

Modelagem de isotermas de adsorção de CO₂/CH₄ em carvão ativado derivado do caroço de cajá com avaliação de incertezas

Gabriel Dias Ferrão^{a*}, Deborah Carneiro da Silva^a, Ana Luisa Nogueira dos Santos^a, Fábio Pedro do Nascimento^a, Márcio André Fernandes Martins^a, Silvio Alexandre Beisl Vieira de Melo^a

^aUniversidade Federal da Bahia, Centro Interdisciplinar de Energia e Ambiente, Laboratório de Captura de CO₂, Salvador-BA, Brasil

*gabriel.ferrao@ufba.br

RESUMO

Tecnologias de adsorção têm se destacado na captura de CO₂, tanto pela aplicação industrial competitiva quanto pelos avanços de materiais adsorventes sustentáveis de baixo custo. O processo Electrical Swing Adsorption (ESA) insere-se no contexto do pré-sal brasileiro, cujo gás associado produzido apresenta elevado teor de CO₂, tornando-o uma alternativa promissora para a purificação do gás natural. Este trabalho teve como objetivo modelar isotermas de equilíbrio de adsorção de CO₂ e CH₄ em carvão ativado sintetizado a partir do caroço de cajá, com avaliação das incertezas associadas às medições, aos parâmetros e às previsões dos modelos.

Os experimentos foram realizados em balança gravimétrica, com medições até 50 bar e em três temperaturas, para gases puros e em mistura. Os parâmetros das isotermas puras foram ajustados pelos modelos de Langmuir, Freundlich, Sips e Toth, por mínimos quadrados ponderados (WLS) pelas incertezas padrão de medição (combinação das fontes do tipo A e B). A qualidade dos ajustes foi avaliada pela matriz de covariância dos parâmetros, pelas regiões de abrangência e pela análise dos resíduos, permitindo a avaliação de incertezas e correlações paramétricas. Para a mistura, foi empregada inicialmente a abordagem Ideal Adsorbed Solution Theory (IAST), baseada na hipótese de idealidade da fase adsorvida (Myers & Prausnitz, 1965), com propagação das incertezas por meio de simulações de Monte Carlo (JCGM, 2008). Em seguida, utilizou-se a Real Adsorbed Solution Theory (RAST) como extensão não ideal da IAST, incorporando coeficientes de atividade na fase adsorvida para representar melhor as interações no sistema, sobretudo em altas pressões.

Os resultados mostraram parâmetros ajustados de forma consistente, isto é, com incertezas de predição próximas às de medição. Os modelos Langmuir e Toth apresentaram baixas correlações e distribuição paramétrica próxima de uma Gaussiana, enquanto o modelo Sips apresentou menor erro global, além de apresentar um desempenho superior na modelagem da mistura. A IAST representou razoavelmente o sistema, com sobreposição entre incertezas de predição e experimentais, mas apresentou ineficiência ao capturar o comportamento em pressões elevadas. Já a RAST apresentou previsões muito mais próximas dos dados experimentais nessas condições, dentro da margem de incertezas, evidenciando maior robustez na representação da fase adsorvida.

Conclui-se que a modelagem das isotermas puras foi consistente e que a avaliação das incertezas conferiu confiança ao processo de tomada de decisão na escolha dos modelos para a modelagem da mistura. Para o sistema CO₂/CH₄, a IAST se mostrou adequada como primeira aproximação, porém a RAST apresentou melhor desempenho ao incorporar as não-idealidades da fase adsorvida, resultando em estimativas mais aderentes aos dados e às incertezas experimentais.

Palavras-chave: Adsorção, IAST, RAST, Análise de incertezas, Separação CO₂/CH₄

Agradecimentos: Os autores agradecem à ANP e à CNPC Brasil pelo financiamento da pesquisa com recursos da Cláusula de P&D.

Referências

Joint Committee for Guides in Metrology (JCGM). (2008). *Evaluation of measurement data — Guide to the expression of uncertainty in measurement*.

Myers, A. L., & Prausnitz, J. M. (1965). Thermodynamics of mixed-gas adsorption. *AIChE Journal*, 11(1), 121–127. M. Schmal: Chemical Reaction Engineering (1a. Ed.), CRC Press: 2014.



Realização:

