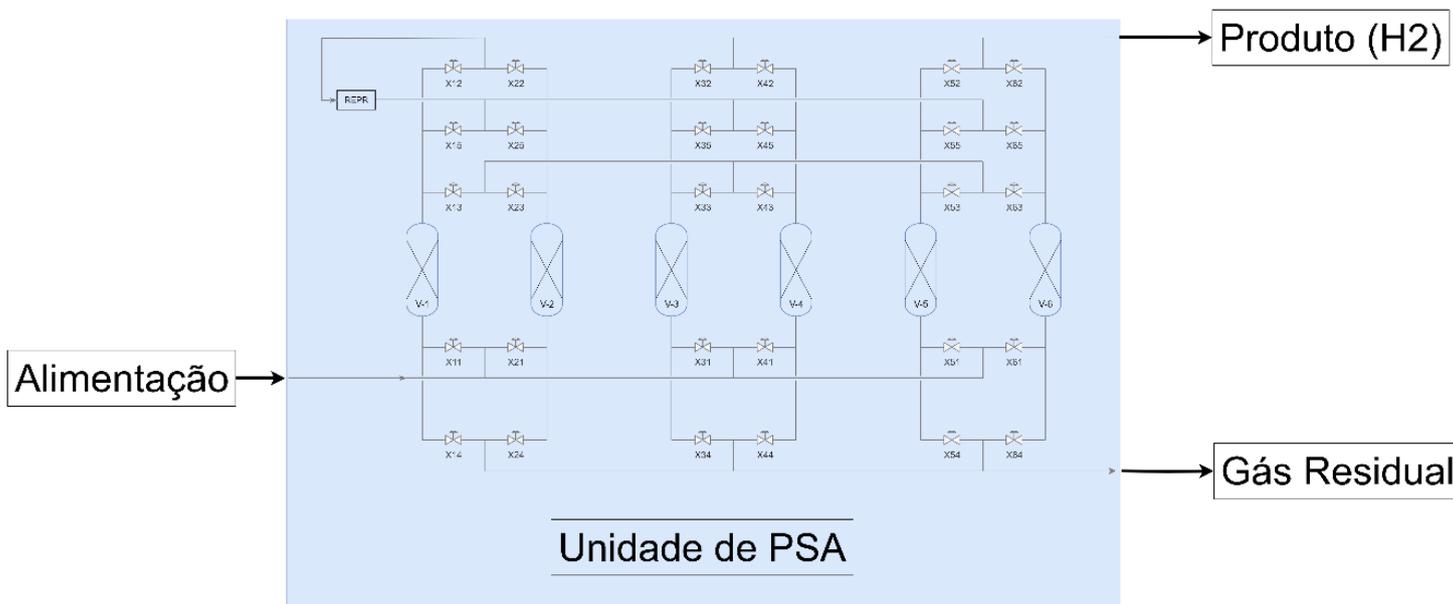


Figura 1: disposição geral de uma unidade de PSA

O processo de adsorção por pressões alternadas (PSA) é projetado de tal forma que seja capaz de fornecer hidrogênio puro de forma constante e ininterrupta. Apesar dessa característica, o processo é caracterizado por diversas etapas descontínuas ocorrendo de

forma paralela, através das conexões entre os leitos e chaveamento de válvulas, representados na figura 1.

O ciclo de PSA pode ser definido, de forma geral, a partir das fases de adsorção (A) e regeneração, onde a fase de regeneração se desdobra em outras 5 subfases, sendo elas: Expansão (ou Equalização - E), Promover Purga (PP), Descarga (ou *Blow Down* - D), Purga (P) e Pressurização (R). As fases (ou etapas) estão brevemente descritas na tabela 1.

Tabela 1: Descrição de etapas – unidade de PSA com 6 leitos

Etapa	Descrição
<p>Adsorção (A1 a A6)</p>	<p>A Adsorção é a etapa responsável pela purificação do gás de interesse, no caso, do hidrogênio. Durante esta etapa, as impurezas ficam retidas na fase sólida e são removidas da fase gasosa. O vaso é alimentado pela parte inferior e a corrente de produto sai pela parte superior. No estudo de caso, a etapa de adsorção é representada pelas etapas A1 até A6, presentes na figura 3.</p>
<p>Equalização (E1 e E2)</p>	<p>Na etapa de Equalização (ou expansão), o leito é despressurizado, e o gás hidrogênio purificado é enviado para um leito em etapa de Pressurização. Esta etapa faz parte de uma modificação ao ciclo de Skarstrom original, que tem como objetivo otimizar a eficiência energética do processo, através do reaproveitamento do gás comprimido. Nesta etapa, a parte inferior se mantém fechada, enquanto o gás sai pela parte superior. No estudo de caso, a etapa de equalização é representada pelas etapas E1 e E2, presentes nas figuras 4 e 6.</p>
<p>Promover Purga (PP1 e PP2)</p>	<p>Ao Promover Purga, semelhante à etapa de equalização, o leito é despressurizado e o gás hidrogênio purificado é enviado a um leito em etapa de Purga. Durante esta etapa, a parte inferior se mantém fechada, enquanto a corrente de purga provida sai pela parte superior até o leito em etapa de Purga. No estudo de caso, a etapa de promover purga é representada pelas etapas PP1 e PP2, presentes nas figuras 5 e 7.</p>

Tabela 1: Descrição de etapas – unidade de PSA com 6 leitos

Etapa	Descrição
<p>Purga (P1 e P2)</p>	<p>Na etapa de Purga, ocorre a regeneração do leito a partir do desprendimento das impurezas adsorvidas. Para que isso ocorra, é utilizado hidrogênio purificado de uma etapa de Promover Purga (PP), com o intuito de se diminuir a pressão parcial das impurezas no leito e promover sua dessorção - em algumas configurações de PSA, o gás puro também pode ser fornecido pela etapa de Adsorção.</p> <p>Na etapa de Purga, o gás puro de hidrogênio da etapa de PP é admitido pela parte superior do leito, e a corrente de saída com as impurezas segue pela parte inferior para a corrente de purga.</p> <p>No estudo de caso, a etapa de purga é representada pelas etapas P1 e P2, presentes nas figuras 9 e 10.</p>
<p>Descarga (D1 e D2)</p>	<p>O objetivo da Descarga (ou Blow Down) é despressurizar o leito até a pressão mínima (próxima à pressão da corrente de purga), preparando o leito para as etapas de Purga.</p> <p>Nesta etapa, o topo se mantém fechado e o gás residual é descarregado pela parte inferior até a corrente de purga.</p> <p>No estudo de caso, a etapa de descarga é representada pelas etapas D1 e D2, presentes na figura 8.</p>
<p>Pressurização (R0, R01, R1 e R2)</p>	<p>O objetivo da etapa de pressurização é preparar o leito para a etapa de Adsorção. As pressurizações iniciais do leito (R2 e R1) são feitas a partir das equalizações de pressão com leitos contendo hidrogênio purificado. Após as equalizações de pressão iniciais (E1 e E2), o leito ainda precisa ser levado à pressão máxima do sistema (pressão de Adsorção) ou mesmo complementado com as linhas de repressurização (etapa R1A, figura 13), visto que é comum a etapa de equalização se encerrar antes que as pressões sejam igualadas. Para tal, uma parte da corrente de hidrogênio da etapa de Adsorção é desviada para o leito através das linhas de repressurização, até a pressão final ser atingida - etapas R01 e R0, ou repressurização complementar das etapas E1 e E2. Durante a etapa de Pressurização, a parte inferior do leito se mantém fechada e as correntes de hidrogênio purificado são admitidas pela parte superior.</p> <p>No estudo de caso, a etapa de pressurização é representada pelas etapas R0, R01, R1 e R2, presentes nas figuras 11, 12, 13 e 14.</p>

O processo de separação é formado por 6 leitos de adsorção, preenchidos com material adsorvente, como zeólita e carvão ativado, interconectados por tubulações e sincronizados através de válvulas de controle, em sua maioria do tipo borboleta. O programa da unidade de PSA utiliza o chaveamento entre as válvulas que conectam os leitos de tal forma que, enquanto um leito fornece hidrogênio através da etapa de adsorção, os demais leitos (5 leitos) passam pelas etapas de regeneração. Isso é orquestrado de forma precisa, em

etapas que duram entre 15 e 50 segundos, e é feito com o objetivo de sempre dispor de um leito pronto para assumir a etapa de adsorção, visto que os leitos contêm uma capacidade máxima de adsorção e que, após exaurida, devem ser regenerados.

No estudo de caso, foi analisado um dos seis leitos da unidade de PSA, esquematizado abaixo, ao longo das 11 etapas gerais do processo, representado pelo leito V-11. Nos diagramas, o leito analisado é representado pela cor azul, bem como as válvulas em operação (abertas), também representadas em azul. A cor verde nas linhas representa o sentido do fluxo dos gases do processo envolvidos na etapa, enquanto que a cor verde nos leitos corresponde às etapas paralelas do processo correlacionadas à etapa em análise, porém secundárias. O esquema geral da simbologia e cores utilizadas se encontra na figura 2.

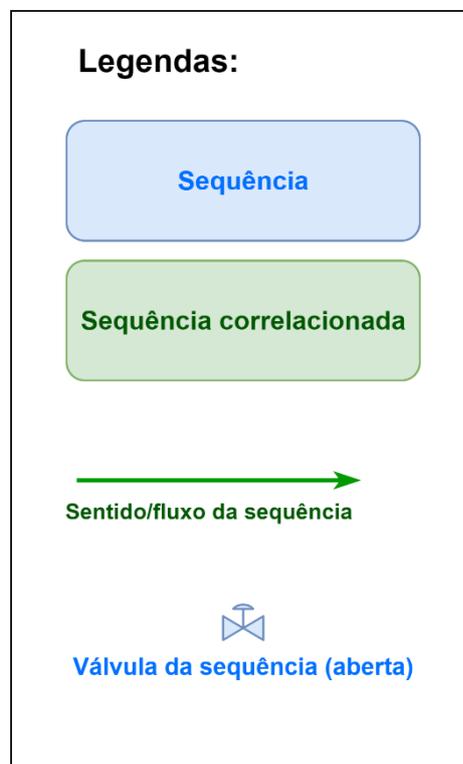


Figura 2: Legendas para os diagramas de etapas PSA

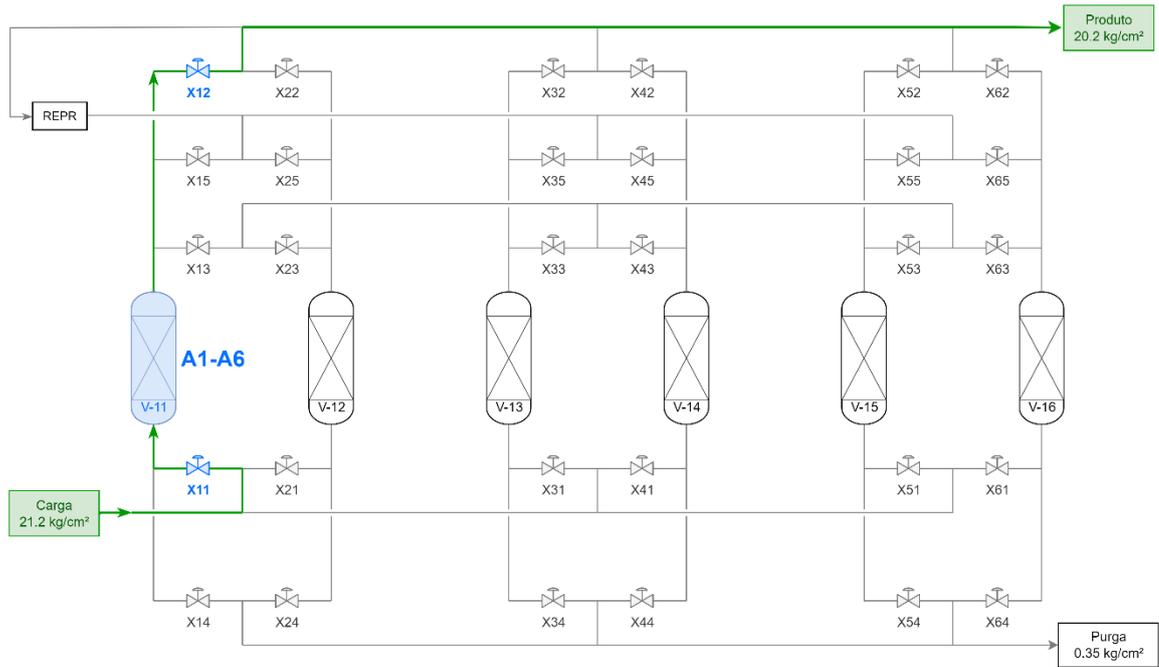


Figura 3: Etapas de Adsorção 1 até 6

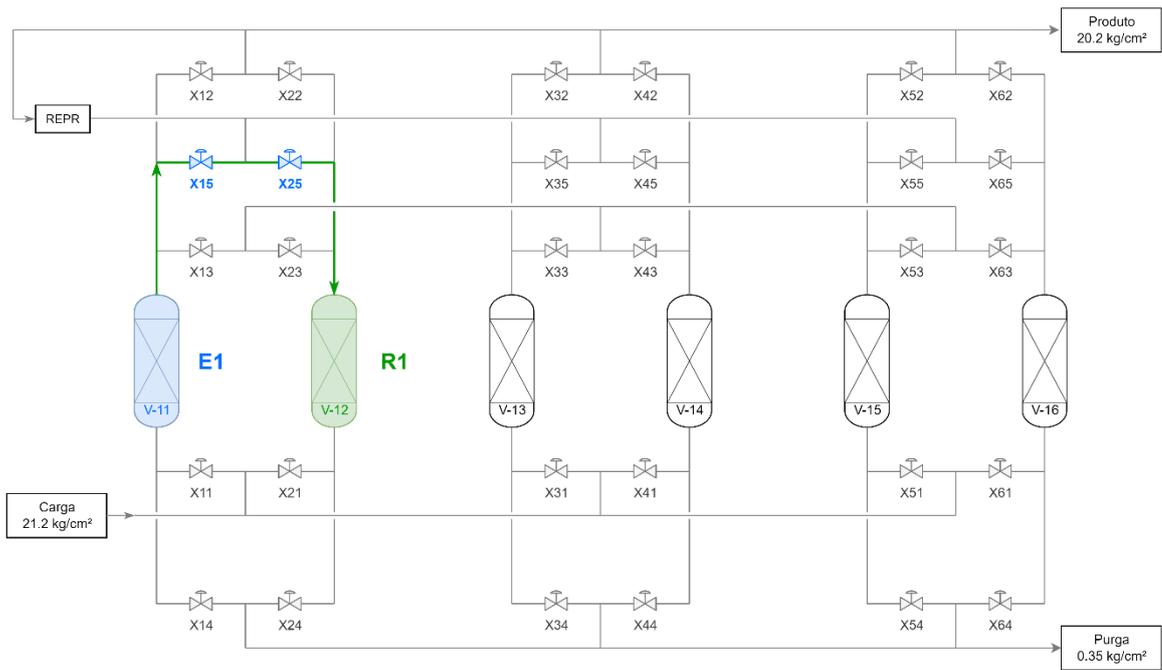


Figura 4: Etapa de Equalização 1

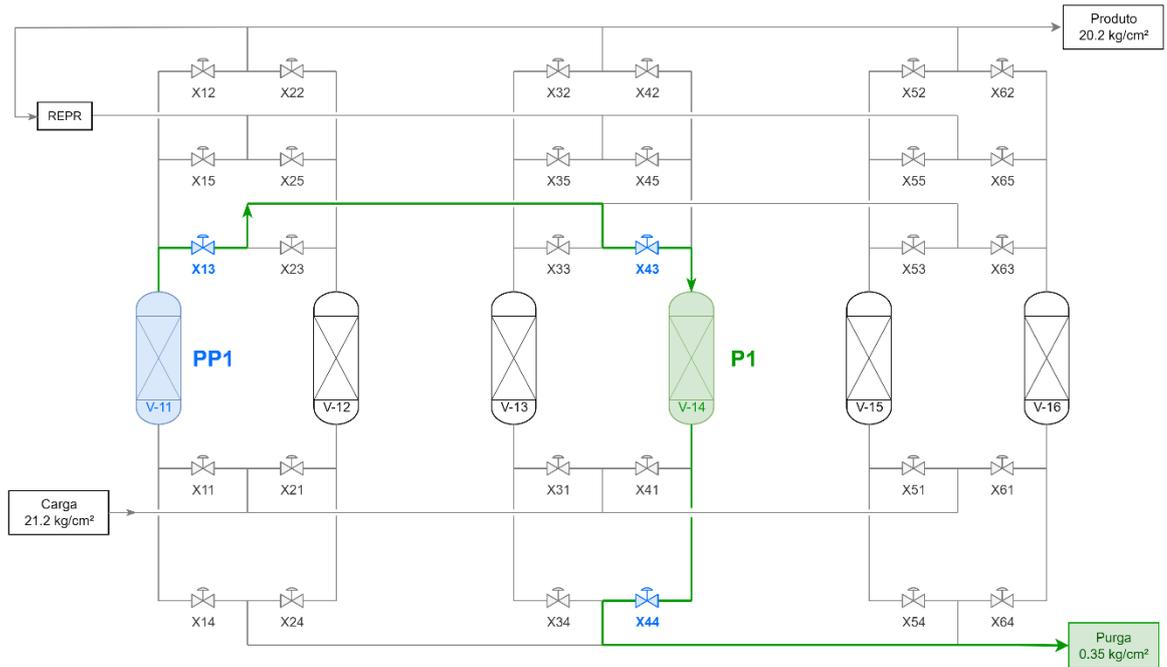


Figura 5: Etapa de Prover Purga 1

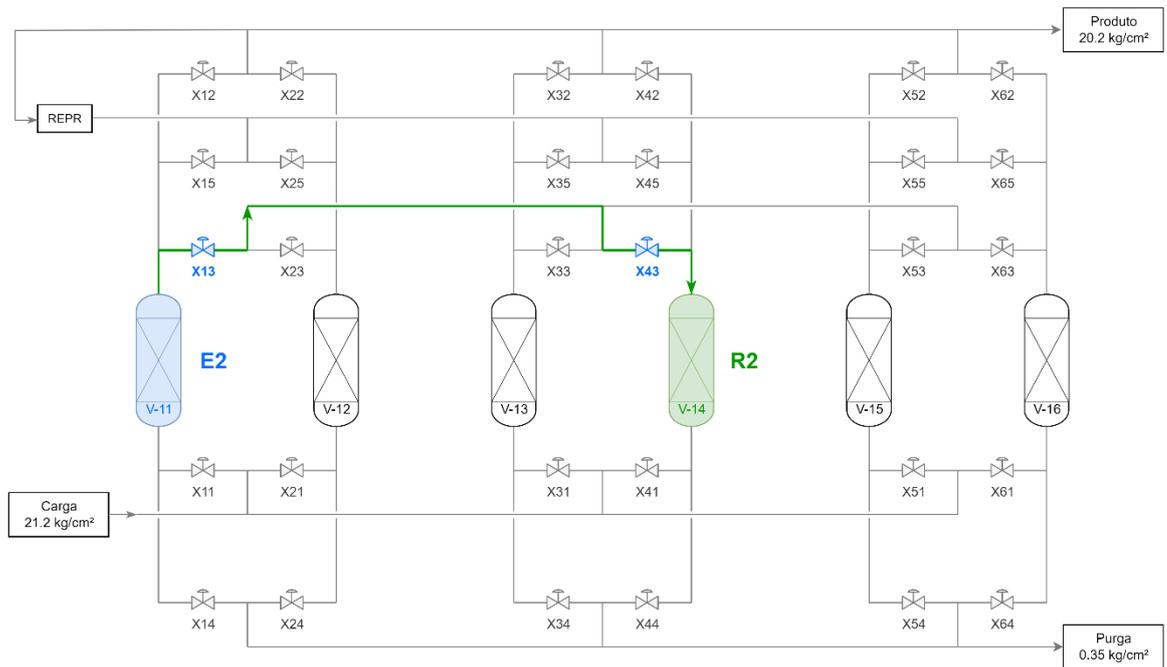


Figura 6: Etapa de Equalização 2

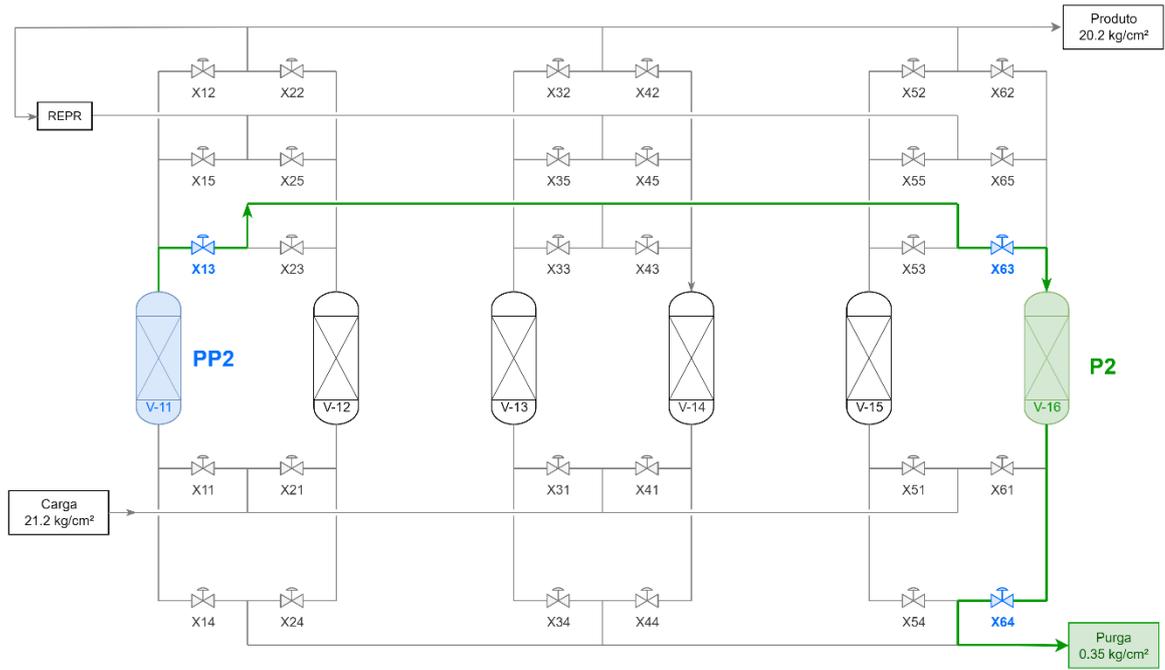


Figura 7: Etapa de Prover Purga 2

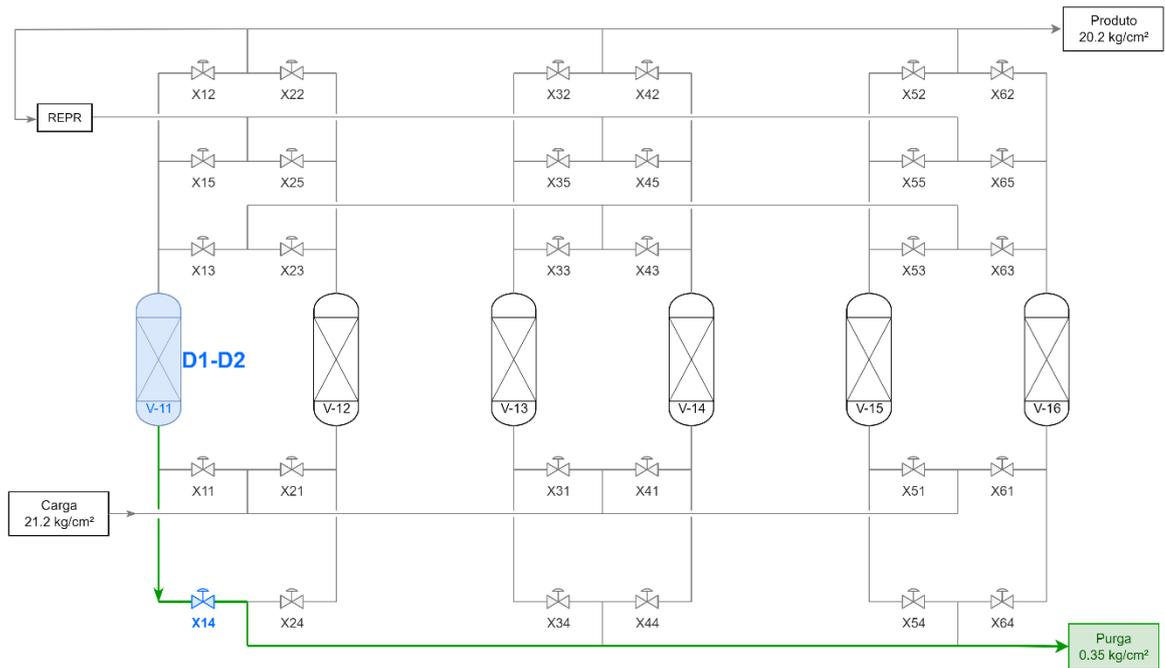


Figura 8: Etapa de Descarga 1 e 2

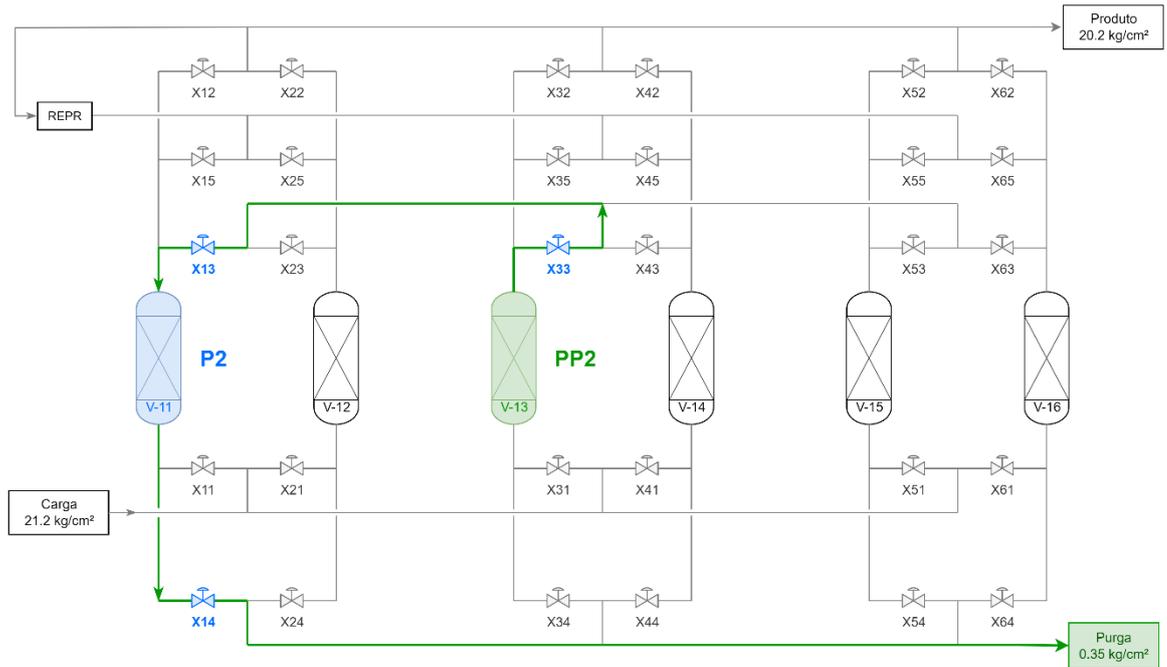


Figura 9: Etapa de Purga 2

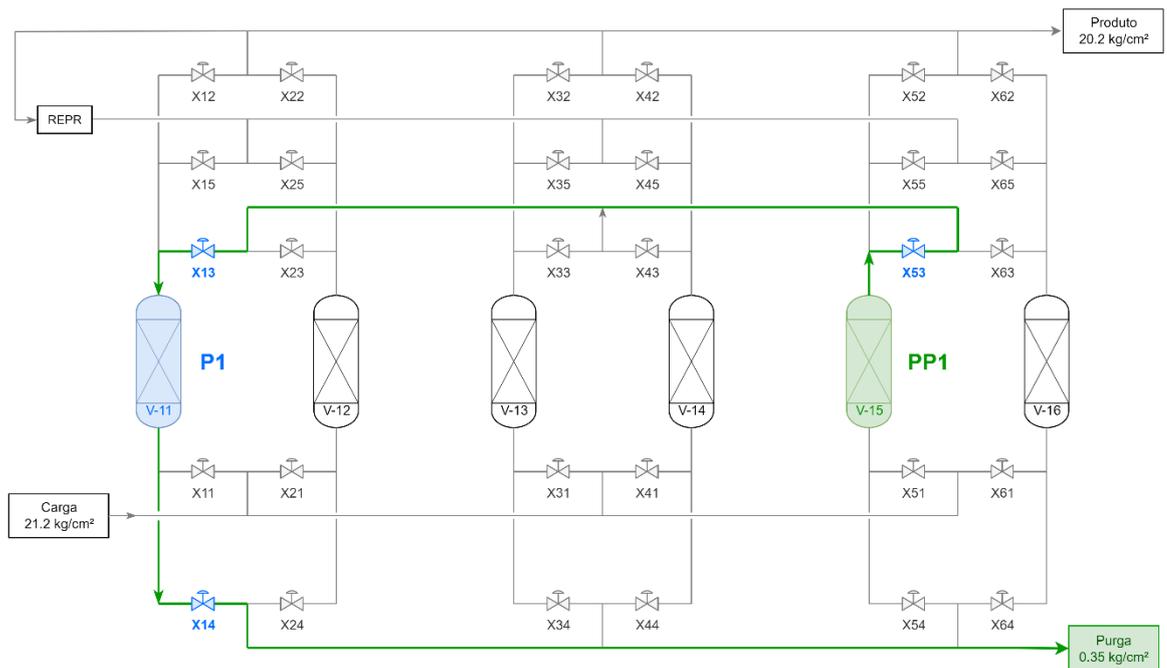


Figura 10: Etapa de Purga 1

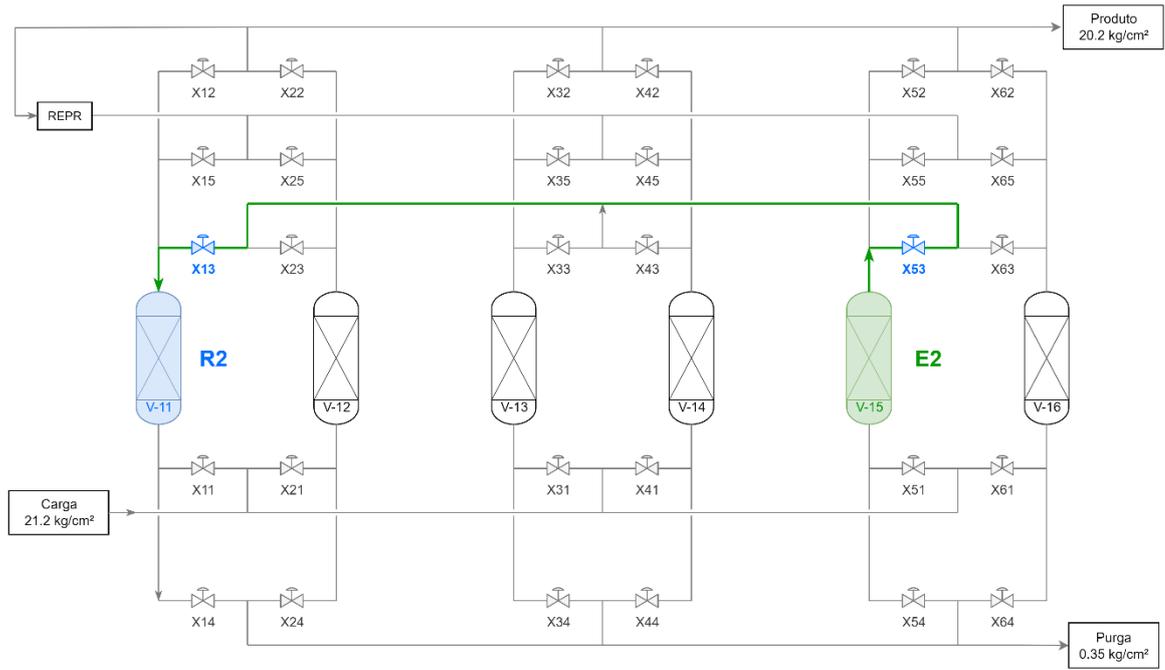


Figura 11: Etapa de Pressurização 2

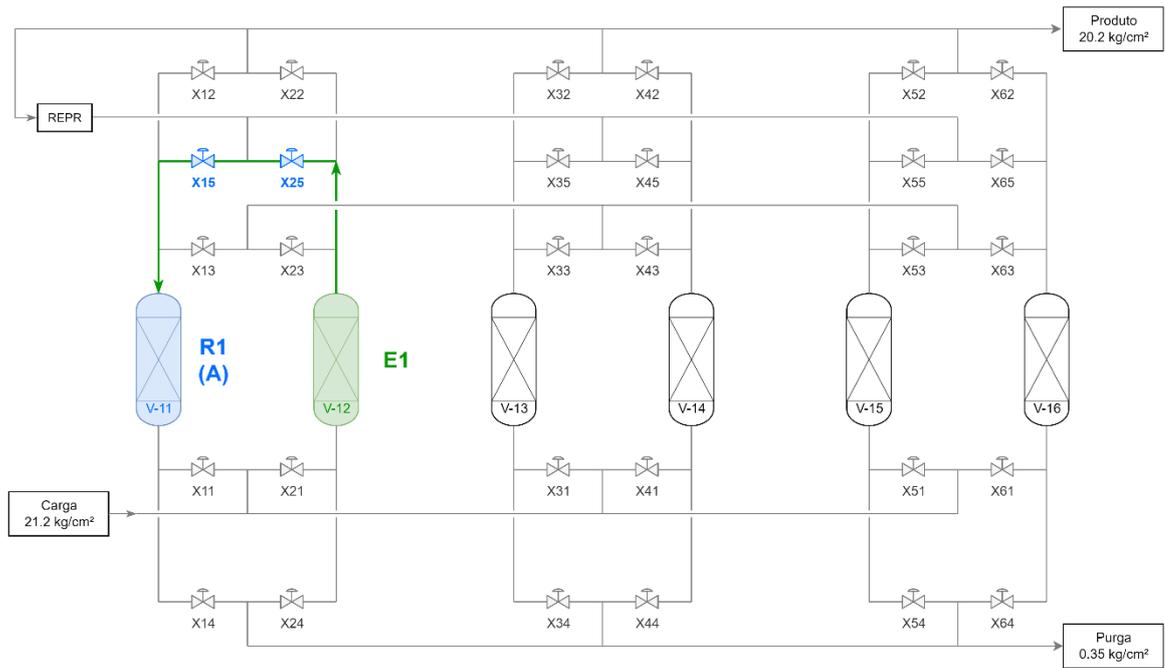


Figura 12: Etapa de Pressurização 1 (sem repressurização)

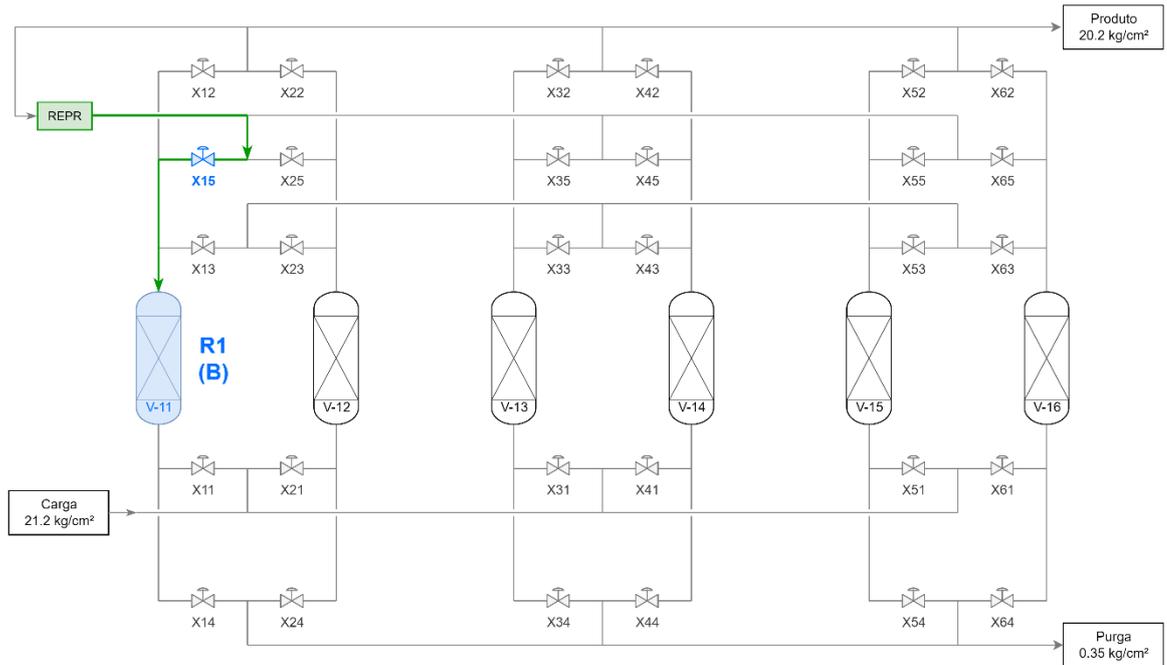


Figura 13: Etapa de Pressurização 1 (com repressurização)

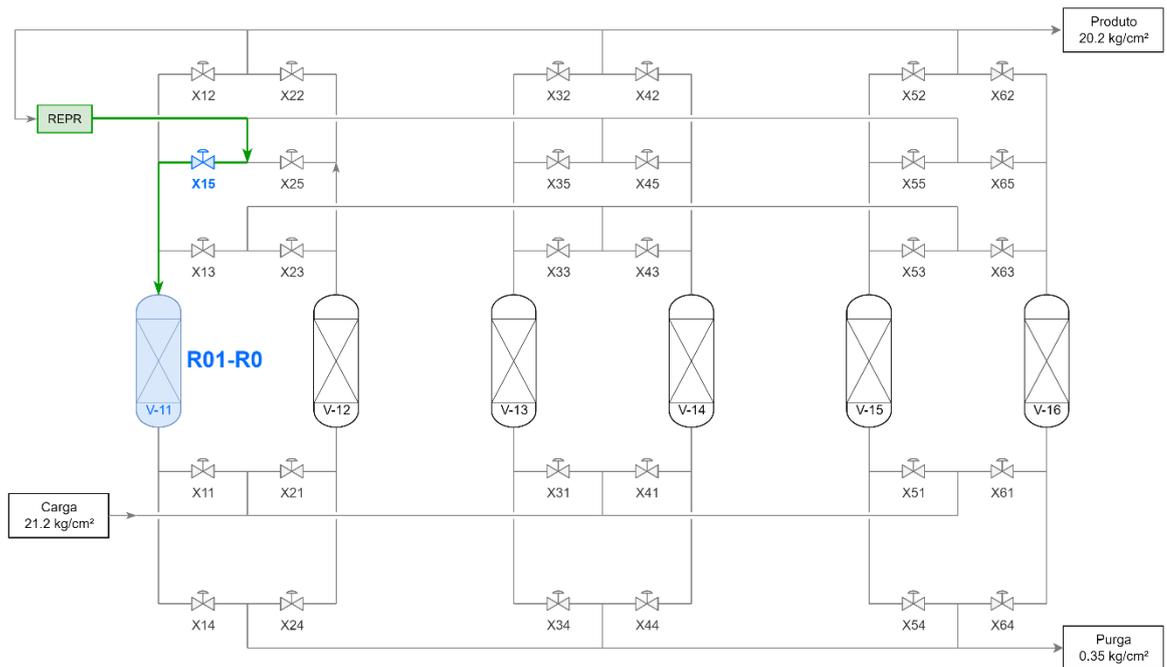


Figura 14: Etapas de Pressurização 01 e 0

4 Modelagem de Balanço de massa

Ao se analisar uma unidade de PSA com 6 leitos, conforme o estudo de caso, fica evidente a complexa estrutura dinâmica do processo. Como o objetivo do trabalho é desenvolver um método que facilite a detecção de falha nas válvulas de controle de processo em unidades de PSA, foi necessário simplificar a abordagem do estudo de caso e escolher uma etapa que beneficie a análise do comportamento da válvula desejada.

A fim de se detectar o início de falha nas válvulas, não é necessária a modelagem e simulação de todo o processo de uma unidade de PSA, sendo necessário apenas o estudo de uma etapa capaz de providenciar uma variação de pressão nos leitos correlacionada com uma variação de abertura na válvula de interesse, a fim de se mapear o comportamento padrão de abertura com o perfil de pressão da etapa.

Após análise detalhada do processo e do chaveamento entre válvulas envolvidas em cada etapa, a escolha para análise foi uma etapa de Equalização de Pressão, caracterizada pela variação de pressões dos leitos e frequente movimentação de válvulas.

Ao se considerar uma etapa de equalização, é possível assumir a existência de apenas um componente livre e não adsorvido (inerte) dentro dos leitos, visto que a etapa ocorre após adsorção. A partir de resultados de modelagem e simulação de processos de PSA presentes na literatura, também é possível assumir que a quantidade total de impurezas retidas nos adsorventes do leito não varia durante as etapas de equalização de pressões (BARG, 2000). Dessa forma, desconsiderando a queda de pressão ao longo do eixo Z (figura 15), é possível assumir os leitos como vasos pressurizados.

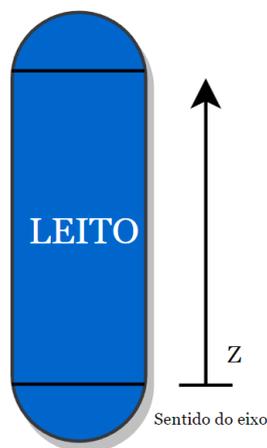


Figura 15: Sentido de um fluxo hipotético através do leito

Simplificando o estudo de caso para uma etapa de equalização de pressão entre vasos contendo hidrogênio puro (H_2), poderemos modelar e simular o comportamento da válvula de interesse de forma relativamente simples, utilizando-se da equação de vazão mássica para escoamento compressível em válvulas borboletas, além de uma equação de balanço de massa pelos vasos, discutidos na seção 4.2.

A situação de estudo corresponde à figura 16, onde ocorre a transferência de massa do Vaso A para o Vaso B, através da válvula AB, devido a diferença de pressão entre os vasos.

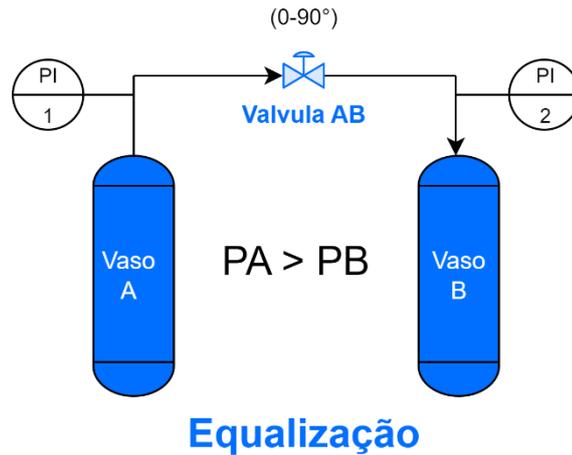


Figura 16: Simplificação do estudo de caso para uma etapa de equalização

Essa forma simplificada do estudo de caso original pode ser replicada para todas as etapas de equalização, para todos os leitos do processo e, portanto, para todas as válvulas envolvidas. Além disso, no caso simplificado, também serão consideradas as limitações de informação do processo disponíveis, conforme estudo de caso da unidade de PSA original, onde estão disponíveis apenas as variáveis de processo referentes à pressão dos vasos (P1 e P2) e a posição de abertura rotativa das válvulas borboletas envolvidas (entre 0° e 90°), não existindo informação sobre o fluxo mássico e volumétrico do gás, nem sobre a temperatura dos leitos.

4.1 Ideia básica

O objetivo do trabalho é determinar um método capaz de detectar, de forma simples, o início de falha em uma válvula borboleta durante a operação de uma unidade de PSA – no caso, durante uma etapa de equalização de pressões. Assim como citado na seção 3, no estudo de caso e através do histórico operacional de unidades de PSA, foi relatado que alguns operadores experientes eram capazes de detectar válvulas com início de falha devido ao maior tempo necessário para uma mesma etapa no processo, como nas etapas de equalização de pressão, por exemplo.

A informação de que uma mesma etapa possa estar levando mais tempo para ocorrer quando há mau funcionamento em uma válvula de controle é coerente com o comportamento esperado de válvulas borboleta devido a sua característica de vazão do tipo abertura rápida - comumente utilizadas em processos que necessitam de controles biestáveis, quando devem operar constantemente abertas ou fechadas. Neste cenário, ao apresentar mal funcionamento, a válvula borboleta pode se encontrar saturada em 100% de abertura (90°), sendo incapaz de entregar a vazão mássica necessária para atender ao tempo mínimo da etapa de equalização, o que pode levar à retirada do leito do processo para sua manutenção.

A fim de se evitar este tipo de problema histórico, além de outros benefícios, unidades mais modernas de PSA adotaram outra estratégia de controle destas válvulas, que passaram para um controle modulante, isto é, operando em aberturas intermediárias entre a posição de abertura rotativa 0° e 90°. Mesmo com ganho decrescente nesse tipo de válvula, essa troca de estratégia pode trazer margem de manobra para o problema

relatado. Portanto, esse tipo de controle modular em válvulas borboleta também deverá ser levada em consideração para a estratégia de detecção de falhas.

Na etapa de equalização, a abertura das válvulas normalmente é controlada para que a variação de pressão das linhas varie linearmente com o tempo (BARG, 2000). A variação nessas etapas está representada na figura 17.

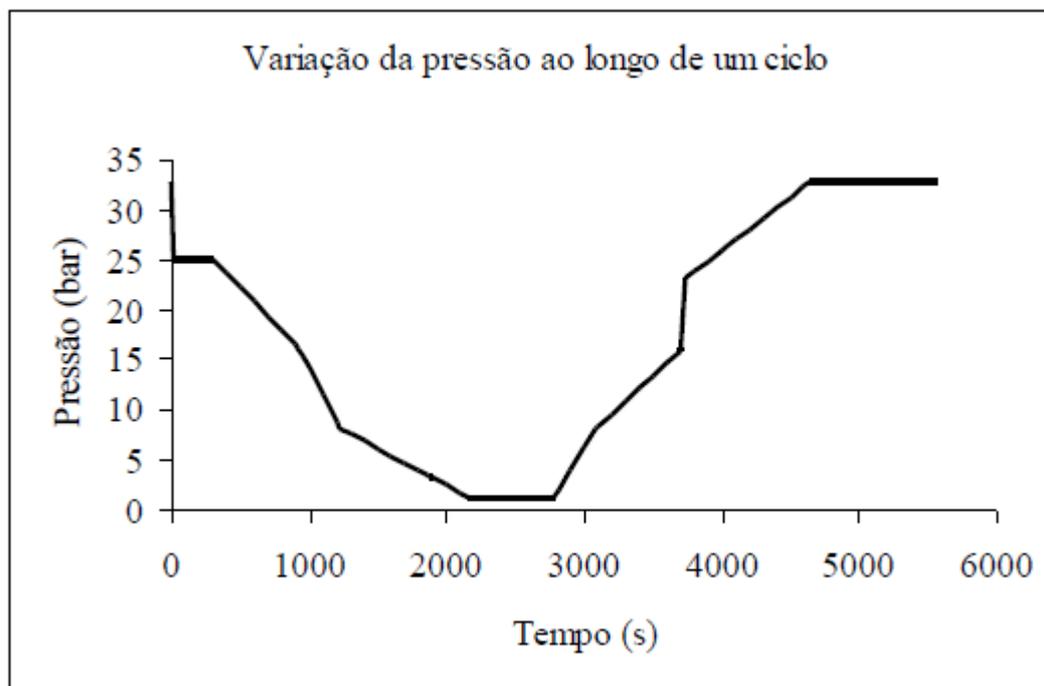


Figura 17: Perfil típico de pressão com o tempo - fonte: BARG, 2000.

A ideia básica para a detecção de falha nessas válvulas se baseia na comparação entre a variação da posição de uma válvula com bom funcionamento e a variação da posição de uma válvula com falha, para uma mesma etapa do processo (equalização), ao longo do tempo.

Essa estratégia de análise foi desenvolvida pois a variação de pressão dos vasos é constante ao longo da etapa de equalização, o que é possível graças à compensação na abertura das válvulas, já que a cada instante que passa a diferença de pressão entre os vasos diminui. Analogamente, a vazão mássica entre os leitos também é assumida como constante, portanto, a vazão mássica encontrada pelo balanço de massa dos leitos é utilizada para se encontrar a abertura da válvula, dependendo apenas dos valores de pressão dos leitos naquele instante.

Será feita a modelagem da válvula, através do fornecimento de sua posição de abertura rotativa, enquanto que para os leitos será levado em consideração as pressões medidas nas linhas, a montante e a jusante da válvula

A partir da modelagem da válvula e do balanço de massa, espera-se obter um padrão de comportamento para a abertura da válvula para um mesmo perfil de pressão. Caso o padrão de comportamento da abertura da válvula mude durante operação, pode ser que haja o início de mal funcionamento da válvula.

4.2 Modelagem

Considerando o estudo de caso de uma unidade de PSA, as equações empregadas para a etapa de equalização de pressão são divididas pelo balanço de massa entre os vasos e a equação de vazão mássica em escoamento compressível monofásico para uma válvula borboleta, que será utilizada para se obter as variações de posição de sua abertura rotativa.

De forma a simplificar o estudo de caso original, visando uma análise prática sobre o funcionamento da válvula envolvida na etapa, foram feitas as seguintes considerações:

1. Fase fluida (gás) é formada apenas por hidrogênio.
2. Fase fluida (gás) com comportamento ideal;
3. Sistema isotérmico para os vasos;
4. Escoamento adiabático sem atrito em duto de área constante (linhas);
5. Escoamento turbulento;
6. Variação de pressão dos vasos linear com o tempo (característica do processo);
7. Pressão das linhas/vasos fornecida (dado de processo);
8. Posição de abertura rotativa da válvula fornecida (dado de processo);

Dadas as considerações 6, 7 e 8, poderemos utilizar um sistema discreto dinâmico em relação às variações de pressão, possibilitando o cálculo dos valores de posição de abertura da válvula com passos definidos nos instantes de tempo.

4.2.1 Válvula de controle – borboleta

Para se chegar a uma expressão de vazão mássica que possa representar um escoamento monofásico compressível, primeiro deve-se partir do dimensionamento básico de uma válvula de controle. A equação básica de dimensionamento é dada por (Trierweiler, 2020):

$$Q = C_v \sqrt{\frac{\Delta P}{G}} \quad (4.1)$$

onde Q representa a vazão volumétrica, ΔP a diferença entre as pressões à montante e à jusante da válvula, G representa a densidade relativa do fluido e C_v , o coeficiente de vazão em unidades imperiais, definido como a taxa de fluxo em galões americanos por minuto (GPM) de água a uma temperatura de 60° fahrenheit com uma queda de pressão na válvula de 1 psi.

Partindo da equação 4.1, conforme apresentado por Paveglio (2023), são introduzidos dois termos: $N1$, que é um termo de conversão de unidades, e F_P , que leva em conta a diferença do diâmetro da tubulação para o diâmetro da válvula, chamado de fator geométrico, sendo seu valor igual a 1 caso não haja diferença de diâmetro.

Considerando, também, escoamento de fluidos incompressíveis em regime turbulento e ausência de cavitação, é possível obter a equação para vazão volumétrica:

$$Q = C_v N_1 F_P \sqrt{\frac{\Delta P}{G}} \quad (4.2)$$

Inserindo definições de densidade relativa, $G = \frac{\rho}{\rho_w}$, e vazão mássica, $\dot{m} = Q \rho$, e agrupando as constantes N_1 e $\sqrt{\rho_w}$ - resultando em N_6 - chega-se a:

$$\dot{m} = C_v N_6 F_P \sqrt{\Delta P \rho} \quad (4.3)$$

Em um fluido compressível, a massa específica varia com a pressão; analogamente, em um escoamento compressível através da válvula, a densidade também varia com a queda da pressão. Portanto, utilizando-se da equação 4.3 como base, ao se introduzir um fator que representa essa variação de densidade com a pressão, chamado de fator de expansão Y e, ao se adequar a variável de massa específica para que varie com o valor a montante da válvula, chega-se a:

$$\dot{m} = C_v N_6 F_P Y \sqrt{\Delta P \rho_1} \quad (4.4)$$

Sendo,

$$Y = 1 - \frac{x}{3 F_k x_T} \quad (4.5)$$

e,

$$x = \frac{\Delta P}{P_1} \quad (4.6)$$

e,

$$F_k = \frac{k}{1,4} \quad (4.7)$$

e,

$$k = \frac{c_p}{c_v} \quad (4.8)$$

Sendo x_T uma constante fornecida pelo fabricante da válvula, denominado fator de queda de pressão crítica, ΔP a diferença entre a pressão a montante e a jusante da válvula, k a relação entre C_p e C_v do gás e F_k o fator de proporção dos calores específicos (k), tendo 1,4 como referência (k do ar atmosférico).

Utilizando-se a equação:

$$\rho_1 = \frac{P_1 \bar{M}}{Z R T_1} \quad (4.9)$$

onde M é a massa molar do gás, Z é o fator de compressibilidade (caso gás não ideal), R é a constante universal dos gases e T_1 a temperatura do gás na entrada da válvula.

Substituindo a equação (4.9) na equação (4.4), agrupando a constante N_6 com a \sqrt{R} e utilizando a equação (4.10):

$$\Delta P = x P_1 \quad (4.10)$$

Chega-se à equação de vazão mássica para um escoamento compressível monofásico (4.11):

$$\dot{m} = C_v N_8 F_P Y P_1 \sqrt{\frac{x \bar{M}}{Z T_1}} \quad (4.11)$$

O C_v de uma válvula borboleta é dependente da queda de pressão e vazão, mas também depende sua abertura rotativa (entre 0° e 90°). Portanto, na equação (4.11), é necessário introduzir um fator de abertura (Θ), responsável por representar a proporcionalidade do coeficiente de vazão a partir da abertura rotativa.

A vazão mássica da válvula borboleta para escoamento compressível e turbulento pode ser escrita conforme a equação (4.12):

$$\dot{m} = C_v N_8 F_P \Theta Y P_1 \sqrt{\frac{x \bar{M}}{Z T_1}} \quad (4.12)$$

Para valores de x maiores que x_T , o escoamento entrará em fluxo crítico, não mais dependendo do valor de pressão a jusante da válvula (P_2). Nesse tipo de escoamento, a velocidade supersônica do fluido através da *vena contracta* é maior ou igual à velocidade do som, perdendo sua característica de escoamento subsônico. Nesse tipo de escoamento, referente à equação 4.12, o fator de expansão Y assumirá seu menor valor (de $\frac{2}{3}$), e o valor de x utilizado na equação será igual ao valor do produto entre F_k e x_T .

O fator de abertura (Θ) pode ser encontrado a partir de uma curva característica de válvulas borboleta que, por sua vez, pode ser determinada empiricamente a partir de dados de fabricantes, correlacionando o C_v da válvula com a abertura rotativa (entre 0° e 90°). Após análise de dados fornecidos por fabricantes de válvulas borboleta, foi gerada uma curva característica, conforme figura 18.

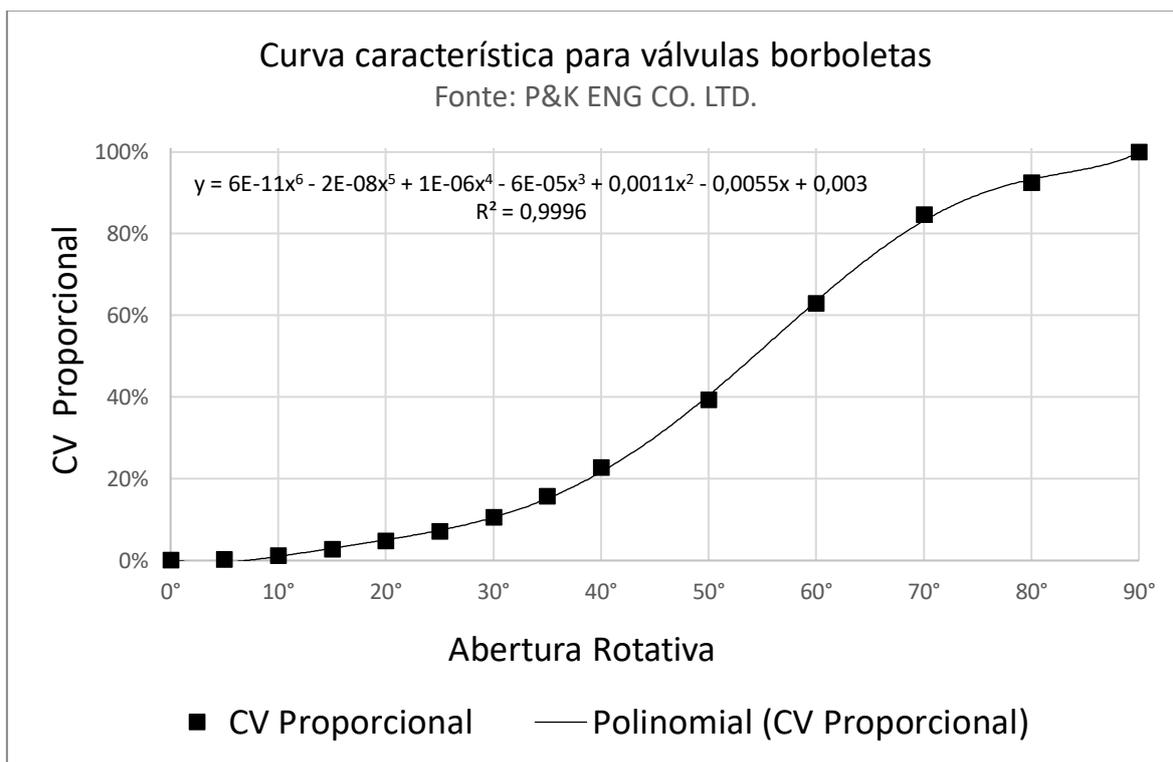


Figura 18: Curva característica de uma válvula borboleta

A partir da curva característica, foi possível determinar uma equação polinomial que descreve o fator de abertura θ de uma válvula borboleta a partir de seu ângulo de abertura rotativa:

$$\theta(r) = a_6 r^6 + a_5 r^5 + a_4 r^4 + a_3 r^3 + a_2 r^2 + a_1 r + a_0 \quad (4.13)$$

Onde r representa o ângulo de abertura rotativa da válvula borboleta (entre 0° e 90°) e a representa o valor dos coeficientes, conforme tabela 2.

Tabela 2: Valor dos coeficientes – equação 4.13

Coeficiente	Valor
a_6	6,4338E-11
a_5	-1,63758E-08
a_4	1,47059E-06
a_3	-5,62474E-05
a_2	0,001051367
a_1	-0,005506516
a_0	0,00297637

Fonte: Do Autor, 2023

4.2.2 Balanço de massa entre os vasos

Para o balanço de massa entre os vasos, considerou-se um sistema fechado com transferência de massa apenas entre eles, não havendo a existência da válvula, conforme figura 19.

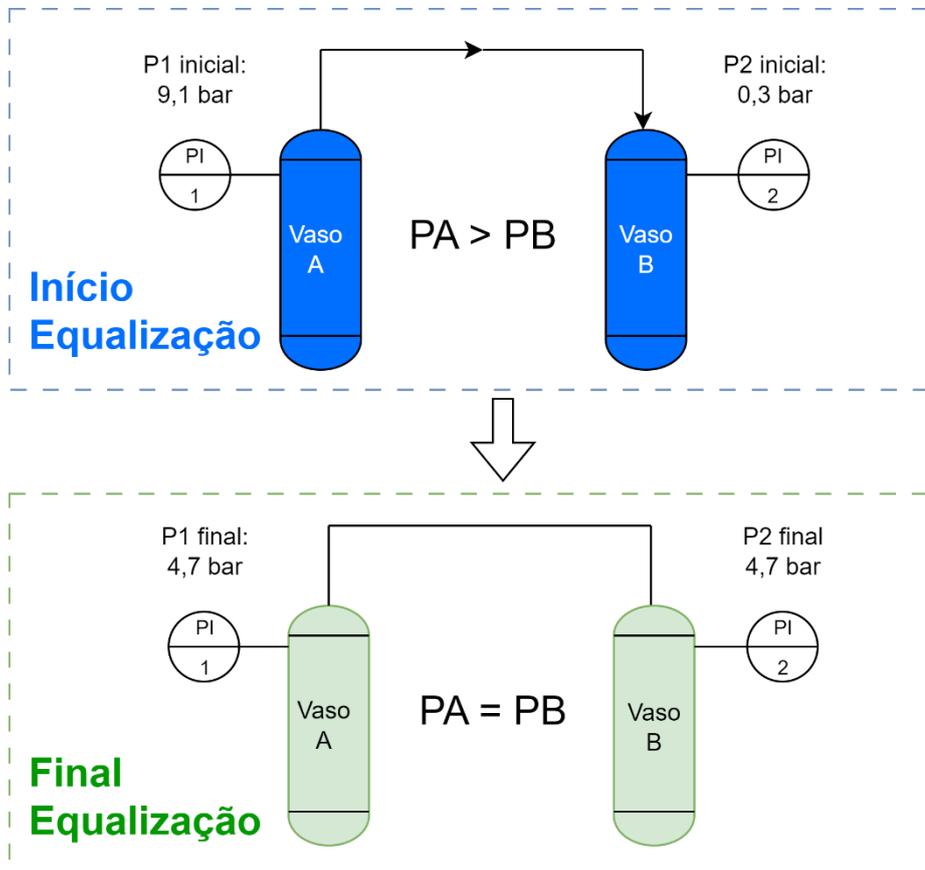


Figura 19: cenário de equalização entre dois vasos

Sendo a vazão mássica total do sistema igual à vazão mássica saindo do vaso 1 e igual a vazão mássica entrando no vaso 2:

$$\dot{m} = -\dot{m}_A = \dot{m}_B \quad (4.14)$$

Onde \dot{m} é a vazão mássica entre os vasos, \dot{m}_A a vazão mássica que sai pelo leito de maior pressão e \dot{m}_B a vazão mássica que entra pelo vaso de menor pressão.

Partindo da equação de estado dos gases ideais:

$$P V = \frac{m}{\bar{M}} R T \quad (4.15)$$

Onde R é a constante universal dos gases ideais e P , V , T , \bar{M} e m representam pressão, volume, temperatura, massa molecular e massa de gás contida no vaso analisado, respectivamente, onde o gás é formado por uma única espécie (hidrogênio). Rearranjando em função da massa de gás, temos:

$$m = \frac{P V \bar{M}}{R T} \quad (4.16)$$

Considerando um sistema adiabático e isotérmico, a parcela da expressão $\frac{V \bar{M}}{R T}$ permanece constante. A variação de massa dentro do vaso, então, pode ser determinada em função da variação de pressão:

$$\dot{m} = \frac{dm}{dt} = \frac{V \bar{M}}{R T} \frac{dP}{dt} \quad (4.17)$$

Levando-se em conta um sistema discreto, temos que:

$$\dot{m} = \frac{V \bar{M} (P_i - P_{i-1})}{R T (t_i - t_{i-1})}, \quad \text{onde } i = 1, 2 \dots N \quad (4.18)$$

Sendo i a sequência do estado no instante t_i , onde \dot{m} é a vazão mássica de gás em qualquer instante e P_i a pressão do vaso naquele instante. Como a pressão varia linearmente com o tempo e utilizando-se de intervalos de tempo iguais, considera-se que a vazão mássica é constante durante toda a etapa de equalização, variando-se apenas a pressão.

5 Teste através de simulação da proposta

O objetivo da simulação é obter o padrão de comportamento da válvula em uma mesma etapa de processo, isto é, em um mesmo perfil de pressão. Para tal, é necessário observar as variações de posição de abertura rotativa da válvula em diferentes condições, sendo elas:

- **Válvula em funcionamento normal:** comportamento de abertura atende à vazão mássica necessária para o funcionamento do processo, mantendo especificação de projeto - coeficiente de vazão igual à referência (CV = 113).
- **Válvula em falha:** comportamento de abertura atende à vazão mássica necessária para o funcionamento do processo, com especificação diferente de projeto e ângulo de abertura próximo ao limite (90°) - coeficiente de vazão menor que referência (CV = 60).
- **Válvula em falha crítica:** comportamento de abertura não atende à vazão mássica necessária para o funcionamento do processo, com especificação diferente de projeto - coeficiente de vazão menor que referência (CV = 30) - e ângulo de abertura chegando ao limite durante operação (90°), resultando em diminuição da vazão mássica e aumento do tempo necessário para finalizar a etapa de equalização.

Em relação ao perfil de pressão, como o objetivo é simular as vazões mássicas a partir de dados de processo, foi necessário gerar tais dados a partir de pressões iniciais entre dois vasos passando pela etapa de equalização de pressão, ao longo de um período de tempo com passos definidos. Tanto os valores de pressão inicial para os dois vasos quanto o período de tempo da etapa de equalização foram obtidos através de trabalhos de modelagem e simulação de unidades de PSA da literatura, conforme tabela 3 e figura 20.

Tabela 3: Faixa de pressão das etapas do ciclo da coluna PSA

Etapa	Pressão kgf/cm ²
AD	15,2 - 15,2
PEQ1	15,2 - 10,1
PPG1	10,1 - 9,3
PEQ2	9,3 - 4,2
PPG2	4,2 - 1,9
BD	1,9 - 0,3
PG	0,3 - 0,3
REQ2	0,3 - 4,2
REQ1	4,2 - 10,1
REP	10,1 - 15,2

Fonte: Patrício, 2016

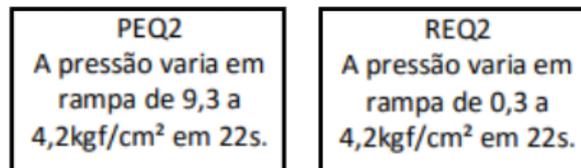


Figura 20: Cenários de equalização de pressão para uma Coluna de Adsorção

Fonte: Patrício, 2016

Seguindo as considerações da seção 4.2, o perfil de pressão foi assumido como linear, onde as pressões iniciais utilizadas foram as adquiridas na figura 20, de 9,1 bar para o vaso A e 0,3 bar para o vaso B. Levando em consideração o comportamento de gás ideal e vasos idênticos, a pressão final de equalização foi assumida como uma média simples das pressões iniciais, cerca de 4,7 bar. O período total da etapa de equalização também foi retirado da figura 20, totalizando 22 segundos até a equalização, onde P1 representa a pressão do vaso A (PA) e P2 representa a pressão do vaso B (PB). Levando em consideração a diferença entre $P1_{inicial}$ (9,1 bar) e $P1_{final}$ (4,7 bar), além do período de 22 segundos para a equalização, o passo de variação de pressão $\frac{(P1_2 - P1_1)}{(t_2 - t_1)}$ utilizado foi de 0,2 bar por segundo.

Os valores para o perfil de pressão ao longo da etapa de equalização para cada instante de tempo, utilizados na simulação, estão representados na tabela 4.

Tabela 4: Perfil de pressão na etapa de equalização

Tempo (s)	P1 (bar)	P2 (bar)	ΔP (bar)
0	9,1	0,3	8,8
1	8,9	0,5	8,4
2	8,7	0,7	8
3	8,5	0,9	7,6
4	8,3	1,1	7,2
5	8,1	1,3	6,8
6	7,9	1,5	6,4
7	7,7	1,7	6
8	7,5	1,9	5,6
9	7,3	2,1	5,2
10	7,1	2,3	4,8
11	6,9	2,5	4,4
12	6,7	2,7	4
13	6,5	2,9	3,6
14	6,3	3,1	3,2
15	6,1	3,3	2,8
16	5,9	3,5	2,4
17	5,7	3,7	2
18	5,5	3,9	1,6
19	5,3	4,1	1,2
20	5,1	4,3	0,8
21	4,9	4,5	0,4
22	4,7	4,7	0

As demais propriedades utilizadas na simulação se encontram na tabela 5.

Tabela 5: Propriedades do sistema

Propriedade	Símbolo	Valor	Unidade	Fonte
Coeficiente de vazão Válvula Referência	C_v	113	((US)GPM/(psi) ^{1/2})	P&K ENG CO. LTD
Coeficiente de vazão Válvula Falha	C_v	60	((US)GPM/(psi) ^{1/2})	P&K ENG CO. LTD
Coeficiente de vazão Válvula Falha Crítica	C_v	30	((US)GPM/(psi) ^{1/2})	P&K ENG CO. LTD
Termo conversão unidades	$N8$	94,8	(Unidades definidas nas equações, onde vazão mássica em kg/h, pressão em bar e temperatura em K)	PAVEGLIO (2023)
Fator geométrico	F_p	1	-	Control Valves, B. G. Lipták
Razão entre calores específicos (H2)	k	1,4	-	NIST Chemistry WebBook

Tabela 5: Propriedades do sistema

Propriedade	Símbolo	Valor	Unidade	Fonte
Fator queda de pressão crítica	xt	0,35	-	Control Valves, B. G. Lipták
Volume dos vasos	V	10	m^3	PATRÍCIO (2016); BARG (2000)
Temperatura dos vasos	T	313,15	K	PATRÍCIO (2016)

Para simular o comportamento da válvula em diferentes estados de integridade, primeiro obtemos a vazão mássica (constante) da etapa de equalização, conforme equação 4.18 do balanço de massa entre os vasos:

$$\dot{m} = \frac{V \bar{M} (P_{1_2} - P_{1_1})}{R T (t_2 - t_1)} = \frac{10 (m^3) 2 \left(\frac{g}{mol}\right) ((9,1 - 8,9)10^5)(Pa) 3600 \left(\frac{s}{h}\right)}{8,314 \left(\frac{Pa m^3}{mol K}\right) 313,15 (K) 1000 \left(\frac{g}{kg}\right) 1 (s)}$$

$$\dot{m} = 553,1 \frac{kg}{h}$$

O valor de posição de abertura rotativa (r) para cada instante de tempo foi obtido numericamente a partir de sua iteração com a vazão mássica calculada pelo balanço de massa, conforme:

$$\dot{m} = 553,1 \frac{kg}{h} = \theta(r) C_v N_8 F_P Y P_1 \sqrt{\frac{x \bar{M}}{Z T_1}}$$

Rearranjando para o fator de abertura (θ), temos:

$$\theta(r) = \frac{553,1 \left(\frac{kg}{h}\right)}{C_v N_8 F_P \theta Y P_1 \sqrt{\frac{x \bar{M}}{Z T_1}}} = (a_6 r^6 + a_5 r^5 + a_4 r^4 + a_3 r^3 + a_2 r^2 + a_1 r + a_0), \quad (4.19)$$

Os coeficientes ($a_{0,1,2,3,4,5,6}$) podem ser encontrados na tabela 2.

5.1 Válvula em funcionamento normal

A partir dos resultados de posição de abertura, presentes na tabela 6, foi gerado um gráfico base para consulta do padrão de comportamento para uma válvula com coeficiente de vazão de projeto, conforme figura 21.

Tabela 6: Resultados de posição de abertura de válvula normal durante equalização

Tempo (s)	Posição de abertura rotativa r (°)	Varição da posição de abertura rotativa r (°)
	Válvula Normal	Válvula Normal
0	37,4	0,0
1	37,7	0,3
2	38,0	0,3
3	38,3	0,3
4	38,7	0,3
5	39,0	0,3
6	39,4	0,4
7	39,7	0,4
8	40,1	0,4
9	40,5	0,4
10	40,9	0,4
11	41,3	0,4
12	41,8	0,4
13	42,2	0,5
14	42,7	0,5
15	43,2	0,5
16	43,7	0,5
17	44,2	0,5
18	45,0	0,7
19	46,3	1,3
20	48,7	2,4
21	54,2	5,5
22	0,0	-

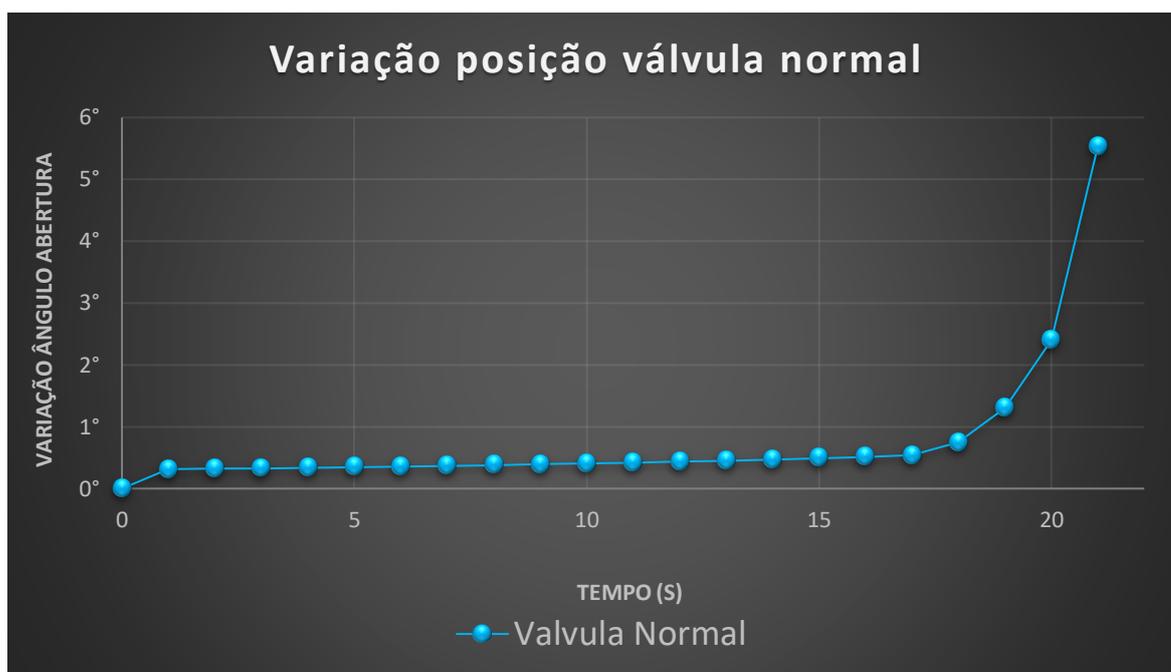


Figura 21: Válvula normal - variação de posição de abertura em função do tempo de equalização

5.2 Válvulas com mau funcionamento

Analogamente, a partir dos resultados de posição de abertura, presentes na tabela 7, foram gerados gráficos para análise na mudança de comportamento para uma válvula com coeficientes de vazão diferentes dos de projeto (degradadas - na prática, com CV menor).

Tabela 7: Resultados de posição de abertura de válvulas falhas durante equalização

Tempo (s)	Posição de abertura rotativa r (°)		Variação da posição de abertura rotativa r (°)	
	Válvula Falha	Válvula Falha Crítica	Válvula Falha	Válvula Falha Crítica
0	46,9	61,9	0,0	0,0
1	47,3	62,6	0,4	0,7
2	47,7	63,4	0,4	0,7
3	48,1	64,2	0,4	0,8
4	48,5	65,0	0,4	0,9
5	48,9	66,0	0,4	0,9
6	49,4	67,0	0,4	1,0
7	49,8	68,1	0,5	1,1
8	50,3	69,4	0,5	1,3
9	50,8	70,9	0,5	1,5
10	51,4	72,7	0,5	1,8
11	51,9	74,9	0,6	2,2
12	52,5	78,0	0,6	3,1
13	53,1	83,1	0,6	5,1
14	53,8	88,1	0,7	5,0

Tabela 7: Resultados de posição de abertura de válvulas falhas durante equalização

Tempo (s)	Posição de abertura rotativa r (°)		Variação da posição de abertura rotativa r (°)	
	Válvula Falha	Válvula Falha Crítica	Válvula Falha	Válvula Falha Crítica
15	54,5	90,0	0,7	1,9
16	55,2	90,0	0,7	0,0
17	56,0	90,0	0,8	0,0
18	57,1	90,0	1,1	0,0
19	59,1	90,0	2,1	0,0
20	63,3	90,0	4,2	0,0
21	81,7	90,0	18,3	0,0
22	0,0	0,0	-	-

Foram simuladas duas válvulas falhas com criticidades diferentes, onde uma apresenta início de falha (figura 22), mantendo performance mínima para continuidade do processo, e a outra apresenta falha crítica no tempo de 17 segundos (figura 23), sendo incapaz de manter a continuidade do processo.

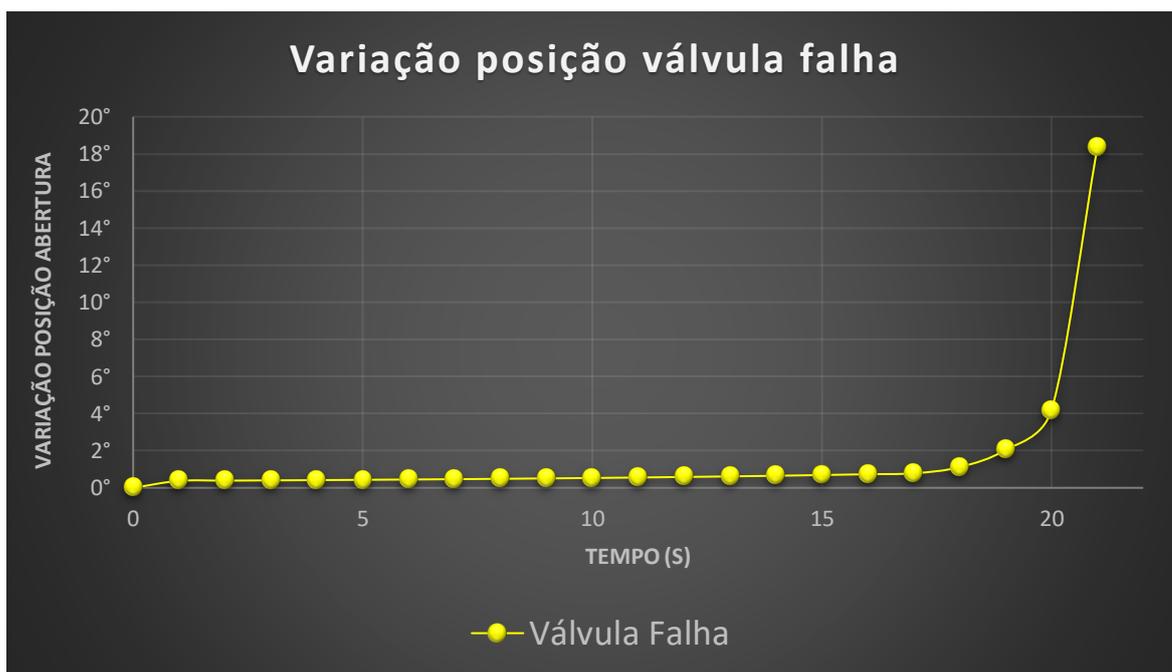


Figura 22: Válvula falha com performance mínima - variação de posição de abertura em função do tempo de equalização



Figura 23: Válvula falha crítica sem performance mínima - variação de posição de abertura em função do tempo de equalização

5.3 Comparação entre válvulas

A partir dos resultados anteriores, foram agrupados os dados de posição de abertura em função do perfil de pressão do vaso A, durante a etapa de equalização, conforme figura 24:

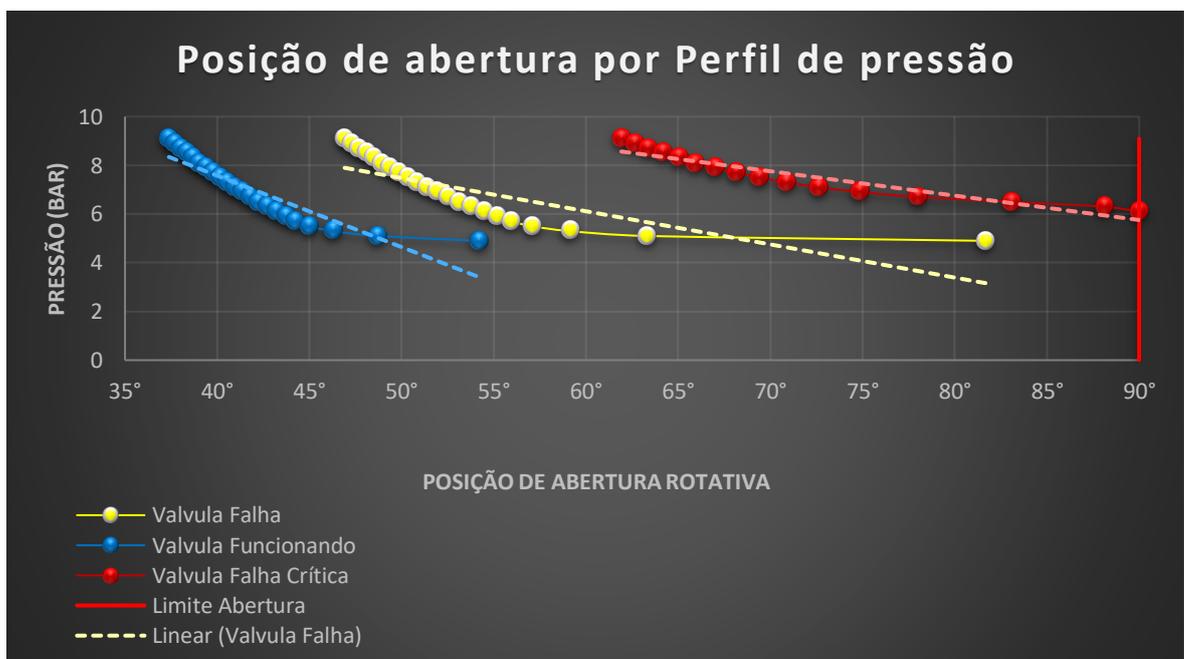


Figura 24: Disposição de dados de posição de abertura em função do perfil de pressão

É possível notar a diferença de disposição dos dados de posição de abertura absoluta, bem como a diferença na inclinação das retas correspondentes. A distribuição de abertura

para a válvula falha crítica é encerrada na posição de abertura de 90°, visto que é o valor de abertura máxima.

Apesar da disposição das aberturas absolutas serem uma boa opção de visualização para detectar a falha crítica (na posição máxima de 90°), é de maior interesse detectar o início ou avanço da tendência de falha.

Dessa forma, uma visualização das tendências de variação de posição de abertura foi gerada, conforme figura 25.

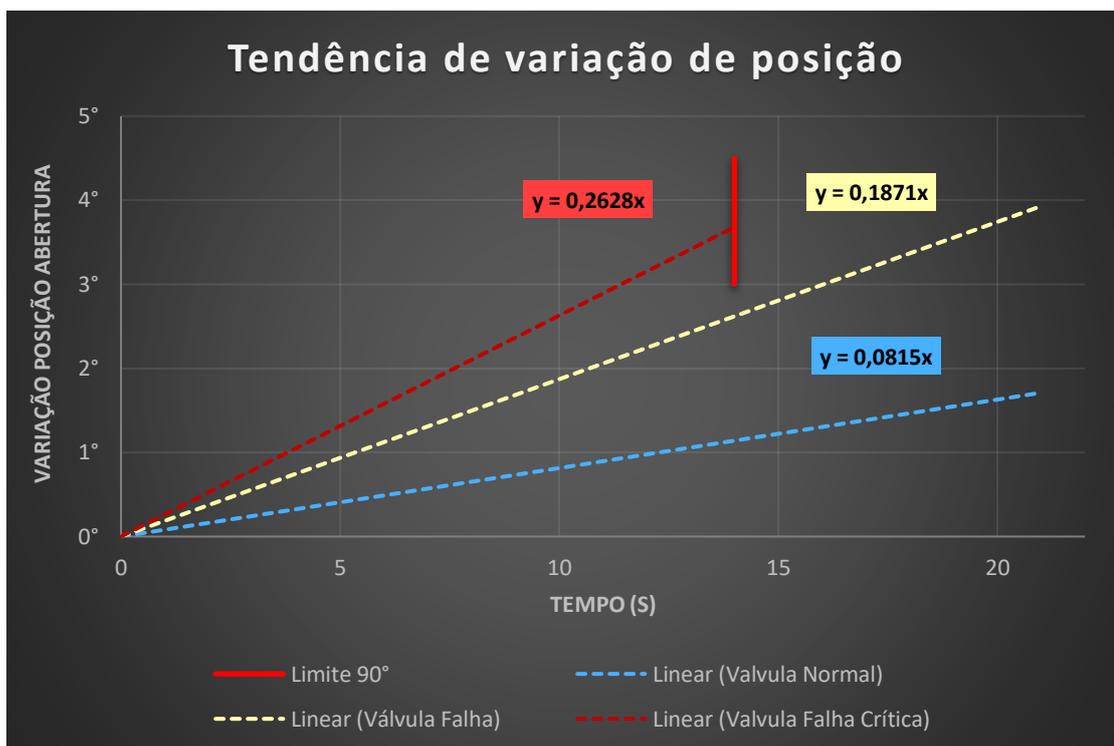


Figura 25: Tendência de variação de posição por diferentes integridades de válvula

A partir desta forma de visualização de tendência, fica evidente o avanço do coeficiente angular de reta das válvulas falhas. Neste sentido, um maior coeficiente angular representa o quanto a válvula necessita aumentar sua abertura durante a etapa de equalização de pressão para compensar a diferença entre seu coeficiente de vazão prático quando comparado a uma válvula de projeto em bom funcionamento.

Vale ressaltar que esse aumento de abertura durante a etapa de equalização é esperado, pois, como discutido anteriormente, a vazão mássica e variação de pressão durante essa etapa se mantêm constante pelo ajuste de abertura das válvulas (compensação). Porém, como o objetivo é detectar preventivamente o início de falha dessas válvulas, a diferença entre o coeficiente base/referência (válvula normal) e a válvula analisada pode ser um indicativo do início de falha.

Apesar de as visualizações anteriores (figuras 24 e 25) demonstrarem de forma satisfatória o comportamento de abertura entre válvulas falhas e uma válvula de referência, uma melhor visualização para o monitoramento do comportamento da válvula pode ser representado pela figura 26, ilustrando a abertura de uma válvula referência versus uma válvula analisada (dita válvula teste), onde o comportamento ideal de uma válvula em bom funcionamento é representada pela curva referência (em azul), em

comparação com as curvas de válvulas em falha (amarelo e vermelho), que demonstram um coeficiente angular menor.

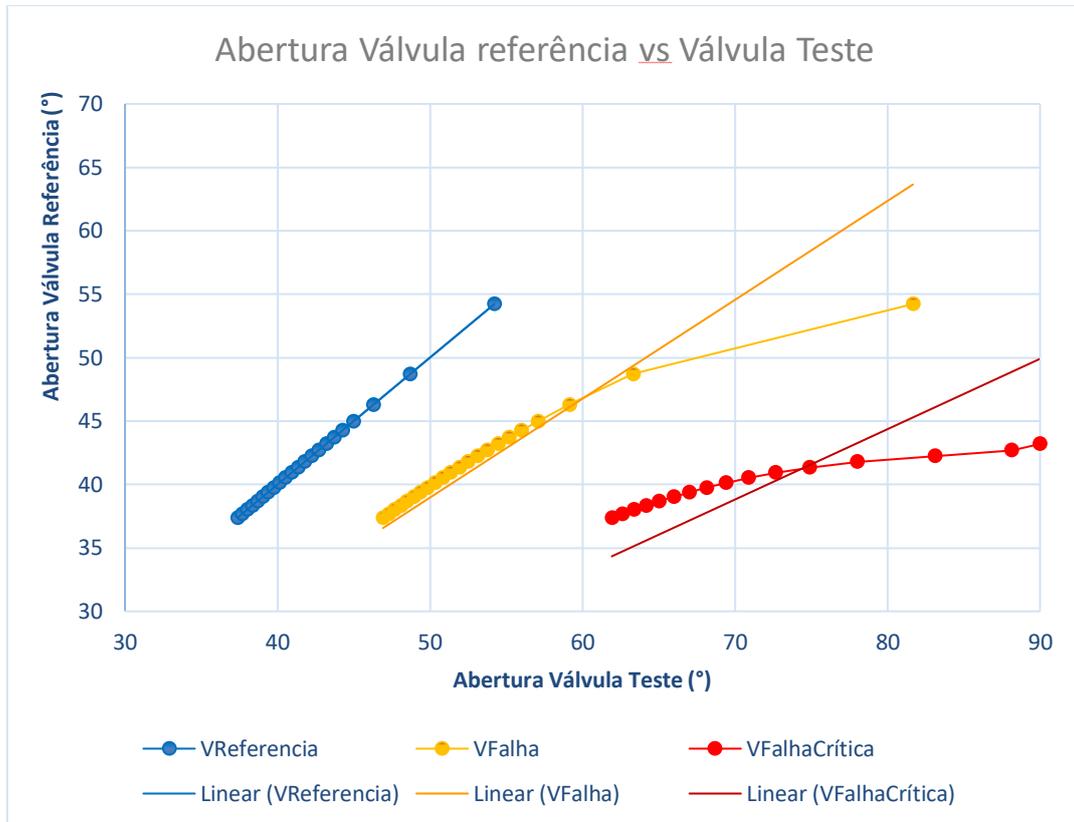


Figura 26: Curva de abertura entre válvula referência e válvula analisada

6 Conclusões e sugestões para trabalhos futuros

Com o objetivo de se desenvolver uma estratégia para detecção de falha em válvulas borboleta em unidades de PSA, foi feito um estudo de caso sobre o processo, sincronia e funcionamento de uma unidade de PSA para purificação de hidrogênio.

A partir do estudo da unidade, foi detectada uma etapa promissora para o estudo do comportamento de válvulas borboleta, visto a grande movimentação necessária das válvulas em conjunto com um perfil de pressão com range significativo. Dessa forma, a etapa de equalização de pressão foi selecionada, com o objetivo de simplificar o estudo de caso.

A partir da simplificação dos leitos e aproximação do gás hidrogênio a um gás ideal, foi feita uma modelagem de válvula borboleta, vinculando-se a posição de abertura da válvula a uma vazão mássica característica da etapa de equalização. Tal vazão mássica foi obtida a partir do balanço de massa entre os vasos (leitos simplificados).

Ao simular uma válvula com funcionamento normal, uma válvula em falha (porém funcional) e uma válvula com falha crítica (não funcional), foi possível encontrar uma diferença nítida em seus coeficientes angulares de tendência de posição de abertura em função do tempo da etapa de equalização.

A partir do estudo desses coeficientes angulares, tomando o coeficiente da válvula normal (CV de projeto) como referência, é possível detectar um desvio na performance das válvulas, indicando falha.

Este trabalho tem como objetivos o entendimento do funcionamento de unidades de PSA atrelados ao comportamento de válvulas, desenvolvimento de uma estratégia de identificação de falhas de válvulas borboleta e abertura de possibilidades para trabalhos futuros, vinculados à análise de falhas em válvulas de sistemas semelhantes ao estudado.

Apesar de ter sido desenvolvido através de uma abordagem simples e visando a praticidade (do dia-a-dia de uma unidade industrial), pode ser considerado que os objetivos do presente trabalho foram atingidos.

Para estudos mais complexos e aprofundados, como predição de tempo de vida útil antes de falha crítica em válvulas, por exemplo, o estudo do avanço dos coeficientes angulares com o tempo, ou mesmo com o avanço de ciclos (contínuos) de uma mesma unidade de PSA, parece ser um caminho promissor - principalmente se aplicadas técnicas de simulação mais avançadas e modelagem mais rigorosa do sistema apresentadas no apêndice B.

Ainda para trabalhos futuros, outras etapas do processo além da etapa de equalização podem ser analisadas. Também é possível utilizar a pressão de ambos os vasos com perfil não linear (eq. 4.17), e desenvolver uma comparação entre a variação dinâmica das válvulas, analisando a diferença entre o tempo de abertura da válvula referência e a válvula em análise.

Referências

- BARG, Christian (2000). Simulação e Otimização de Unidades Industriais PSA para Purificação de Hidrogênio.
- CHAHBANI et al. (2017). Modeling and simulation of pressure equalization step between a packed bed and an empty tank in pressure swing adsorption cycles.
- SAHOO et al. (2017). Multi-cell model for pressure swing adsorption process.
- REBELLO, Carine M. et al. (2022). Machine Learning-Based Dynamic Modeling for Process Engineering Applications A Guideline for Simulation and Prediction from Perceptron to Deep Learning.
- DAMIANI, Eduardo João (2021). Uso da Distância de Mahalanobis para a Detecção de Rompimentos em Linhas de Injeção de Gás.
- WARMUZIŃSKI, Krzysztof; TAŃCZYK Marek. Multicomponent pressure swing adsorption Part I. Modelling of large-scale PSA installations, Chemical Engineering and Processing: Process Intensification; Volume 36, Issue 2, 1997, Pages 89-99, ISSN 0255-2701;; (<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0255270196041645>); Keywords: Pressure swing adsorption; Multicomponent gas mixtures; Gas separation.
- WARMUZIŃSKI, Krzysztof; TAŃCZYK Marek. Multicomponent pressure swing adsorption. Part II. Experimental verification of the model, Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, Volume 37, Issue 4, 1998, Pages 301-315, ISSN 0255-2701, [https://doi.org/10.1016/S0255-2701\(98\)00041-5](https://doi.org/10.1016/S0255-2701(98)00041-5). (<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0255270198000415>); Keywords: Non isothermal multicomponent pressure swing adsorption; Zeolite 5A; PSA cycle.
- MAHLE, J. J.; FRIDAY D. K.; LEVAN, M. D. Pressure Swing Adsorption for Air Purification. 1. Temperature Cycling and Role of Weakly Adsorbed Carrier Gas”, Ind. Eng. Chem. Res. 35, 2342-2354, 1996.
- PARK J., KIM J.; CHO S.; KIM J.; YANG, R. T. “Adsorber dynamics and optimal design of layered beds for multicomponent gas adsorption”, Chem. Eng. Sci. 53, 3951-3963, 1998.
- WARMUZIŃSKI, Krzysztof; TAŃCZYK Marek. Calculation of the equalization pressure in PSA systems, Chem. Eng. Sci., vol. 58, pp. 3285-3289, 2003.
- PATRÍCIO, Paôlla Chrystine Pinheiro (2016). Proposta de simulação dinâmica de colunas PSA (Pressure Swing Adsorption) para treinamento de operadores.
- PAVEGLIO, Rafael Rigon (2023). Estudo de escoamento multifásico em válvulas choke através de fluidodinâmica computacional.
- TRIERWEILER, 2020. Válvulas de Controle Parte II (45 min). Publicado pelo canal Jorge Otávio Trierweiler. Disponível em: https://www.youtube.com/watch?v=D1p18UFTm-s&list=PLenMidpg34ntYjyBI62iXHc_dCZZuhN8J. Acesso em: 27 ago. 2023.
- P&K ENG CO. LTD., PHC Series Control Butterfly Valves. Disponível em: <https://pnkengen.imweb.me/product#s20230726eac1ea5fe9ea2>. Acesso em: 27 ago. 2023.
- LIPTÁK, B. G. Control Valves Tabela 4.17b, página 605.

Apêndice A - Dados de fabricante, válvulas borboleta PHC Series

Tabela A1: Coeficiente de Vazão para válvulas borboleta de 3"

P&K ENG CO. LTD.		
Abertura (°)	Fracao_CV 3" (%)	CV 3" ((US)GPM/(psi)^1/2)
0	0,00	0
5	0,09	0,1
10	1,06	1,2
15	1,68	1,9
20	3,01	3,4
25	5,31	6
30	7,88	8,9
35	13,27	15
40	19,47	22
50	35,40	40
60	62,83	71
70	91,15	103
80	97,35	110
90	100	113

Fonte: P&K ENG CO. LTD.

SIZE		0°	5°	10°	15°	20°	25°	30°	35°	40°	50°	60°	70°	80°	90°
NPS	DN														
3	80A	0.0	0.1	1.2	1.9	3.4	6.0	8.9	15	22	40	71	103	110	113
4	100A	0.0	0.2	1.9	4.0	7.2	13.2	19.6	33	48	83	137	193	213	226
5	125A	0.0	0.7	5.8	7.0	12.6	18.4	27.2	47	68	138	249	357	396	402
6	150A	0.0	0.8	6.6	15.0	27.0	40.6	60.0	90	130	225	360	485	530	573
8	200A	0.0	1.8	15.2	28.9	52.1	72.2	107	150	217	394	666	985	1,090	1,215
10	250A	0.0	3.8	31.1	32.2	58.0	101	149	238	344	677	1,237	1,851	2,157	2,431
12	300A	0.0	6.6	54.7	81.1	146	172	255	380	549	1,042	1,814	2,926	3,533	3,646
14	350A	0.0	7.1	58.2	57.4	103	166	245	357	515	1,090	2,120	3,297	4,082	4,636
16	400A	0.0	11.8	97.1	68.9	124	178	264	449	649	1,307	2,455	3,723	4,782	5,556
18	450A	0.0	17.2	142.1	87.4	157	249	368	590	853	1,707	3,216	4,822	6,061	6,818

Cv Value - Travel Position

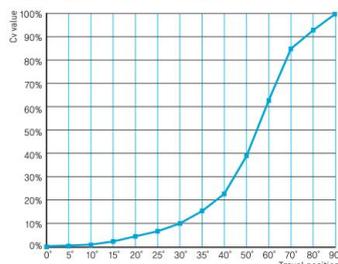


Figura A1: Coeficiente de Vazão para válvulas borboleta PHC Series

Fonte: P&K ENG CO. LTD.

Apêndice B - Modelagem rigorosa dos leitos de adsorção

As equações para o modelo da unidade de PSA podem ser divididas pelos balanços de massa global e por componente, balanço de energia, balanço de quantidade de movimento, isoterma de adsorção e taxa de adsorção, guiando-se pelas considerações para o modelo, a seguir.

B.1 Modelo e considerações

Para modelar uma unidade de PSA em leito fixo, é utilizado um sistema de equações algébricas em conjunto com equações diferenciais parciais. Para fim de modelagem matemática, visando um bom equilíbrio entre simplificação e representatividade da unidade de PSA para purificação de hidrogênio, podem ser feitas as seguintes considerações:

1. Não há adsorção de hidrogênio (quantidade desprezada);
2. Comportamento ideal para a fase fluida (gás);
3. Sistema não isotérmico, sendo empregado um coeficiente de dispersão térmica axial (ao longo do eixo z). Equilíbrio térmico local entre adsorvente e fluido. Temperatura ao longo do eixo (z) é determinada por uma equação de balanço de energia.
4. Transferência de calor entre parede dos leitos/tubulações desprezada.
5. Velocidade do fluido ao longo do leito não constante, sendo utilizado o balanço de massa global para sua determinação.
6. Fluxo com dispersão axial, sem gradientes radiais de temperatura e concentração, sendo o coeficiente de dispersão considerado constante.

As equações empregadas na modelagem seguem o sentido do eixo z , apresentado na figura 28.

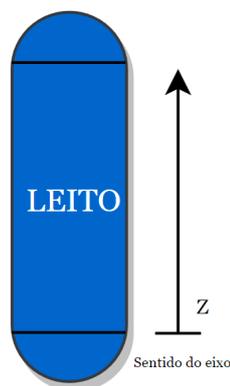


Figura B1: Sentido do fluxo através do leito

B.2 Isotermas de adsorção

Isotermas de adsorção são equações matemáticas que relacionam a concentração de adsorbato na fase fluida com a quantidade que foi adsorvida na superfície do sólido, sob temperatura constante.

Alguns exemplos de isotermas mais comumente utilizadas podem ser citadas como o modelo de Langmuir, a Lei de Henry (adaptado do modelo de Langmuir) e o modelo de Langmuir-Freundlich, amplamente utilizados para a adsorção de componentes puros sob superfícies homogêneas. Como a unidade industrial em estudo emprega a separação de componentes em fase gasosa para a purificação de hidrogênio, será utilizado o modelo de Langmuir estendido para misturas com múltiplos componentes:

$$q_i^* = \frac{q_{si} \cdot b_i \cdot c_i}{1 + \sum_{j=1}^n b_j \cdot c_j} \quad i = 1, \dots, NC \quad (B.1)$$

onde q_i^* representa a quantidade adsorvida do componente em equilíbrio com o fluido à concentração c_i , o parâmetro q_{si} representa a quantidade máxima possível a ser adsorvida do componente, o parâmetro b_i representa a constante de Langmuir do componente e NC representa o número de componentes da mistura.

B.3 Transferência de massa

A transferência de massa entre a superfície do sólido e a fase fluida é definida pela resistência externa ao adsorvente, não sendo considerada a resistência à difusão nos poros do adsorvente.

Para tal consideração, será utilizado o modelo da Força Motriz Linear (em inglês *LDF - Linear Driving Force*), definido por:

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = k_i \cdot (q_i^* - q_i) \quad (B.2)$$

onde q_i^* representa a quantidade adsorvida do componente em equilíbrio com o fluido, dada pela isoterma de adsorção (4.1), e k_i representa o coeficiente global de transferência de massa do componente i , que pode ser determinado de forma experimental ou através de correlações que utilizam outros parâmetros para sua previsão, como o coeficiente de difusão do componente i na mistura gasosa (Malek e Farooq, 1997, apud BARG, 2000) ou a relação de variação de pressão, sendo inversamente proporcional ao coeficiente k_i (Ruthven, 1984 e Kumar, 1994, apud BARG, 2000).

B.4 Balanço de massa global

Utilizando-se o modelo da força motriz linear (LDF), referente à transferência de massa (3.2), obtém-se a equação de balanço de massa global para o sistema, considerando a fase fluida:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial(\rho \cdot v)}{\partial z} - \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon} \cdot \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial q_i}{\partial t} \quad z \in (0, L) \quad (B.3)$$

onde ε representa a porosidade do leito, z a dimensão do eixo axial (consideração 6), q_i a quantidade adsorvida do componente i (mol/volume de adsorvente) e v a velocidade do fluido.

B.5 Balanço de massa por componente

Para o balanço de massa por componente, são utilizadas NC-1 equações, sendo NC o número de componentes na mistura gasosa, conforme segue:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = Dz \cdot \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} - \frac{\partial(v \cdot C_i)}{\partial z} - \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon} \cdot \frac{\partial q_i}{\partial t} \quad i = 1, \dots, NC - 1 \quad z \in (0, L) \quad (B.4)$$

onde C_i representa a concentração molar do componente i e Dz o coeficiente de dispersão no sentido do eixo z (axial).

B.6 Balanço de energia

Conforme a consideração 3, a temperatura ao longo do eixo (z) será determinada por uma equação de balanço de energia, visto que os resultados de uma separação em condição não isotérmica apresentam resultados mais realistas (Mahle et al, 1996), conforme segue:

$$\left(Cp_g + \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon} \right) \frac{\partial T}{\partial t} = K_z \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - v \cdot Cp_s \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \sum_{i=1}^{n-1} \Delta H_{ads,i} \cdot \frac{\partial q_i}{\partial t} \quad z \in (0, L) \quad (B.5)$$

onde Cp_g representa a capacidade calorífica média à pressão constante da mistura gasosa, Cp_s a capacidade calorífica do adsorvente, K_z o coeficiente de dispersão térmica axial e $H_{ads,i}$ a entalpia de adsorção do componente i .

B.7 Balanço de quantidade de movimento

Utilizando-se da hipótese de estado quase-estacionário (Park et al., 1998) e considerando uma baixa velocidade para o gás, utilizou-se a Equação de Darcy para a conservação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial P}{\partial z} = - \frac{180\mu v}{d_p^2} \cdot \frac{(1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^2} \quad z \in (0, L) \quad (B.6)$$

onde d_p representa o diâmetro média da partícula e μ e viscosidade dinâmica da mistura gasosa.

B.8 Equação dos gases ideais

Por se tratar de uma mistura gasosa rica em hidrogênio, foi assumido comportamento de gás ideal para a fase gasosa:

$$P = \sum_{i=1}^{n-1} C_i \cdot R \cdot T \quad (B.7)$$

onde R representa a constante universal dos gases.

B.9 Cinética de transferência de massa

Através do uso de um modelo de LDF, é possível estimar a cinética de transferência de massa entre a fase gasosa e a fase que se encontra adsorvida, através da relação entre o material adsorvido e o material em equilíbrio:

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = k_i \cdot (q_i^*(z) - q_i(z)) \quad z \in (0, L) \quad (B.8)$$

onde k_i representa o coeficiente de transferência de massa global, constante que pode ser determinada de forma experimental, relacionando a adsorção do componente em um determinado adsorvente (Park et al. 1998).

B.11 Pressão de equalização

Ao se tratar de adsorção por pressões alternadas (PSA), a etapa de equalização de pressão foi um avanço importante para o ciclo de Skarstrom original, pois representa uma forma de se economizar uma parcela da energia que reside nos gases comprimidos presentes nos leitos de adsorção, ajudando na viabilização econômica e na aplicação industrial da adsorção por pressões alternadas.

Sobre a etapa de equalização de pressão em unidades de PSA, seu objetivo principal é diminuir ao mínimo as perdas energéticas utilizando os gases comprimidos de leitos com pressões superiores para pressurizar parcialmente leitos com pressões inferiores, evitando o desperdício energético ao se liberar esses gases para a atmosfera.

O valor de pressão resultante após a etapa de equalização de pressão é uma informação importante para se determinar e prever o comportamento do processo de interesse. No caso do presente trabalho, é de suma importância que se tenha a melhor aproximação possível, visto que será analisado o comportamento de uma unidade de PSA e seu padrão de equalização de pressões.

Considerando a equalização de pressão de um leito com maior pressurização (P_H) e um leito com menor pressurização (P_L), a fim de se verificar a possibilidade de uma simplificação do cálculo da pressão final de equalização, primeiramente foi estudado um cálculo mais realista para a pressão de equalização de um sistema de PSA (WARMUZINSKI, 2003).

Para o cálculo da equalização de pressão entre leitos de adsorção a pressões alternadas, é considerada a separação isotérmica de uma mistura binária de gases ideais de componentes A (espécie mais fortemente adsorvido) e B (espécie menos fortemente adsorvido), sem dispersão axial e sem efeitos cinéticos. Também é considerado que ocorre a dessorção de ambas as espécies do leito de alta pressão durante a equalização de pressão. Portanto, temos:

$$n = \frac{1}{RT} (k_A \cdot P_A + k_B \cdot P_B) \quad (B.9)$$

A quantidade de gás liberado do leito de alta pressão devido a expansão e dessorção pode ser calculado em termos da velocidade intersticial:

$$v = \frac{L}{P} \frac{d}{dt} (\alpha_A P_A + \alpha_B P_B) \quad (B.10)$$

onde,

$$\alpha_A = \frac{\varepsilon_T}{\varepsilon} + \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \cdot k_A, \quad (B.11)$$

$$\alpha_B = \frac{\varepsilon_T}{\varepsilon} + \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \cdot k_B, \quad (B.12)$$

$$\varepsilon_T = \varepsilon + \varepsilon_S(1 - \varepsilon) \quad (B.13)$$

Considerando as equações 4.14 e 4.15:

$$\alpha = \frac{\alpha_A}{\alpha_B} - 1, \quad (B.14)$$

$$C = \frac{1}{\alpha \cdot y_{AH} + 1}, \quad (B.15)$$

e, desenvolvendo a equação 4.10, chegamos à equação de pressão intermediária, 4.16:

$$P_I = \sqrt{(C+1) P_H^C \cdot P_L} \quad (B.16)$$

Como pode ser observado, para casos em que $C = 1$, temos uma simples média geométrica entre P_H e P_L . O caso em que $C = 1$ pode ocorrer quando a seletividade é próxima de um ou quando a concentração da espécie mais fortemente adsorvida (A) for muito baixa (Warmuzinski, 2003). Portanto, para casos onde C se aproxima de 1, a equação 4.16 pode ser aproximada como uma média geométrica:

$$P_I = \sqrt[2]{P_H \cdot P_L} \quad (B.17)$$

Tal equação pode ser utilizada para simplificar a análise de pressões de equalização entre etapas de regeneração onde a mistura é rica no gás de hidrogênio, mais especificamente nas etapas de Equalização (E1 e E2), e Prover Purga (PP1 e PP2).

A, B: Componente mais fortemente e menos fortemente adsorvido, respectivamente;

C: Fator de seletividade, Eq. (9.15);

k_A, k_B : Coeficientes de equilíbrio linear para o componente A e o componente B;

L: Comprimento do leito, m;

n : Número total de mols adsorvidos por unidade de volume de adsorvente, kmol/m³;

P: Pressão, kPA ou Bar;

T: Temperatura, K;

P_A, P_B : Pressão parcial dos componentes A e B, kPa;

P_H, P_L : Pressão de adsorção e dessorção (purga), kPa;

P_I : Pressão intermediária resultante nas colunas depois da etapa de equalização de pressão, kPa;

R: Constante universal dos gases (=8.3144), kJ/kmol.K;

α : Parâmetro de seletividade, Eq. (9.14);

α_A, α_B : Parâmetros de equilíbrio, Eqs. (9.11) e (9.12), respectivamente;

y_{AH} : fração molar do componente A (mais fortemente adsorvido) na vazão de alimentação;

v : velocidade intersticial, m/s;

$\varepsilon_T, \varepsilon_S, \varepsilon$: Porosidade total do leito, porosidade da partícula e porosidade relativa do leito;