

AVALIAÇÃO DOS EFEITOS DA RECIRCULAÇÃO EM SISTEMAS CAPTURA DE DIÓXIDO DE CARBONO POR ADSORÇÃO

Amanda Costa Andrade ¹; João de Sá Brasil Lima ²

¹ Aluna de Iniciação Científica do Instituto Mauá de Tecnologia (IMT);

² Professor do Instituto Mauá de Tecnologia (IMT).

Resumo. *A crescente preocupação com as mudanças climáticas impulsionou a busca por tecnologias que mitiguem os impactos causados pela emissão de gases de efeito estufa, com destaque para o dióxido de carbono (CO₂), principal responsável pelo aquecimento global devido à sua abundância e persistência na atmosfera. Neste contexto, o projeto estudou o processo de captura e armazenamento de carbono utilizando a adsorção como técnica principal, com o material Carvão-ativado como adsorvente. O objetivo foi avaliar a influência de parâmetros geométricos e operacionais de um sistema de captura de CO₂ na eficiência do processo, a variação de três parâmetros em especial: temperatura de entrada do gás (T_0), pressão inicial (P_0) e vazão de entrada do gás (U_{in}), considerando a inclusão de um sistema de recirculação para otimizar o desempenho. Por meio de simulações computacionais, foram analisados fatores como geometria do tanque, condições de contorno e tais variações operacionais, verificando-se seus impactos no tempo de enchimento, na quantidade de gás adsorvido e na temperatura média do sistema. Foram alcançados resultados positivos apontando a sensibilidade do sistema em relação a temperatura, sendo que uma variação de 4,35% na diminuição da temperatura interna do tanque impactou em um aumento de até 53,95% na quantidade de gás adsorvida. A proposta busca contribuir para o avanço das estratégias de mitigação climática, oferecendo insights sobre como a recirculação pode melhorar a eficiência de sistemas de captura de carbono.*

Introdução

Desde a Revolução Industrial, iniciada no final do século XVIII, o aumento da queima de combustíveis fósseis, como carvão, petróleo e gás natural, e a intensificação do desmatamento têm contribuído significativamente para o acúmulo de gases de efeito estufa na atmosfera, em especial o dióxido de carbono (CO₂). Este gás, além de ser o mais abundante entre os gases emitidos por atividades humanas, possui uma alta estabilidade, permanecendo na atmosfera por longos períodos e contribuindo diretamente para o agravamento do efeito estufa. Assim, esse fenômeno resulta no aquecimento global, caracterizado pelo aumento da temperatura média do planeta e resultando em impactos negativo, como: elevação do nível do mar, derretimento das calotas polares, alterações climáticas e perda de biodiversidade.

Diante da gravidade do problema, diversas estratégias têm sido propostas para mitigar a emissão e o acúmulo de CO₂, incluindo processos tecnológicos de captura e armazenamento de carbono. Entre essas abordagens, destaca-se a adsorção, um método no qual as moléculas de gás se fixam na superfície de materiais porosos. Este processo tem ganhado atenção como uma solução promissora para remover o CO₂ da atmosfera e armazená-lo de forma eficiente.

Evoluído de estudos anteriores, o presente trabalho reavaliou a aplicação de sistemas de captura de carbono por adsorção, com o objetivo de analisar o impacto da recirculação no tanque e avaliar o quanto essa estratégia pode aprimorar o desempenho do processo. Para isso, foram realizadas simulações computacionais baseadas em modelos matemáticos que descrevem os

fenômenos físicos envolvidos, permitindo a execução de uma análise de sensibilidade. Essa análise buscou identificar os parâmetros geométricos e operacionais que mais influenciam na eficiência do sistema, considerando variáveis como tempo de enchimento, quantidade de gás adsorvido e temperatura média no tanque. A inclusão de um sistema de recirculação visou mitigar os efeitos térmicos negativos do processo exotérmico de adsorção, que dificultam o sistema de atingir uma maior taxa de efetividade, aumentando a densidade de adsorção ao reduzir a temperatura do gás antes de sua reinserção no sistema. Dessa forma, foi possível compreender de forma mais clara como os diferentes parâmetros do funcionamento desse sistema afetam seu desempenho.

Material e Métodos

A metodologia deste estudo envolve a continuação e evolução de pesquisas anteriores sobre captura de carbono por adsorção cujo modelo matemático já foi utilizado e desenvolvido em Chieregatti et. al (2021), descrevendo as seguintes equações:

$$\epsilon_t \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial q}{\partial t} + \nabla: \vec{G} = 0 \quad (1)$$

$$\rho_g \nabla p + \frac{\mu}{K} \vec{G} = 0 \quad (2)$$

$$C_{eff} \frac{\partial T}{\partial t} - \epsilon_t \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla: (C_{pg} \vec{G} T) - \lambda_{eff} \nabla^2 T - \frac{\Delta H}{M_g} \rho_b \frac{\partial q}{\partial t} = 0 \quad (3)$$

$$q = \rho_{ads}: W_0: \exp \left[- \left(\frac{A}{\beta E_0} \right)^n \right] \quad (4)$$

A equação (1) representa a conservação da massa, a equação (2) refere-se à conservação da quantidade de movimento, a equação (3) trata da energia, e a equação (4) serve como modelo de fechamento para o processo de adsorção. A derivação dessas equações e a explicação detalhada das variáveis estão disponíveis na referência mencionada anteriormente.

As equações foram implementadas no software FreeFem++ (Hecht, 2012), cuja escolha foi baseada na sua capacidade de geração e manipulação de malhas através de ferramentas integradas do software, para permitir a resolução numérica. A fim de enfrentar o desafio do caráter exotérmico do processo, que limita a quantidade de gás que pode ser retida será necessário redefinir elementos e parâmetros do sistema, ajustando-os às novas condições do projeto. O primeiro passo se resume na revisão do modelo matemático utilizado anteriormente e desenvolver uma nova configuração de geometria de tanque, incluindo novas condições de contorno e uma malha que incorpore a recirculação. Segue a geometria do tanque original e a atualizada:

Figura 1 – Malha computacional Original

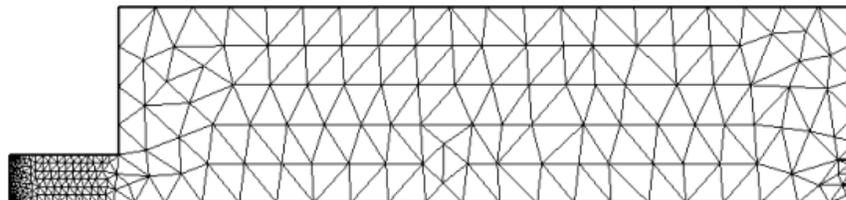
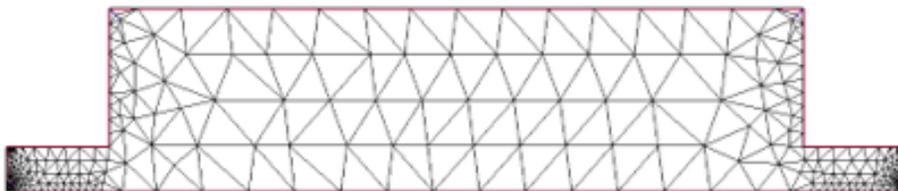


Figura 2 – Malha computacional atualizada

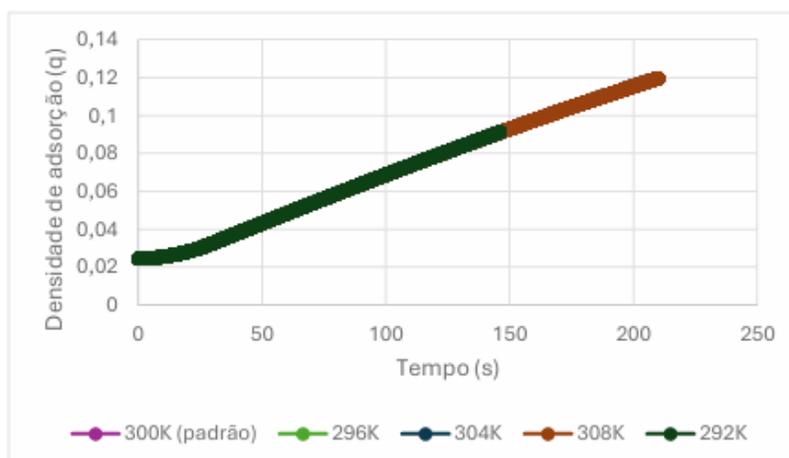


Com o modelo validado, foram conduzidas análises de sensibilidade, nas quais diferentes porcentagens de gás recirculado foram testadas com a variação de três parâmetros: temperatura de entrada do gás (T_0), pressão inicial (P_0) e vazão de entrada do gás (U_{in}). O foco é avaliar os impactos que essas variações causam na temperatura média do tanque e na densidade de adsorção ao longo do tempo, respeitando a conservação de massa.

Resultados e Discussão

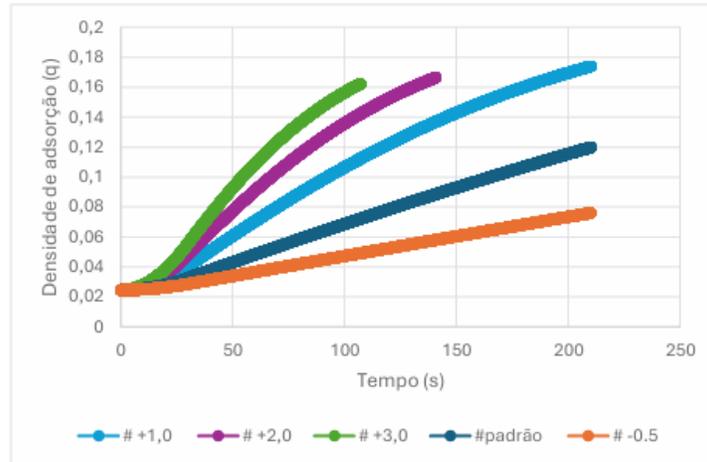
A seguir são apresentados os resultados das análises de sensibilidade, primeiramente realizadas com a temperatura de entrada do gás (T_0) nas simulações sem a recirculação para a ambientalização do software e das rotinas de simulações. O objetivo dessa etapa é avaliar quais parâmetros são mais relevantes para o fenômeno, antes de introduzir a recirculação. Como pode-se observar na Figura 3, as variações da quantidade de gás adsorvido são mínimas no sistema sem a recirculação mesmo que variando a temperatura inicial do gás inserido, concluindo-se o parâmetro pouco influente.

Figura 3 – Variação da quantidade de gás adsorvido em função do tempo para diferentes temperaturas iniciais



Na Figura 4, ainda reavaliando os parâmetros no sistema sem a recirculação, identifica-se que a pressão inicial de entrada do gás exerce grande influência na velocidade e na densidade de adsorção.

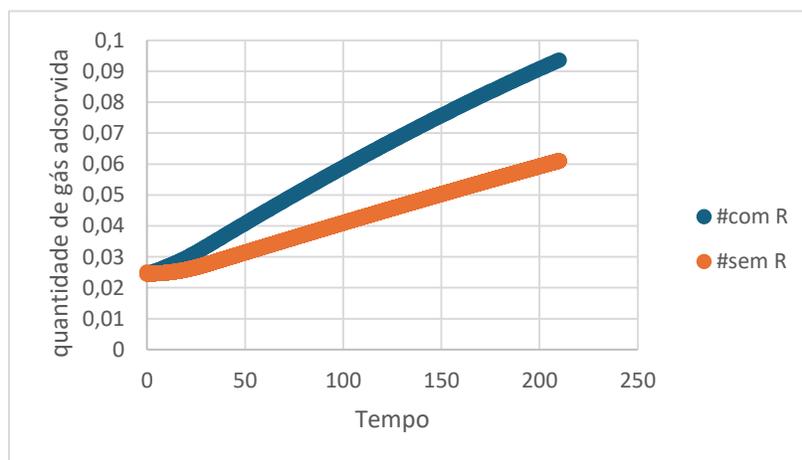
Figura 4 - Variação da quantidade de gás adsorvido em função do tempo para diferentes pressões iniciais



Tendo em vista que a $1.0e5$ Pascal foi a pressão adotada como padrão, aqui nota-se outro fenômeno, pois conforme a pressão analisada aumenta, maior é a quantidade de gás adsorvida em função do tempo. Isso ocorre devido a maior disponibilidade de moléculas de gás para interagir com a superfície do adsorvente, levando a um maior número de colisões e ocupação dos sítios de adsorção ao longo do tempo.

Após essa etapa, iniciaram-se os estudos e o desenvolvimento da malha atualizada com a inclusão da recirculação. A primeira análise foi realizada mantendo-se os mesmos parâmetros e condições padrão, garantindo uma comparação mais fiel entre as duas configurações: uma com recirculação e outra sem. Os resultados dessa análise estão apresentados na Figura 5.

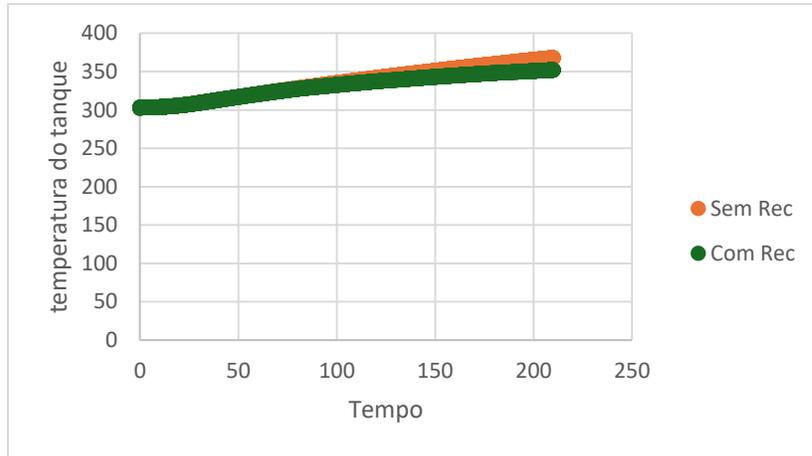
Figura 5 – Comparação da quantidade de gás adsorvido na malha com recirculação e na malha sem recirculação, em função do tempo em segundos



A partir dos dados coletados a recirculação apresentou-se mais efetiva e concordando com os resultados esperados diminuindo a temperatura interna do tanque, conforme observado na

Figura 6:

Figura 6 – Comparação da temperatura interna do tanque na malha com e sem recirculação, em função do tempo em segundos.



Dessa forma, para confirmar a eficácia da recirculação em diferentes cenários, foram realizadas outras análises de sensibilidade, nas quais outros parâmetros foram variados. O objetivo foi verificar se a superioridade do sistema com recirculação se mantém consistente sob diferentes condições operacionais. Os resultados dessas análises são observados nas Figuras 7 e 8.

Figura 7 – Variação da pressão em +7Pa e as curvas representando a quantidade de gás adsorvido na malha com e sem recirculação

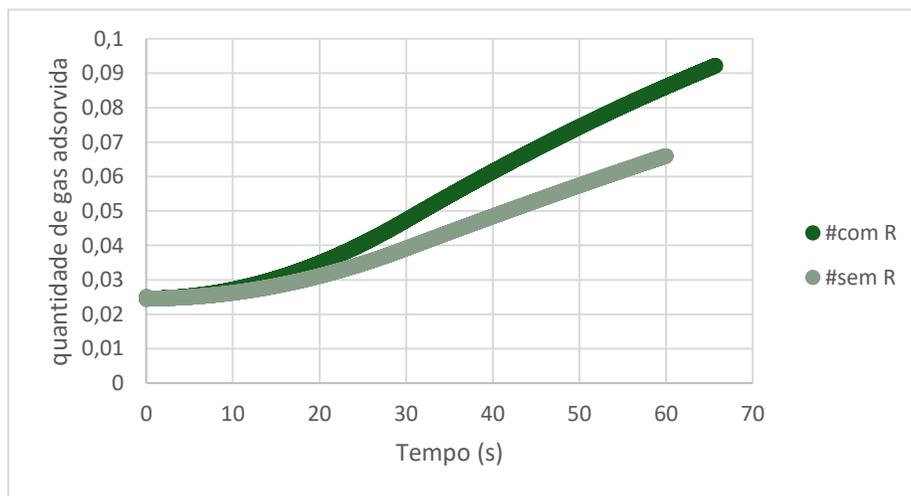
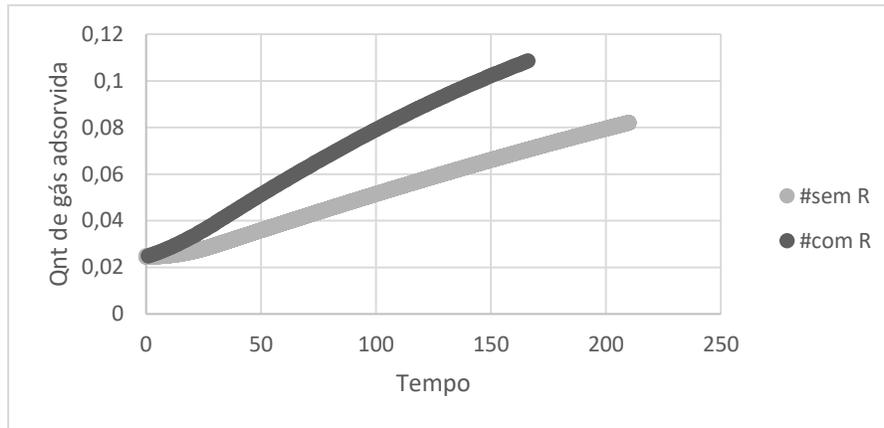


Figura 8 – Variação da vazão de entrada em +10m/s e as curvas representando a quantidade de gás adsorvido na malha com e sem recirculação



As Figuras 7 e 8 endossam o comportamento observado anteriormente, onde nota-se que a recirculação diminuiu significativamente a temperatura interna do tanque e assim aumentou a quantidade de gás adsorvida em todos os casos analisados.

Conclusões

Considerando os efeitos da recirculação, a análise de sensibilidade permitiu identificar como diferentes parâmetros impactam o desempenho do sistema. A recirculação, ao reduzir a quantidade de calor acumulado no interior do tanque, favoreceu a redução da temperatura média, aumentando a capacidade de adsorção de gás. Nesse contexto, a temperatura de entrada do gás mostrou ter influência mínima tanto na densidade de adsorção quanto no tempo necessário para a operação, confirmando sua baixa relevância no processo.

Por outro lado, parâmetros como a temperatura externa ao tanque, pressão inicial e a vazão de entrada do gás apresentaram maior influência, já que suas variações impactaram significativamente a quantidade de gás armazenado. Valores menores desses parâmetros favoreceram o resfriamento interno, otimizando a densidade de adsorção. No entanto, a redução da vazão ou da temperatura externa acarreta um aumento no tempo necessário para completar a operação, o que pode ser um fator limitante dependendo das condições operacionais desejadas.

Essas análises confirmaram que a recirculação contribui para um desempenho mais eficiente, validando observações anteriores sobre os parâmetros de maior e menor influência no processo. Assim, a recirculação se mostra uma estratégia promissora para melhorar a eficiência de sistemas de captura de carbono, desde que os parâmetros sejam ajustados para equilibrar eficiência e tempo de operação, dependendo da aplicação específica.

Referências Bibliográficas

HECHT, F. New development in FreeFem++. *Journal of Numerical Mathematics*, v. 20, n. 3 4, p. 251-265, 2012.

CHIEREGATTI, B. G.; LIMA, J. S. B.; HAYASHI, M. T.; VOLPE, E. V. Optimization loop based on adjoint sensitivity analysis for flows through porous media with adsorption. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*.