

PREDICCIÓN DE LA SELECTIVIDAD DE LA MEZCLA BINARIA CO₂/CH₄ MEDIANTE SIMULACIÓN DE MONTE CARLO

J.C.A. Oliveiraa, R.B. Riosb, C.L. Cavalcante Jrb, D.C.S. Azevedob R.H. López.

- a. Instituto de Física Aplicada (INFAP), CONICET-Universidad Nacional de San Luis, San Luis, Argentina
- b. Grupo de Pesquisa em Separações por Adsorção (GPSA), Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, Brasil"

La separación y purificación por adsorción de gases son procesos importantes en muchas aplicaciones industriales y ambientales. El diseño adecuado de estos procesos depende del conocimiento y entendimiento del comportamiento de la adsorción de los diversos gases que componen la mezcla. Desde hace ya varios años, ha habido un gran esfuerzo de la comunidad científica para predecir la adsorción de multicomponentes (sistemas con más de un gas) basado en las isothermas de adsorción de cada uno de los componentes puros de la mezcla. De hecho, experimentos de adsorción multicomponente son tediosos y lentos y la ingeniería de procesos busca métodos fiables que permitan evitarlos. La teoría de la Solución Adsorbida Ideal IAST [1] (del inglés "Ideal Adsorption Solution Theory), ha sido con mucho el método más utilizado para lograr este objetivo desde que fue propuesto hace unos 50 años. Más recientemente, la teoría funcional de la densidad (DFT) y simulaciones de Monte Carlo en el Gran Canónico (GCMC) se han utilizado en la búsqueda de un enfoque más preciso [2–3]. En el presente trabajo se propone un nuevo modelo, basado en simulaciones de Monte Carlo Gran Canónico, que combina las dos PSDs de los gases puros. La aplicación de este modelo a los datos experimentales de adsorción de la mezcla CO₂/CH₄ en una muestra de carbón activado comercial mostró un buen acuerdo con respecto la IAST y otros modelos basados en simulación de Monte Carlo.