

ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DE SISTEMAS DE CAPTURA DE DIÓXIDO DE CARBONO POR ADSORÇÃO USANDO O ZIF-8

Marcela de Almeida Prado Batista Couto 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. *Devido à piora do fenômeno conhecido como Aquecimento Global, tornou-se necessário buscar formas de remover da atmosfera, o dióxido de carbono, gás que mais contribui para o efeito não só pela sua abundância, mas por seu longo tempo de permanência no planeta. Esse projeto buscou estudar o processo artificial de captura e armazenamento de CO₂ utilizando o ZIF-8 como material adsorvente. O objetivo do estudo foi verificar, através de uma análise de sensibilidade, quais parâmetros geométricos e de operação de um sistema de captura de dióxido de carbono têm maior influência na eficiência do processo. A análise de sensibilidade foi feita através de simulações computacionais onde diversos parâmetros de geometria do tanque e de operação foram variados e posteriormente, compararam-se os resultados obtidos para avaliar como eles influenciam no tempo de enchimento do sistema, na quantidade de gás adsorvido e na temperatura média do sistema.*

Introdução

Desde a Revolução Industrial tem-se aumentado exponencialmente a queima de combustíveis fósseis, como o carvão, o gás natural e derivados de petróleo, que emite gases estufa para a atmosfera. O agravamento do efeito estufa têm como consequência o aumento do fenômeno conhecido como aquecimento global e, conseqüentemente, o aumento da temperatura média do planeta.

O dióxido de carbono é o gás de efeito estufa mais abundante na atmosfera, sendo também aquele que é emitido em maior abundância em processos humanos, além de ter um tempo de permanência extremamente grande. A camada de gás formada no Efeito Estufa é essencial para a manutenção da vida na Terra, contudo, quando ela se torna muito espessa a quantidade de calor retida no planeta aumenta, aumentando sua temperatura média. Começou-se, então, uma busca de formas de retirar esse carbono do ar através de processos de captura e sequestro de dióxido de carbono a fim de mitigar esse problema.

Dentre as formas artificiais de retirar o CO₂ do ar, que será o foco da pesquisa, está o armazenamento em tanques por meio da adsorção. A adsorção é um processo espontâneo de adesão de moléculas de um fluido a uma superfície sólida, gerando um enriquecimento, ou aumento da densidade, do fluido. Os materiais considerados adsorventes são carvões ativados, diversos tipos de sílica gel, zeólitos e as argilas com pilares.

O projeto trabalhou com o ZIF-8, *Zeolitic Imidazolate Framework-8*, como material adsorvente, que demonstrou uma grande afinidade com o CO₂. Contudo ele é um material caro e com poucas informações na literatura o que torna necessário um estudo detalhado dele como material adsorvente, para validar a viabilidade da utilização dele face a outros materiais mais acessíveis e comumente utilizados como adsorventes.

O estudo foi conduzido por meio de simulações computacionais, que resolvem o sistema de equações que governam o fenômeno físico, e possibilitam a realização de uma análise de sensibilidade para determinar quais parâmetros de operação influenciam mais na densidade de adsorção do sistema, ou seja, a quantidade de gás armazenada.

Material e Métodos

O projeto tem como objetivo verificar quais parâmetros geométricos e de operação têm mais influência no desempenho do sistema de captura de dióxido de carbono, ou seja, qual ou quais parâmetros maximizam a quantidade de gás armazenado.

Para que fosse possível realizar as análises de sensibilidade foi necessário validar o modelo físico que descreve o fenômeno da adsorção. O sistema de equações que compõem o modelo físico é o seguinte (CHIEREGATTI et. al, 2021):

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

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

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

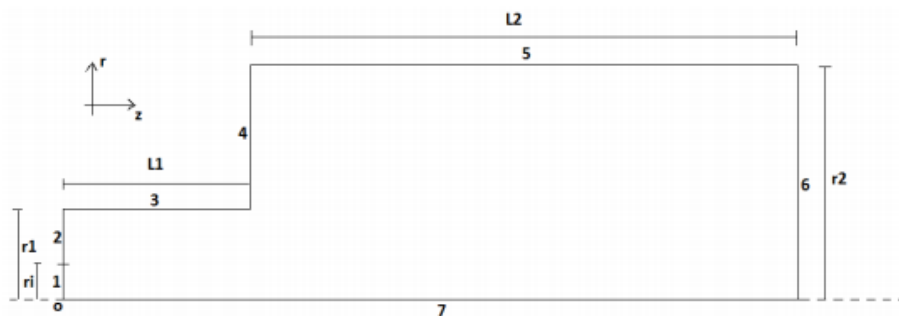
$$q = \rho_{ads} \cdot W_0 \cdot \exp \left[- \left(\frac{A}{\beta E_0} \right)^n \right] \quad (4)$$

onde a equação (1) corresponde à equação de conservação da massa, a equação (2) da conservação da quantidade de movimento, a equação (3) é a equação da energia e a equação (4) é o modelo de fechamento para a adsorção.

As equações acima foram derivadas e implementadas no software FreeFem++ (HECHT, 2012) para que elas possam ser resolvidas numericamente. As simulações CFD para a análise de sensibilidade foram rodadas seguindo a seguinte metodologia: um dos parâmetros de interesse foi variado e todos os demais parâmetros foram fixados, os resultados foram coletados e comparados com as demais simulações.

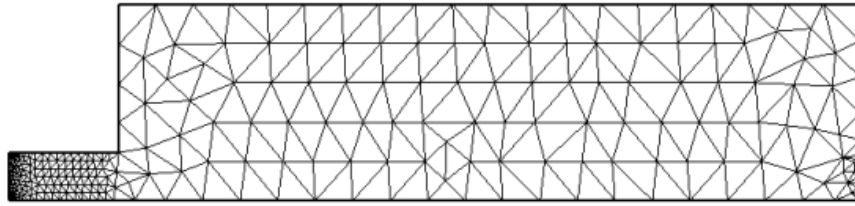
Foi feita uma análise de sensibilidade para o problema proposto. Foram escolhidos quatro parâmetros para avaliação: temperatura de entrada do gás (T_0), temperatura externa do tanque (T_{ext}), vazão de entrada de gás (U_{in}) e coeficiente de transferência de calor por convecção (hh). Em cada caso, foram realizadas cinco simulações e avaliadas, em cada uma delas, a quantidade de gás armazenado, representada pela densidade de adsorção (q), que corresponde à razão entre o volume de gás armazenado e o volume do tanque. Também foi avaliado o comportamento de outras funções como a temperatura média (T_m) e a temperatura máxima ($T_{máx}$) atingida no interior do tanque e a pressão (P), além do tempo total de enchimento. A geometria do tanque empregada nesse estudo é axisimétrica, conforme visto na Figura 1:

Figura 1 – Dimensões do tanque Fonte: Chieregatti et. al (2021)



A seção 1 é a seção de entrada, as seções 2, 3, 4, 5 e 6 são as paredes do tanque e a seção 7 é uma linha de simetria. As dimensões do tanque são $r_i = 3,175 \text{ mm}$, $r_1 = 13 \text{ mm}$, $r_2 = 53,3 \text{ mm}$, $L_1 = 30 \text{ mm}$ e $L_2 = 202 \text{ mm}$. Com essa geometria, foi gerada uma malha computacional para as simulações, que pode ser vista na Figura 2:

Figura 2 – Malha computacional



Com a malha exibida acima, foram realizadas as simulações computacionais para a análise de sensibilidade.

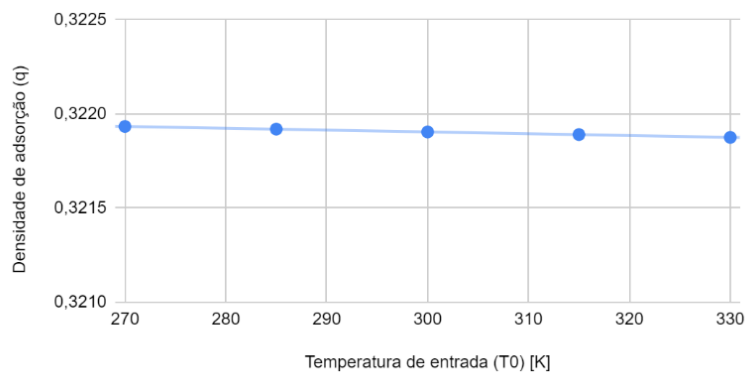
Resultados e Discussão

Aqui serão apresentados os resultados das simulações que compõe a análise de sensibilidade. Foram avaliados 4 parâmetros: temperatura de entrada do gás (T_0), temperatura externa do tanque (T_{ext}), vazão de entrada do gás (U_{in}) e coeficiente de transferência de calor por convecção (hh).

O primeiro parâmetro estudado foi a Temperatura de entrada do gás (T_0). Como pode-se observar na Figura 3, a quantidade de gás adsorvido diminui com o aumento da temperatura, contudo isso ocorre de forma muito ínfima tornando-o um parâmetro pouco influente no processo.

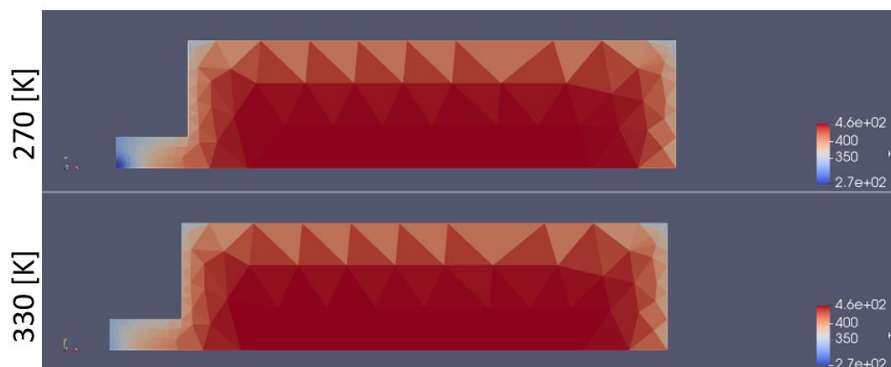
(1 espaço)

Figura 3 – Variação da densidade de adsorção em função da temperatura de entrada



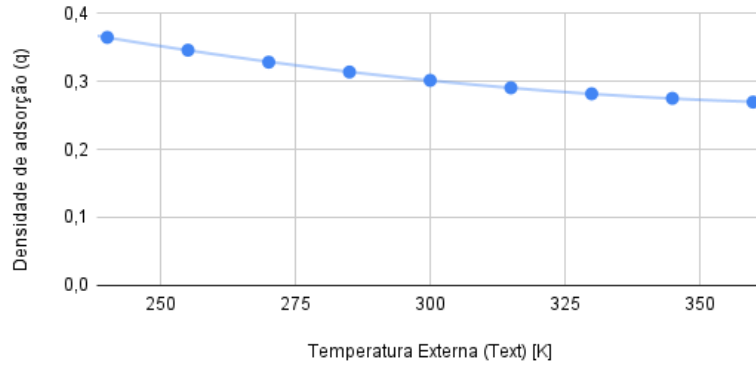
Na Figura 4 também pode-se notar que a temperatura interna do tanque não é tão diferente para diferentes temperaturas de entrada, sendo a principal diferença apenas na seção de entrada.

Figura 4 – Variação na temperatura interna do tanque para diferentes temperaturas de entrada



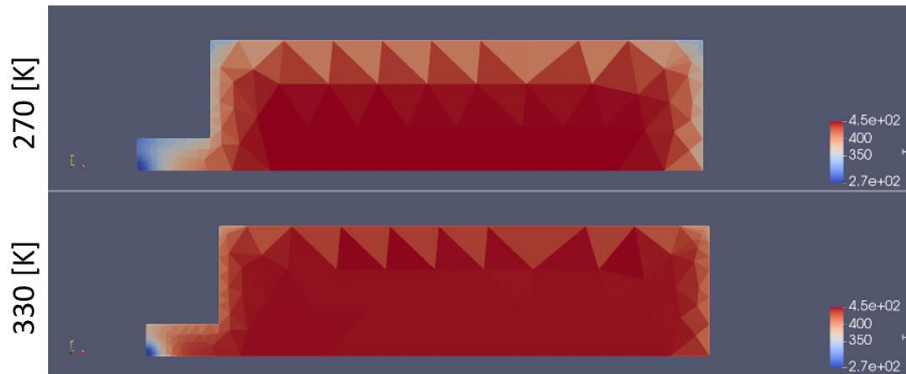
O segundo parâmetro estudado foi a Temperatura externa ao tanque (T_{ext}). Na Figura 5 pode-se observar que a quantidade de gás armazenada diminui com o aumento da temperatura externa ao tanque.

Figura 5 – Variação da densidade de adsorção em função da temperatura externa ao tanque



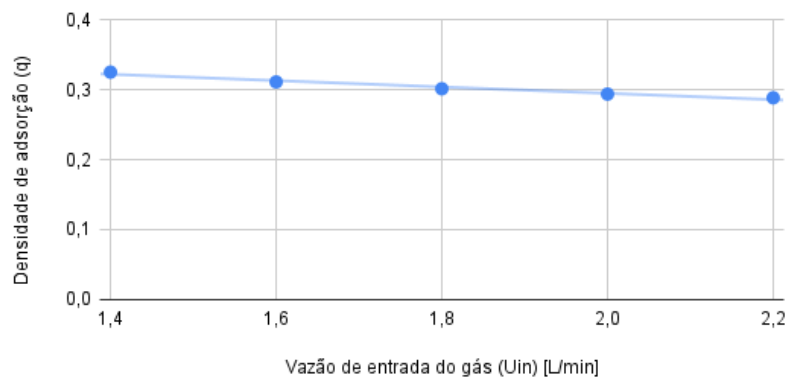
Esse comportamento pode ser justificado pois com o aumento da temperatura externa, a diferença de temperatura entre o tanque e o meio diminui o que, conseqüentemente, diminui a transferência de calor para o meio externo. Com isso, a temperatura interna do tanque aumenta o que reduz a densidade de adsorção, como pode-se observar na Figura 6.

Figura 6 - Variação na temperatura interna do tanque para diferentes temperaturas externas



O terceiro parâmetro estudado foi a Vazão de entrada do gás (U_{in}). Pode-se observar na Figura 7 que a quantidade de gás adsorvido diminui com o aumento da vazão.

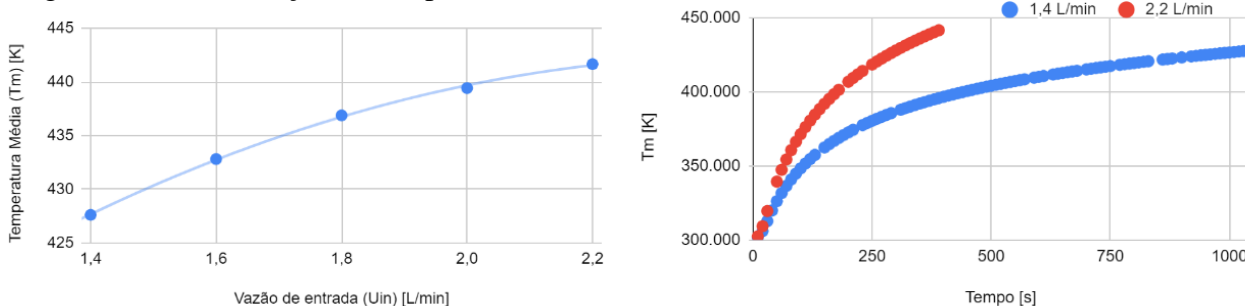
Figura 7 – Variação da densidade de adsorção em função da vazão de entrada



Para entender esse comportamento deve-se analisar a variação da temperatura interna do tanque com o aumento da vazão. A Figura 8 mostra que com o aumento da vazão ocorre também um aumento na temperatura média no interior do tanque. Como consequência, há uma redução da quantidade de gás adsorvido, uma vez que o processo é exotérmico, e a capacidade de armazenamento do adsorvente decai com o aumento da temperatura.

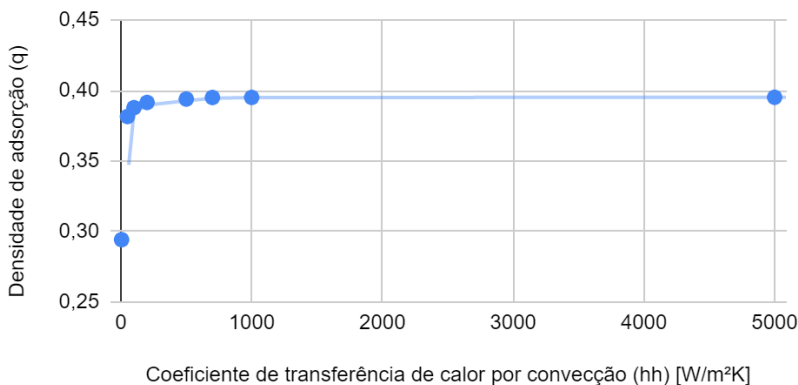
A Figura 9 mostra um importante *tradeoff* para esse problema. Nela observa-se que para uma vazão maior (curva em vermelho) o aumento da temperatura acontece mais rapidamente. Enquanto isso, para uma vazão menor (curva em azul) esse aumento é mais lento, possibilitando uma maior quantidade de gás armazenado. Contudo esse tempo maior para realizar o processo, dependendo da aplicação, pode ser indesejado.

Figuras 8 e 9 – Variação da temperatura média do tanque em função da vazão de entrada do gás



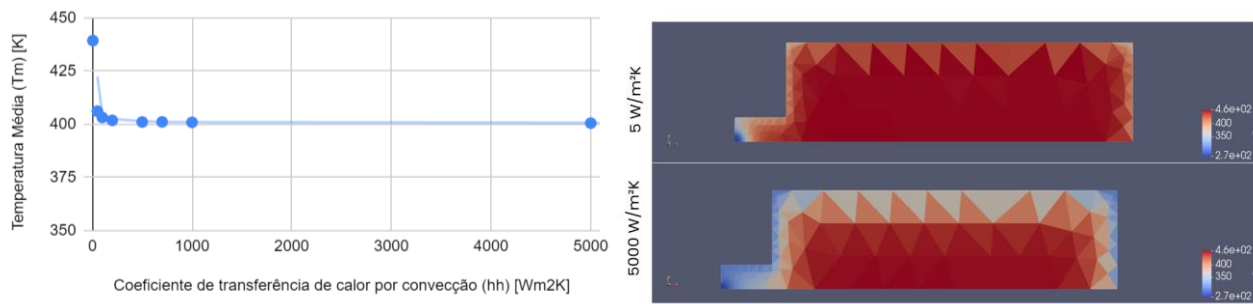
O quarto parâmetro estudado foi o Coeficiente de transferência de calor por convecção (hh). Como pode-se observar na Figura 10, a quantidade de gás adsorvido aumenta com o aumento do coeficiente de transferência de calor.

Figura 10 – Variação da densidade de adsorção em função do coeficiente de transferência de calor



A Figura 11 e 12 endossam o comportamento observado acima, onde pode-se notar uma diminuição na temperatura média no interior do tanque com o aumento do coeficiente de transferência de calor por convecção.

Figura 11 e 12 – Variação da temperatura média do tanque em função do coeficiente de transferência de calor



Conclusões

A análise de sensibilidade identificou quais parâmetros são mais relevantes para o processo. O primeiro parâmetro, a temperatura de entrada do gás tem pouca influência no processo, tanto na densidade de adsorção quanto no tempo para realizar a operação, podendo ser considerado desprezível, posto que a densidade de adsorção praticamente não se alterou com a variação da temperatura de entrada do gás.

Já a temperatura externa ao tanque e a vazão de entrada do gás influenciam mais o processo pois a sua variação impacta de forma significativa a quantidade de gás armazenado. Em relação a esses parâmetros, quanto menores, melhor tendo em vista que nessas condições eles garantem uma menor temperatura média no interior do tanque. Contudo é importante ressaltar que valores baixos para esses parâmetros acarreta aumento do tempo necessário para completar a operação o que pode ser indesejado de acordo com a aplicação.

Por fim, o coeficiente de transferência de calor por convecção otimiza o processo quando está em seus valores mais altos. Contudo esse crescimento possui um limite superior e, para valores acima de $1000 \text{ W/m}^2\text{K}$ não há alterações significativas na quantidade de gás armazenado.

Referências Bibliográficas

- Chierigatti, B. G., Brasil Lima, J. S., Volpe, E. V., & Hayashi, M. T. (2021). Optimization loop based on Adjoint Sensitivity Analysis for Flows through Porous Media with Adsorption. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*.
- Hecht, F. (2012). New Development in FreeFem++. *Journal of Numerical Mathematics*