



Anais do 2º Encontro Brasileiro sobre Adsorção

Davesac, R.R., L.T. Pinto e A.E. Rodrigues, "Simulações dos Ciclos de TSA na Separação do Sistema Fenol-Água," In. 2º Encontro Brasileiro sobre Adsorção, maio de 1998, Florianópolis, Santa Catarina. *Anais de Trabalhos Apresentados*, Leonel T. Pinto (editor), pp. 269-280, Universidade Federal de Santa Catarina, SC, Brasil, 2000.

SIMULAÇÕES DOS CICLOS DE TSA NA SEPARAÇÃO DO SISTEMA FENOL-ÁGUA

Rodrigo R. Davesac¹, Leonel T. Pinto¹ e Alírio E. Rodrigues²

1 - Departamento de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos,
Universidade Federal de Santa Catarina, 88040-900, Florianópolis, SC, Brasil

2 – Departamento de Engenharia Química, Universidade do Porto,
4099 Porto Codex, Portugal

RESUMO: Neste trabalho discute-se a utilização do processo de TSA para a separação do sistema fenol-água/Duolite ES-861, através das simulações efetuadas para a saturação de um leito fixo de adsorvente e sua posterior regeneração. São comparados modelos matemáticos que consideram, ou não, a etapa de resistência de massa no interior do adsorvente. No primeiro caso utilizou-se o modelo de força motriz linear, LDF. Um pacote computacional foi elaborado em Visual Basic, o qual interage com um programa secundário escrito em Fortran para a solução das equações através do conjunto de subrotinas denominado PDECOL. Observa-se uma boa previsão do comportamento geral do processo com a utilização do modelo de equilíbrio com dispersão axial e com o modelo da força impulsora linear (LDF) com o termo de dispersão axial. O estudo mostra as possibilidades do processo TSA para a recuperação de solutos por adsorção.

Palavras-chave: Simulação, TSA, adsorção, LDF

INTRODUÇÃO

A dependência das isotermas de adsorção com a temperatura pode ser usada como fator de separação. Recen-

temente um processo cíclico foi proposto utilizando este fator. Trata-se do processo de separação por **Adsorção com Alternância de Temperatura, TSA** (Temperature Swing Adsorption). O

objetivo é intercambiar etapas de adsorção e dessorção apenas pela mudança de temperatura no fluido (Yamagiwa et al., 1997). Algumas aplicações já foram relatadas na literatura. São exemplos a utilização de TSA para aumentar a concentração de ozônio, apresentado por Hiroshi Sanui em *Chementator*, e a remoção e recuperação de uma amina do ar de saída de uma fundição por adsorção com a combinação do processo de vácuo com TSA, discutida por Boger e colaboradores (1997), com base em estudos experimentais e simulações.

Como uma das principais vantagens deste processo, o adsorvente é regenerado unicamente por pequenas mudanças de temperatura. Esta vantagem se destaca quando é colocada face às necessidades usuais dos processos de adsorção convencionais, nos quais usa-se solventes ou se produz variações significativas de temperatura e pressão.

Neste trabalho o processo TSA é aplicado ao estudo da separação do sistema fenol-água. Esta separação é importante no aspecto ambiental, onde a recuperação do fenol é necessária. Para substanciar este estudo são usados os dados relativos a este sistema, obtidos por Ferreira e Rodrigues (1995-a)

DESCRIÇÃO DO PROCESSO

TSA é um processo de separação no qual uma fase fluida percola através de um leito fixo composto por um sólido poroso, até que seja atingido o equilíbrio de adsorção. Esta parte do processo é chamada de “**etapa de saturação**.” Em seguida dá-se início a “**etapa de regeneração**,” quando

outra fase fluida, que pode ter a mesma composição da anterior, passa a percolar com uma temperatura superior, até que seja atingido novo estado de equilíbrio de adsorção. O conjunto das destas duas etapas caracteriza um ciclo. No período de evolução entre os dois estados de equilíbrio, a fase fluida apresenta, na saída da coluna, períodos de baixa e de alta concentração do adsorbato. A coluna produz então duas fases fluidas, uma empobrecida e outra enriquecida do adsorbato. Um esquema do processo, para o caso no qual as temperaturas fria e quente são, respectivamente, 20°C e 60°C, é mostrado na figura (1). Várias colunas podem ser usadas em sequência, de modo a aumentar o grau de separação final. As figuras (2) e (3) mostram as concentrações do adsorbato na saída da coluna e na fase adsorvida, nas várias fases de um ciclo.

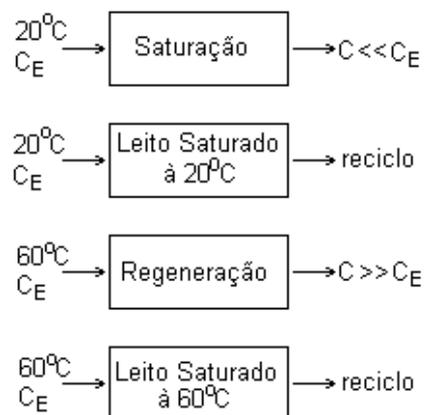


Figura 1 – Representação esquemática de um ciclo de TSA. O leito é saturado a 20°C e regenerado a 60°C.

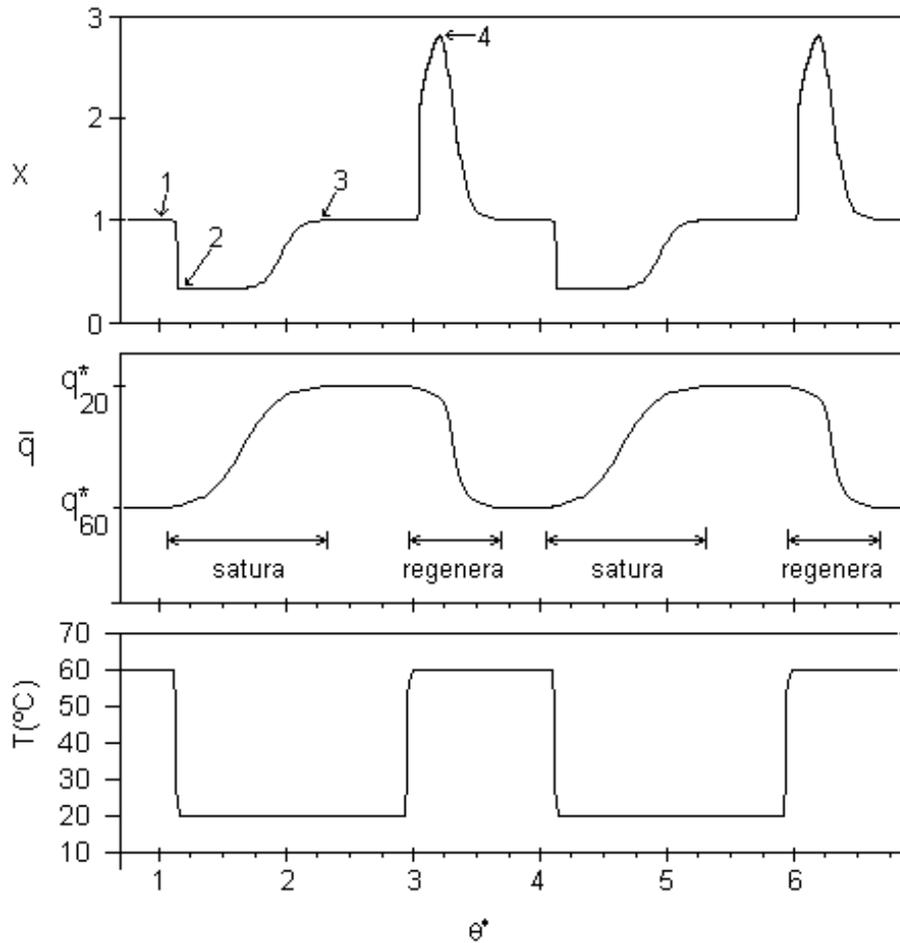


Figura 2 – Comportamento das variáveis durante dois ciclos completos. A saturação é realizada à $20,0^\circ\text{C}$ e a regeneração à $60,0^\circ\text{C}$. Os pontos indicados na figura correspondem aqueles representados na figura (3).

X – concentração de soluto no líquido à saída da coluna;
 \bar{q} – concentração média de soluto na fase adsorvida;

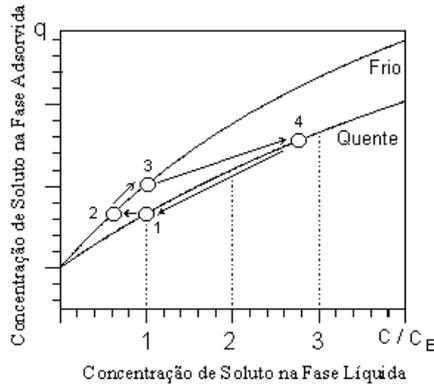


Figura 3 – Variações das concentrações do soluto na saída da coluna, na fase líquida, $C(L)$, e na fase adsorvida $q(L)$ durante um ciclo.

Os pontos indicados nas figuras (2) e (3) significam:

- (1) ponto de equilíbrio na isoterma quente, com $C=C_E$
- (1) – (3) etapa de saturação
- (2) concentração mínima obtida na saída da coluna
- (3) ponto de equilíbrio, na isoterma fria, com $C=C_E$
- (3) – (1) etapa de regeneração
- (4) concentração máxima obtida na saída da coluna

MODELAGEM MATEMÁTICA

Os ciclos TSA são realizados em colunas de adsorção em leito fixo. Como a descrição do processo completo envolve a solução simultânea de vários ciclos, procura-se propor modelos mais simplificados, cuja solução não consuma muito tempo computacional. Neste trabalho são comparados dois modelos matemáticos que diferem pela consideração, ou não, das etapas de resistência de massa, no filme externo à partícula e no interior dos poros.

Modelo de Equilíbrio sem resistência de massa na partícula

O modelo matemático proposto considera dispersão axial na coluna e adsorção de equilíbrio dada pela isoterma de Langmüir. Além disso, o modelo não leva em conta as etapas de transferência de massa no filme externo às partículas e no interior do sólido poroso. Nestas condições, os balanços de massa e energia na fase fluida da coluna resultam respectivamente nas equações (1) e (2). Nelas, C , \bar{q} e \bar{C}_p são as concentrações do soluto, respectivamente, na fase fluida da coluna, média na fase adsorvida e média na fase fluida dos poros. T é a temperatura.

$$\varepsilon \cdot \frac{\partial C}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial C}{\partial z} + (1-\varepsilon) \cdot \left\{ \rho_{sw} \cdot f_{sw} \cdot \frac{\partial \bar{q}}{\partial t} + \varepsilon_p \cdot \frac{\partial \bar{C}_p}{\partial t} \right\} = \varepsilon \cdot D_{ax} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (1)$$

$$e \left[\varepsilon \cdot \rho_f C_{pf} + (1-\varepsilon) \rho_s C_{ps} \right] \frac{\partial T}{\partial t} + u \cdot \rho_f \cdot C_{pf} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + h_{fw} \cdot \frac{4}{d} \cdot [T - T_{amb}] = K_{ax} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (2)$$

Como consequência da não consideração das etapas de transferência de massa no interior dos poros, tem-se que:

$$\bar{C}_p = C_p = C, \text{ e } \bar{q} = q$$

Assim, a equação (1) pode ser escrita como:

$$\left[1 + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \cdot \varepsilon_p \right] \cdot \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{u}{\varepsilon} \cdot \frac{\partial C}{\partial z} + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \cdot \rho_{sw} \cdot f_{sw} \cdot \frac{\partial q}{\partial t} = D_{ax} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (3)$$

onde q é a concentração do soluto na fase adsorvida.

Nos pontos $z=0$ e $z=L$, as condições de contorno são as seguintes:

$$\left. \begin{aligned} C(0,t) = C_E \quad \therefore \quad T(0,t) = T_f \\ \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{z=L} = 0 \quad \therefore \quad \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=L} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Modelo da Força Motriz Linear com Equilíbrio de Adsorção

Neste modelo é considerada a resistência à transferência de massa no interior dos poros. As equações (1) e (2) representam os balanços de massa e energia na fase fluida externa. Neste caso, no entanto, as concentrações médias no poro e na fase adsorvida, respectivamente \bar{C}_p e \bar{q} , precisam ser calculadas por meio de um balanço de massa na partícula. Esta equação pode ser escrita com a consideração de que tudo o que penetra na partícula por difusão, causará uma variação das concentrações médias na fase fluida dos poros e na fase adsorvida. Com este raciocínio, pode-se escrever:

$$\rho_{sw} \cdot f_{sw} \cdot \frac{\partial \bar{q}}{\partial t} + \varepsilon_p \cdot \frac{\partial \bar{C}_p}{\partial t} = \frac{3}{R_p} \cdot D_{ef} \cdot \frac{\partial \bar{C}_p}{\partial r} \Big|_{r=R_p} \quad (5)$$

Na ausência de resistência de massa no filme externo à partícula, o termo difusivo pode ser linearizado por (Glueckauf, 1947 e 1955),

$$\frac{\partial \bar{C}_p}{\partial r} \Big|_{r=R_p} = \frac{C - \bar{C}_p}{0,2 \cdot R_p} \quad (6)$$

que caracteriza o modelo de **Força Motriz Linear, Linear Driving Force – LDF**. Aplicando (6) em (5), obtém-se:

$$\rho_{sw} \cdot f_{sw} \cdot \frac{\partial \bar{q}}{\partial t} + \varepsilon_p \cdot \frac{\partial \bar{C}_p}{\partial t} = K_p \cdot [C - \bar{C}_p] \quad (7)$$

onde $K_p = D_{ef} \cdot \frac{15}{R_p^2}$ é a constante do modelo LDF.

Modelos Matemáticos Adimensionalizados

Os dois modelos matemáticos são adimensionalizados com as seguintes relações:

$$\left. \begin{aligned} X &= \frac{C}{C_E}; \quad \bar{X}_p = \frac{\bar{C}_p}{C_E}; \\ Y &= \frac{q}{Q_L}; \quad \bar{Y} = \frac{\bar{q}}{Q_L} \\ z^* &= \frac{z}{L}; \quad \theta = \frac{t}{t_{ST}} = \frac{u}{\varepsilon L} \cdot \frac{t}{1 + \xi_m} \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

e

$$\left. \begin{aligned} T^* &= \frac{T}{T_{ref}}; \quad T_f^* = \frac{T_f}{T_{ref}}; \quad T_{amb}^* = \frac{T_{amb}}{T_{ref}} \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

e fazendo ainda,

$$\left. \begin{aligned} Pe &= \frac{u \cdot L}{\varepsilon \cdot D_{ax}}; \quad Pe_h = \frac{u \cdot L \cdot \rho_f \cdot Cp_f}{K_{ax}} \\ \xi_m &= \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \cdot \frac{\rho_{SW} \cdot f_{SW} \cdot Q_L}{C_E} \\ \xi_h &= \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \cdot \frac{\rho_S \cdot Cp_S}{\rho_f \cdot Cp_f} \\ \sigma &= \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \cdot \varepsilon_p \\ N_{hw} &= \frac{\varepsilon \cdot L}{u} \cdot \frac{h_{we} \cdot 4/d}{\rho_f \cdot Cp_f \cdot \varepsilon} \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

onde

Pe, Pe_h Números de Peclet para massa e calor

N_{hw} Número de unidades de transferência de calor na parede

ξ_h, ξ_m Parâmetros de capacidade térmica e mássica

Obtém-se os modelos adimensionalizados, mostrados nas tabelas (1) - (3):

Tabela 1 – Adimensionalização do Modelo de Equilíbrio sem resistência de massa na partícula –

Balanco de massa na coluna

$$\frac{1}{Pe} \cdot \frac{\partial^2 X}{\partial z^{*2}} - \frac{\partial X}{\partial z^*} = \frac{1 + \sigma}{1 + \xi_m} \cdot \frac{\partial X}{\partial \theta} + \frac{\xi_m}{1 + \xi_m} \cdot \frac{\partial Y}{\partial \theta}$$

(11)

TABELA 2 – Adimensionalização do Modelo da Força Motriz Linear com Equilíbrio de

Balanco de massa na coluna

$$\frac{1}{Pe} \cdot \frac{\partial^2 X}{\partial z^{*2}} - \frac{\partial X}{\partial z^*} = \frac{1}{1 + \xi_m} \left\{ \frac{\partial X}{\partial \theta} + \xi_m \cdot \frac{\partial \bar{Y}}{\partial \theta} + \sigma \cdot \frac{\partial \bar{X}_p}{\partial \theta} \right\} \quad (12)$$

Balanco de massa no interior das partículas

$$\frac{\xi_m}{1 + \xi_m} \cdot \frac{\partial \bar{Y}}{\partial \theta} + \frac{\sigma}{1 + \xi_m} \cdot \frac{\partial \bar{X}_p}{\partial \theta} = N_p \cdot [X - \bar{X}_p] \quad (13)$$

Onde $N_p = (1 - \varepsilon) \cdot K_p \cdot \frac{L}{u}$ pode ser definido como o número de unidades de transferência de massa na partícula

TABELA 3 - Equações adimensionalizadas comuns aos dois modelos matemáticos

Balço de energia na coluna

$$\frac{1}{Pe_h} \cdot \frac{\partial^2 T^*}{\partial z^{*2}} - \frac{\partial T^*}{\partial z^*} = \frac{1 + \xi_m}{1 + \xi_m} \cdot \frac{\partial T^*}{\partial \theta} + N_{hw} \cdot (T^* - T_{amb}^*) \quad (14)$$

Isoterma de equilíbrio de adsorção

$$Y = \frac{\bar{K}_L \cdot X}{1 + \bar{K}_L \cdot X} \quad (15)$$

$$\text{com } \bar{K}_L = C_E \cdot k_0 \cdot \exp\left(\frac{-\Delta H}{R \cdot T_{ref} \cdot T^*}\right)$$

condições de contorno para as equações 11, 12 e 14, nos pontos $z^*=0$ e $z^*=1$

$$\left. \begin{aligned} X(0, \theta) = 1 \quad \therefore \quad T^*(0, \theta) = T_i^* \\ \left. \begin{aligned} \frac{\partial X}{\partial z^*} \Big|_{z^*=1} = 0 \quad \therefore \quad \frac{\partial T^*}{\partial z^*} \Big|_{z^*=1} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

Condições iniciais:

no início do primeiro ciclo temos que:

$$\theta = 0 \rightarrow \begin{cases} X(z^*, 0) = 0 \\ T(z^*, 0) = T_{inicial} \end{cases} \quad (17)$$

em todos os outros ciclos, $X(z^*, 0)$ e $T(z^*, 0)$ são aqueles existentes no final do ciclo anterior

CARACTERÍSTICAS DO SISTEMA

Neste trabalho é estudada a separação do sistema Fenol-Água pelo uso de Duolite ES-861 como adsorvente. Este sistema foi estudado previamente por Ferreira e Rodrigues (1995.a). A tabela (4) apresenta os valores dos parâmetros utilizados nas simulações dos ciclos TSA. Como **caso base** para o estudo da influência dos diversos parâmetros é usada a configuração indicada por asterisco nesta tabela.

Tabela 4 – Valores dos parâmetros utilizados nas simulações

Características da resina:

$$\begin{aligned} \rho_{SW} &= 1020 \text{ Kg resina úmida/m}^3 \text{ res. úmida} \\ f_{SW} &= 0,28 \text{ Kg seco/Kg úmido} \\ R_P \text{ (x10}^4 \text{m)} &= 2,35^* \\ \epsilon_p &= 0,72 \\ \tau_p &= 2,93 \\ \xi_h &= 1,3 \end{aligned}$$

Características do leito:

$$\begin{aligned} L \text{ (m)} &= 0,75^* \\ d \text{ (m)} &= 0,09^* \\ \epsilon &= 0,40 \end{aligned}$$

Variáveis de operação:

$$\begin{aligned} T_{cold} \text{ (K)} &= 293,15 \text{ (20 } ^\circ\text{C)} \\ T_{hot} \text{ (K)} &= 333,15 \text{ (60 } ^\circ\text{C)} \\ T_{ref} \text{ (K)} &= 273,15 \\ F \times 10^6 \text{ (m}^3 \text{/s)} &= 2,50^* \\ C_E \text{ (Kg soluto/m}^3 \text{ solução)} &= 0,05, \\ &0,099^*, 0,400 \end{aligned}$$

Parâmetros de transporte:

$$\begin{aligned} D_{ax} \text{ (20} ^\circ\text{C)} \text{ (m}^2 \text{/s)} &= 8,9 \times 10^{-10} \\ D_{ax} \text{ (60} ^\circ\text{C)} \text{ (m}^2 \text{/s)} &= 2,2 \times 10^{-9} \\ D_{ef} \text{ (20} ^\circ\text{C)} \text{ (m}^2 \text{/s)} &= 2,2 \times 10^{-10} \\ D_{ef} \text{ (60} ^\circ\text{C)} \text{ (m}^2 \text{/s)} &= 5,4 \times 10^{-10} \\ h_{we} \text{ (KJ/m}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{s)} &= 1,42 \times 10^{-2} \end{aligned}$$

Parâmetros dos modelos:

$$Pe = 120$$

$$Pe_h = 100$$

$$\xi_m = 94,19^*$$

$$N_P (20^\circ\text{C}) = 94,47^*$$

$$N_P (60^\circ\text{C}) = 233,54^*$$

Parâmetros de equilíbrio:

$$Q_L (\text{Kg soluto/Kg resina seca}) = 0.07$$

$$K_0 (\text{m}^3 \text{solução/Kg soluto}) = 3.96 \times 10^{-4}$$

$$\Delta H (\text{KJ/Kmol}) = - 22751$$

Parâmetros do modelo LDF:

$$K_P (60^\circ\text{C}) (\text{min}^{-1}) = 12.24$$

$$K_P (20^\circ\text{C}) (\text{min}^{-1}) = 4.95$$

$$N_{hw} = 0.288^*, 1.154$$

COMPARAÇÕES ENTRE OS MODELOS

Os dois modelos matemáticos foram solucionados para o caso base e para variações dele, com o objetivo de comparar as soluções e verificar a influência dos parâmetros. A figura (4) mostra o efeito de variações na concentração da alimentação. Observa-se que o fator de separação diminui com a concentração. Esta diminuição é pouco significativa na faixa em estudo, porque as três concentrações usadas situam-se aproximadamente na região linear de ambas as isotermas. No entanto, elas se aproximam na região de saturação. Deste modo, com o aumento de C_E , a diferença dos equilíbrios nas duas isotermas diminui. Nestas condições, a medida que se enriquece a solução, pelo uso em cascata de colunas TSA, o fator de separação vai reduzindo até atingir um ponto em que o aumento no seu número deixa de ser econômico.

A figura (5) apresenta uma comparação direta entre os dois modelos. É possível observar o efeito da etapa de transferência de massa, de suavizar a transição entre os vários pontos de equilíbrio. Isto se deve ao efeito dispersivo do modelo LDF. Verifica-se que, nas condições de operação utilizadas, os dois modelos são equivalentes, uma vez que as curvas para ambos encontram-se sempre centradas no mesmo ponto.

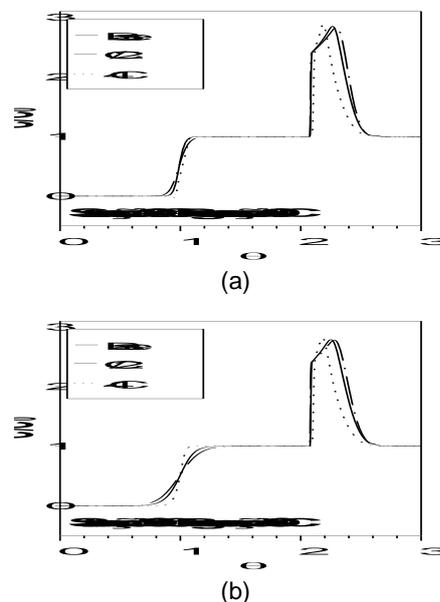


Figura 4 – Perfis de concentração para os modelos (a) de equilíbrio e (b) LDF, em função da variação na concentração da alimentação, C_E .

Finalmente, é interessante observar o comportamento da curva de operação para os casos em que se utiliza soluções com concentrações diferentes nas fases de saturação e

regeneração. Na figura .(6) apresenta-se um exemplo, quando a segunda etapa é realizada com solução onde o soluto está em uma concentração inferior à C_E . Quando esta concentração é inferior aquela associada ao ponto 2, na figura (3), não existe enriquecimento. Isto ocorre porque $q_{\text{ponto 3}} < q_{\text{ponto 1}}$.

Deste modo, pode-se concluir que um processo TSA exige duas sequências de colunas. Uma para processar as soluções cada vez mais enriquecidas e outra, para as soluções com pureza crescente.

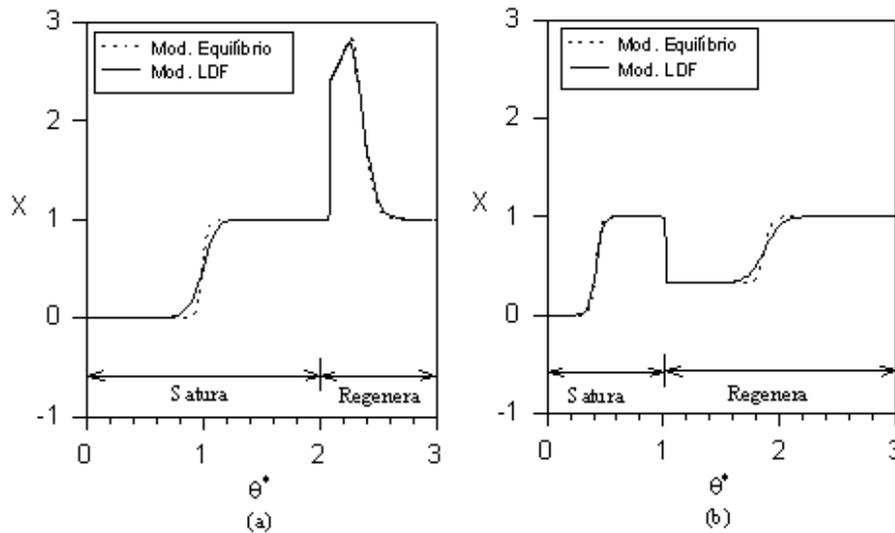


Figura 5 - Comparação entre os modelos - (a) Saturação com C_E à 20°C e regeneração a C_E à 60°C; (b) Saturação com C_E à 60°C e regeneração a C_E à 20°C.

PACOTE COMPUTACIONAL

Para a solução dos modelos matemáticos propostos foi construído um pacote computacional, que foi denominado **Visual TSA 1.0**. O aplicativo possui uma interface gráfica escrita em Visual Basic, que interage com um programa em Fortran, o qual soluciona os modelos matemáticos. Para a segunda parte foi utilizado um conjunto de subrotinas de domínio público, o PDECOL (Madsen e Sicovec, 1979). Estas subrotinas discretizam as equa-

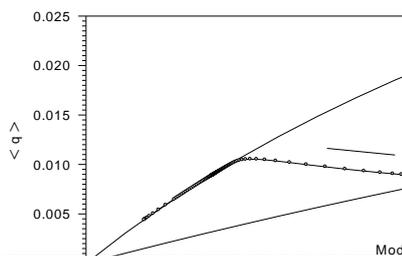


Figura 6 - Caso em que se equilibra o leito a 60°C e depois passa-se a solução com 15% da concentração inicial

ções diferenciais através do método de colocação em elementos finitos. Além de solucionar o problema, o pacote permite uma rápida visualização dos resultados.

As telas principais do programa são apresentadas na figura (7)

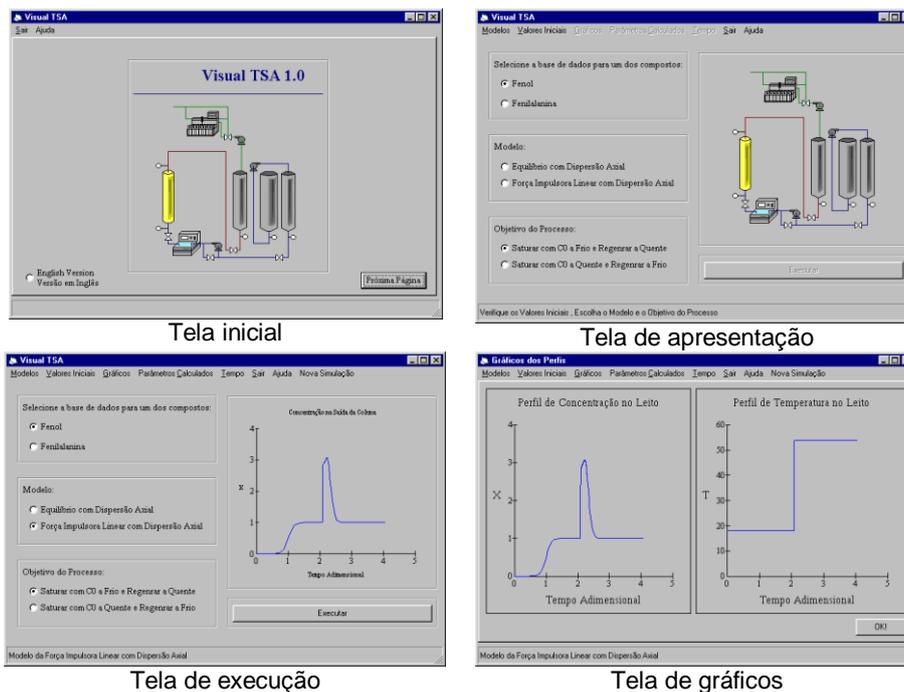


Figura 7 – Telas principais do aplicativo **Visual-TSA 1,0**

CONCLUSÕES

Este estudo do Processo de Separação por Adsorção com Alternância de Temperatura, TSA, mostra que existem perspectivas interessantes nesta técnica. O fato principal é o uso de uma dessorção parcial, não forçada. Pode-se então evitar os problemas dos métodos tradicionais, onde se usa solventes que

precisam ser separados posteriormente, ou se necessita aplicar temperaturas ou pressões mais elevadas.

Os modelos matemáticos testados mostraram-se capazes de reproduzir o processo, principalmente nos casos em que a etapa de transferência de massa no interior das partículas é pouco importante. No caso em que esta etapa tenha uma contribuição importante, o modelo LDF é indicado pela sua simplicidade e rapidez computacional.

O pacote computacional desenvolvido é de utilização fácil e converge com rapidez. Seu uso permitiu uma rápida visualização dos resultados e facilita o estudo da influência dos diversos parâmetros.

AGRADECIMENTOS

Ao CNPq pelo suporte financeiro.

NOMENCLATURA

C, C_p	Concentrações do soluto na coluna e nos poros, Kg de soluto/m ³ de solução
C_E	Concentração do soluto na alimentação, Kg de soluto/m ³ de solução
C_{p_f}, C_{p_s}	Capacidades caloríficas do fluido e do sólido, KJ/(Kg de fluido.K) e KJ/(Kg de resina seca.K)
d	Diâmetro da coluna, m
D_{ax}, D_{ef}	Coefficientes de dispersão axial e de difusão efetivo nos poros, m ² /s
ΔH	Calor de adsorção, KJ/(Kg mol)
f_{sw}	Fator de umidade do sólido (Kg de resina seca/Kg de resina úmida)
h_{we}	Coefficiente de transferência de calor efetivo na parede da coluna, KJ/(m ² .s.K)
K_{ax}	Condutividade térmica axial, KJ/(m.s.K)
K_p	Constante do modelo LDF
k_0	Fator pré-exponencial da isoterma de Langmüir
L	Altura da coluna, m

N_{hw}	Número de unidades de transferência de calor na parede
N_p	Número de unidades de transferência de massa na partícula
Pe, Pe_h	Número de Peclet para massa e calor
q	Concentração do soluto na fase adsorvida, Kg adsorvido/Kg do sólido seco
Q_L	Parâmetro da isoterma de Langmüir, Kg soluto adsorvido/Kg resina seca
r, R_p	Coordenada radial e raio da partícula, m
R	Constante universal dos gases, KJ/(Kgmol.K)
t	Tempo, s
t_{ST}	Tempo estequiométrico, s
T, T_f, T_{amb}	Temperaturas, do fluido, da alimentação e ambiente, K
u	Velocidade superficial, m/s
X, Y	Concentrações adimensionais no fluido e no sólido
z	Coordenada axial, m

Letras Gregas

ϵ, ϵ_p	Porosidades da coluna e da partícula
ξ_h, ξ_m	Parâmetros de capacidade térmica e mássica
ρ_{sw}	Densidade úmida do sólido (Kg de resina úmida/m ³ de resina úmida)
ρ_f, ρ_s	Densidades, do fluido em Kg da solução/m ³ da solução, e do sólido em Kg de resina seca/m ³ de resina úmida
θ	Tempo normalizado

Símbolos

*	Variável ou parâmetro adi-
---	----------------------------

–
q mensional
Valor médio

REFERÊNCIAS

- Boger, T., A. Salden e G. Eigenberger (1997) "A combined vacuum and temperature swing adsorption process for the recovery of amine from foundry air," *Chemical Engineering Science*, 36, 231-241
- Davesac, R.R. (1997) "Desenvolvimento de um Pacote Computacional para a Simulação dos Processos de Separação por Bombeamento Paramétrico Térmico," *Dissertação de Mestrado*, Universidade Federal de Santa Catarina, 140 pgs.
- Ferreira, L.M. e A.E. Rodrigues (1995.a) "Adsorptive Separation by Thermal Parametric Pumping. Part. I: Modeling and Simulation," *Adsorption*, 1, 213-231
- Ferreira, L.M. e A.E. Rodrigues (1995.b) "Adsorptive Separation by Thermal Parametric Pumping. Part. II: Experimental Study of the Purification of Aqueous Phenolic Solutions at Pilot Scale," *Adsorption*, 1, 233-252
- Glueckauf, E. e J.I. Coates (1947) "Theory of Chromatography. Part IV. The Influence of Incomplete Equilibrium on the Front Boundary of Chromatograms and on the Effectiveness of Separation," *Journal of Chemical Society*, 1315-1321
- Glueckauf, E. (1955) "Theory of Chromatography. Part X. Formulate for Diffusion into Spheres and their application to Chromatography," *Trans. Faraday Society*, 51, 1540-1551
- Madsen, N.K. e R.F. Sincovec (1979) "PDECOL: General Collocation Software for Partial Differential Equation," *ACM Trans. Math. Software*, 5 (3), 326-351
- Yamagiwa, K., M. Katoh, M. Yoshida, A. Ohkawa e H. Ichijo (1997) "Potentiality of Temperature Swing Adsorption for removal of Hydrophobic Contaminants in Water," *Wat. Sci. Tech.*, 35 (7), 213-218

ABSTRACT

The TSA process is used for the separation of fenol-water, with DUOLITE ES-861 adsorbent. Two mathematical models are proposed, an Equilibrium Model with Axial Dispersion, and a Linear Driving Force Model. The second one considers the mass transfer step inside the particle. A software was develop in way to make easier the visualization of the results. The solution of the mathematical equations is done by PDECOL, which is a set of public domain sub-routines, that use the finite element with collocation method. The results show the possibilities of the TSA under a technical and a economical point of view.