

## Implementação da separação de misturas gasosas ternárias por membranas no DWSIM

Gisele M. de Souza<sup>a\*</sup>, Sofia R. A. Correa<sup>b</sup>, Daniel D. Athayde<sup>b</sup>, Kátia C. de Souza Figueiredo<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Engenharia Química, Belo Horizonte-MG, Brasil

<sup>b</sup>Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Engenharia Mecânica, Belo Horizonte-MG, Brasil

\*giselems@ufmg.br

### RESUMO

A tecnologia de membranas tem sido amplamente empregada para a separação de gases. Quando comparada aos processos convencionais, ela se destaca por apresentar maior facilidade de operação e menor consumo de energia (Baker, 2023). A eficiência da separação de gases é um dos principais parâmetros de desempenho dessa tecnologia e sabe-se que ela é função dos padrões de escoamento, das propriedades das membranas e das condições operacionais.

Com o objetivo de avaliar o uso dessa tecnologia e prever o seu desempenho em diferentes condições de operação, foi desenvolvido um modelo numérico para simular um módulo de membranas de fibra oca operando em corrente cruzada com alimentação composta por três gases. O algoritmo é composto pelo método de diferenças finitas acoplado com o método Newton-Raphson. Ele foi implementado no DWSIM, *software* de simulação de processos de código aberto e gratuito que permite análises de sensibilidade e de otimização, além do uso de pacotes de propriedades termodinâmicas de gases reais.

Cada fibra oca foi modelada como uma geometria anular com permeação na direção radial. O modelo proposto assumiu as seguintes considerações: comportamento de gases ideais; processo isotérmico e isobárico, permeâncias independentes da temperatura, pressão e composição do gás e sem o efeito de concentração por polarização.

Para os cálculos da vazão molar e das concentrações do gás permeado, foi considerado um balanço de material em cada volume de controle, o qual foi discretizado utilizando o esquema de diferenças finitas. Uma vez que o balanço de material foi aplicado para cada componente da mistura ternária, formou-se um conjunto de equações algébricas não-lineares, que foram resolvidas iterativamente usando o método de Newton-Raphson.

O modelo foi validado com o dado experimental de Brunetti et al. (2020) em um estudo de separação de gases de combustão - mistura ternária composta por CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> e O<sub>2</sub> – e apresentou desvio de apenas 0,7%. Após a validação, foi realizada uma análise de sensibilidade no DWSIM, variando as vazões de alimentação para avaliar a concentração de CO<sub>2</sub> no permeado como função da recuperação de CO<sub>2</sub>. Foi observado que, à medida que a recuperação de CO<sub>2</sub> aumenta, a concentração de CO<sub>2</sub> no permeado vai diminuindo consideravelmente. Quando a recuperação atinge valores próximos de 100%, a concentração de CO<sub>2</sub> diminui rapidamente para a concentração inicial de 15%.

Concluímos que o uso do *software* DWSIM foi adequado para implementação do modelo, permitindo solução rápida e eficiente usando um módulo de membrana. Foram alcançados resultados conforme esperado, aumentando a acessibilidade a ferramentas avançadas de análises de processos industriais. Como próximos passos, pretende-se acoplar, por meio do DWSIM, o processo de separação por membranas com equipamentos como compressores, trocadores de calor, resfriadores, além de avaliar diferentes design de processos – com dois ou mais módulos de membranas e a inclusão de correntes de reciclo.

**Palavras-chave:** separação de gases, membranas, simulação de processos.

**Agradecimentos:** Os autores agradecem à FINEP (2429/22) pelo apoio financeiro.

### Referências

Baker, R. Membrane Technology and Applications, John Wiler & Sons: 2023.

Brunetti, et al. (2020). CO<sub>2</sub> separation from humidified ternary gas mixtures using a polydecylmethylsiloxane composite membrane. *Fuel Processing Technology*, 210, 106550.