

# ANÁLISE EXERGÉTICA DO PROCESSO DE ARMAZENAMENTO DE DIÓXIDO DE CARBONO POR ADSORÇÃO

André Pinho da Silva Sampaio <sup>1</sup>; Bruno Galelli Chieregatti <sup>2</sup>

<sup>1</sup> Aluno de Iniciação Científica do Instituto Mauá de Tecnologia (IMT);

<sup>2</sup> Professor do Instituto Mauá de Tecnologia (IMT).

**Resumo** *A intensificação do efeito estufa existe desde o início do século XX, sendo este fenômeno estudado desde a década de 50, entendida como a principal causadora do aquecimento global. O acúmulo de gases na região anterior à camada de ozônio, tais como CO<sub>2</sub> e metano, gera excesso de calor em determinadas regiões terrestres, causando não só um aumento de temperaturas médias gerais, como também um desequilíbrio ambiental, gerando invernos e verões desequilibrados. De modo a possibilitar uma redução desses componentes na atmosfera, são estudadas hipóteses voltadas ao armazenamento e captura de substâncias intensificadoras desse efeito. Na natureza, ambientes como cavernas e grutas armazenam naturalmente dióxido de carbono, observado pela presença de estalagmites nesses ambientes. Artificialmente, o CO<sub>2</sub> é depositado em sistemas fechados e monitorados com adsorventes que realizam o processo de captura do gás. A análise exergética é dada como o processo que busca observar o maior trabalho teórico possível de ser obtido com o sistema de modo a potencializar resultados e permitir uma maior visualização de perdas. O objetivo desse projeto é realizar uma análise desses casos, investigando erros e perdas através do modelamento de equações de escoamento em um tanque fechado, além de equações exergéticas para estudo.*

## 1. Introdução

O dióxido de carbono, por ser o gás de efeito estufa mais abundante na atmosfera, é o mais emitido por humanos. O acúmulo desse gás ocorre desde a Revolução Industrial, quando grandes indústrias, através da repetida queima de carvão, emitiram esse gás em altíssima quantidade. A fim de reduzir os impactos causados por esse problema, foram incentivadas soluções que pudessem naturalmente capturar carbono, como o plantio de árvores, o estudo de algas marinhas e outros sistemas.

Uma das soluções propostas artificialmente se baseia em cavernas - que realizam esse armazenamento de CO<sub>2</sub> naturalmente - usando-se de, nesse caso, tanques. Dentro de cada tanque, são empregados materiais adsorventes que realizam a captura das moléculas de dióxido de carbono, tais como biocarvão ativado e ZIF-8. No caso dessa pesquisa, foi empregado o biocarvão ativado, que possui uma afinidade inferior àquela apresentada pelo ZIF-8, apesar de ser mais barato.

Nos softwares utilizados, em especial o *Crimson Editor*, são escritas variáveis, tais como temperatura do gás, temperatura interna do tanque, vazão de entrada do gás, coeficiente convectivo da parede do tanque, pressão de entrada do gás e pressão máxima suportada pelo tanque. Essas variáveis, integradas com outras variáveis globais do sistema, geram equações de modelamento que, dentro do *Paraview*, geram um modelo simulando o enchimento de gás no tanque e suas características.

A análise das equações exergéticas é feita após os procedimentos, empregadas de diferentes maneiras a depender dos resultados.

Tendo em vista os impactos ambientais causados por gases do efeito estufa como o dióxido de carbono, são necessárias medidas preventivas para corresponder aos impactos causados.

De modo a se aproximar de um ambiente como o da caverna, o tanque representaria o local onde o CO<sub>2</sub> capturado seria armazenado. No contexto do projeto, o tanque é revestido

com biocarvão ativado, funcionando como adsorvente. As moléculas de gás carbonico ficam retidas no carvão, representando um modelo similar.

Desse modo, o objetivo do projeto é estudar métodos que tornam esse processo de adsorção mais eficiente, estudando erros e analisando condições que potencializam a captura do CO<sub>2</sub> dentre as variáveis obtidas no sistema, sejam elas temperatura do gás, coeficiente convectivo do tanque, pressão do gás na entrada do tanque, etc... empregando conceitos estudados e pesquisados em relação à exergia do sistema. A realização desse estudo, ao investigar condições favoráveis à captura do dióxido de carbono, permite mais espaço para estudos e pesquisas nessa área com intuito semelhante, podendo, em caso de concretização de um projeto físico, atuar como alternativa para o problema ambiental do acúmulo de CO<sub>2</sub> na atmosfera.

## 2. Material e Métodos

Os softwares *FreeFem++*, *CrimsonEditor* e *Paraview* são empregados de modo a executar um script com equações e dados sobre variáveis do tanque, permitir a modificação de algumas dessas variáveis e permitir a visualização de resultados com análise do tanque, respectivamente.

O software *FreeFem++* funciona como um solver, sendo que o *CrimsonEditor* é o editor de código, onde as variáveis e equações são escritas e executadas para posterior processamento do *FreeFem++*. O *Paraview* utiliza os resultados das simulações para gerar as imagens que indicam os resultados para cada alteração de variável, permitindo alterações visuais.

As equações que compõem o modelo são:

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

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

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

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

A equação (1) e (2) são equações de conservação no sistema, sendo a primeira representando a conservação da massa e a segunda representando a conservação da quantidade de movimento das moléculas no sistema. A equação (3) representa a energia empregada no sistema e a última apresenta o modelo de fechamento de adsorção, considerando as condições do modelo.

Todas as equações foram aplicadas no Freefem++, somadas às variáveis que integram o sistema. De modo geral, essas variáveis eram constantemente alteradas, geralmente uma por vez, observando o tanque em formato de corte (em seu interior) e alterações existentes dentro dele. Foram feitas análises com mudanças de valores padronizadas e os cortes do tanque eram comparados entre si para cada parâmetro desejado.

Através dessa análise, observam-se variáveis que impactam mais ou menos a adsorção dentro do tanque, facilitando também a análise exergética. Algumas das equações aplicadas na análise de exergia, também empregadas no software Freefem++, são dadas por:

$$\frac{dB}{dt} = \frac{dU}{dt} + p_0 \cdot \frac{dV}{dt} - T \cdot \frac{dS}{dt} - (h_0 - T_0 \cdot s_0) \cdot \frac{dm}{dt} \quad (5)$$

Essa equação modela a taxa de variação de exergia no tempo, desconsiderando influências possíveis geradas pelas energias cinética e potencial. A partir de equações de balanços de massa, 1ª lei e 2ª lei da termodinâmica, chegamos na seguinte equação:

$$\frac{dB}{dt} = m_e h_e - |Q_{ext}| - T_0 \cdot \left( m_e s_e - \frac{|Q_{ext}|}{T_r} + S_{ger} \right) - (h_0 - T_0 \cdot s_0) \cdot m_e \Leftrightarrow \frac{dB}{dt} = m_e [(h_e - h_0) - T_0 \cdot (s_e - s_0)] - |Q_{ext}| - T_0 \cdot \left( 1 - \frac{T_0}{T_r} \right) + T_0 \cdot S_{ger} \quad (6)$$

A equação acima representa a exergia de entrada do tanque. A partir dela e de outras considerações, podemos calcular a exergia destruída no processo, dada pela seguinte equação:

$$B_{destr} = m_e \cdot T_0 \cdot R \cdot \ln \left( \frac{p_e}{p_0} \right) - \frac{d}{dt} \cdot [m_s \cdot (C_{ps} + q \cdot C_{vg}) \left( T - T_0 \cdot \left( 1 + \ln \left( \frac{T}{T_0} \right) \right) \right) + m_{gv} \cdot \left( C_{pg} \cdot \left( T - T_0 \cdot \left( 1 + \ln \left( \frac{T}{T_0} \right) \right) \right) + R \cdot T_0 \cdot \ln \left( \frac{p}{p_0} \right) \right)] \quad (7)$$

Sendo que os valores p, T e q (pressão, temperatura e densidade de adsorção) foram obtidos nas análises numéricas.

### 3. Resultados e Discussão

A partir de aplicações com o uso do script gerado pelo *Freefem++*, foram analisados parâmetros para a observação do fenômeno da adsorção e determinação características que o influenciam. Os parâmetros observados foram o coeficiente convectivo da parede do tanque, denotado pelo símbolo h, e a temperatura de entrada do gás T0. Para cada análise, foram estudados vários valores dentro de uma faixa considerada razoável, que não fosse gerar resultados pouco expressivos para a análise.

Além disso, para cada análise foram estudados, dentro de cada tanque separadamente, os parâmetros temperatura (T), pressão (p), quantidade de gás (q) e a massa específica do gás, dada pela letra rho. Os estudos se limitam ao T e q, por representarem maior relevância tendo em vista o objetivo do projeto.

Abaixo foram geradas tabelas com dados do projeto, para o h e T0 respectivamente:

	h=5		
	T_média	T_max	q_médio
t=1s	299.978K	300.103K	0.258663
t=60s	300.422K	304.338K	0.258677

	h=250		
	T_média	T_max	q_médio
t=1s	300.033K	300.248K	0.258659
t=60s	300.375K	303.156K	0.258748

	T0=250K		
	T_média	T_max	q_médio
t=1s	300.033K	300.248K	0.258659
t=60s	300.374K	302.963K	0.258748

Figura 1: Tabelas para T0 e h

Os dados coletados incluem os dois extremos analisados para o coeficiente convectivo, além de um valor intermediário para a temperatura de entrada do gás no tanque, T0=250K. Todas as análises foram feitas durante o tempo de 60s.

Para cada tabela foram geradas imagens exibindo o impacto que cada parâmetro causa dentro do tanque:

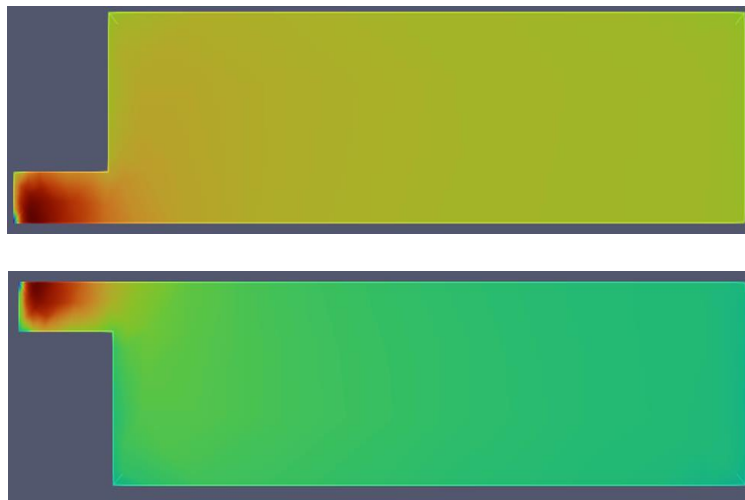


Figura 2: Corte do tanque para o h os dados coletados

Acima, comparação de temperatura T após 60 segundos entre T0 = 240K e T0 = 260K respectivamente. Percebe-se a extensão da mancha vermelha no bico do tanque ligeiramente aumentada no primeiro caso.

Para o parâmetro q, foi observada pouca mudança no tanque e no valor obtido.

Abaixo, comparação de temperatura T após 60 segundos entre h = 5W/m2K e h = 250W/m2K respectivamente. Percebe-se a extensão da mancha vermelha no bico do tanque ainda mais aumentada no primeiro caso, além de mudanças significativas na temperatura média do sistema.





Figura 3: Corte do tanque para o T dos dados coletados

Posteriormente, outra análise foi feita fixando os valores de temperatura interna do tanque ( $T_0$ , em K), temperatura inicial de entrada do gás ( $T_{init}$  em K), pressão inicial dentro do tanque ( $P_{init}$  em kPa) e temperatura externa ( $T_{ext}$  em K).

Esses valores foram fixados em 298K, 300K, 500kPa e 300K respectivamente. Esses são valores próximos de temperaturas ambiente, de modo a se obter uma análise mais condizente com condições de temperatura cotidianas.

A análise em questão procura mostrar a influência da vazão na pressão interna do tanque. Para isso, foi fixado um valor máximo de 3,5Gpa de pressão interna no tanque, de modo que, quando esse valor fosse atingindo, a simulação pararia. Os valores de vazão podem ser observados abaixo:

$u_{in}$ (kg/s)	Tempo (s)	Pressão Média (Kpa)	Temperatura Média (K)	Temperatura Máxima(K)	$q$ Médio ( $m^2/K$ )	V para V (relação volumes)
0,5	14950	3,50E+11	341.38	389.318	0.817049	166.817
1	6400	3,50E+11	368.231	424.481	0.770271	156.928
2	2700	348.685.000.000	391.229	431.658	0.725396	147.716
2,5	2050	3,47E+11	396.754	431.419	0.713001	145.161
5	900	340.899.000.000	408.09	429.726	0.683950	139.173

Figura 4: Tabela comparando vazão e outros parâmetros

De modo a facilitar análises visuais, foram feitos gráficos com alguns dos parâmetros coletados:

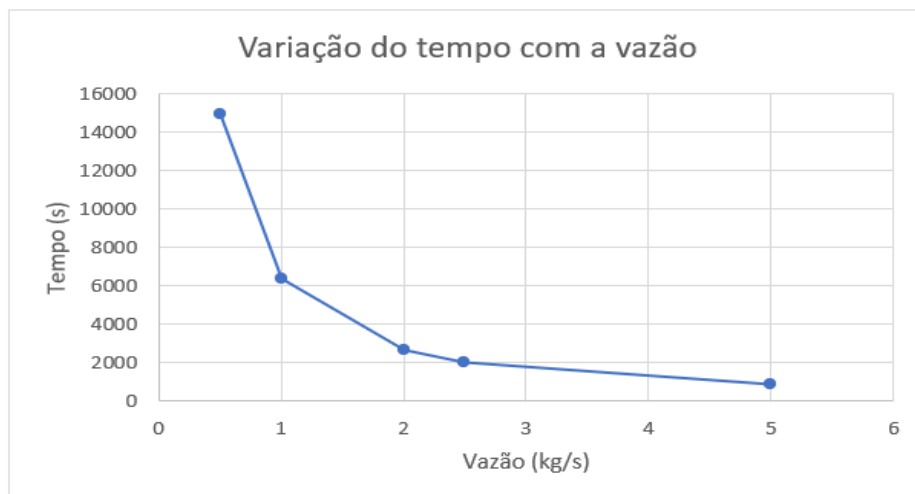


Figura 5: Gráfico de vazão x tempo

O gráfico mostra a tendência de mudança de vazão com a passagem do tempo, assumindo uma configuração próxima de um gráfico logarítmico negativo, ou seja, à medida que a vazão tende a valores próximos de zero, o tempo necessário para que a pressão máxima seja alcançada tende a ser infinito.

A maioria dos gráficos analisados acompanha matematicamente os valores de vazão apresentados, ou funciona de maneira inversa.

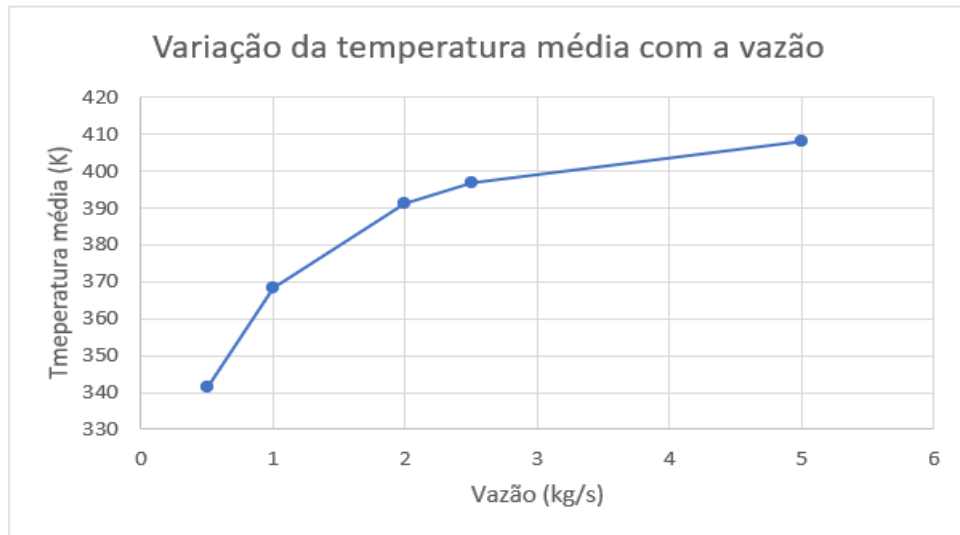


Figura 6: Gráfico de vazão x temperatura média

A partir do gráfico acima, nota-se a tendência já observada anteriormente, seguindo um aumento próximo da escala logarítmica ou exponencial dentro do tanque, ou seja, a partir de um certo valor de vazão, a temperatura se torna mais constante e estável.

A absorção média funciona de maneira contrária, ou seja, mais gás é absorvido se a vazão entrar em menor quantidade e/ou em menores taxas.

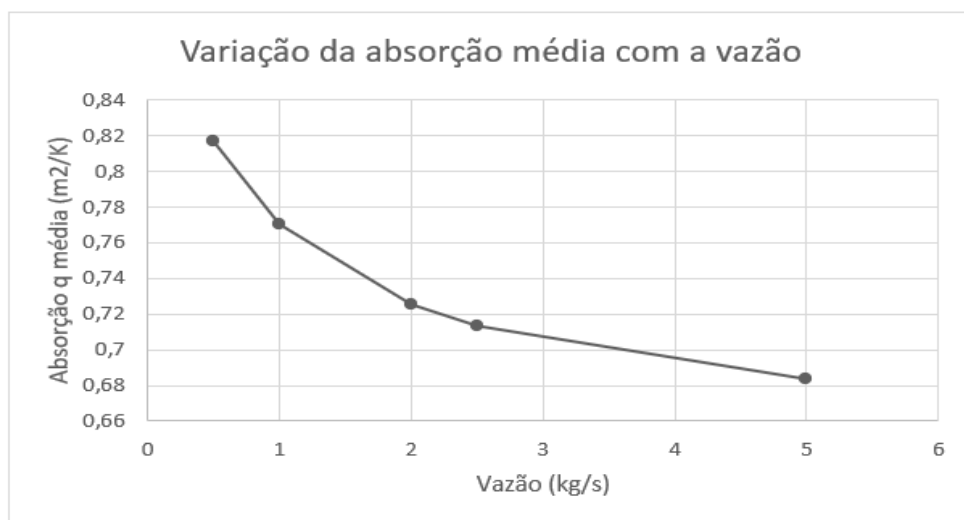


Figura 7: Gráfico de vazão x absorção média

A tabela como um todo possui valores coerentes, como os apresentados acima, mas conta com o valor de temperatura máxima, que é bastante instável. Acredita-se que esse valor possua essa instabilidade devido a mudanças de temperatura próximo do bocal do tanque ou possivelmente, por se aproximar da estabilidade mais rápido, logo após a análise com 1 kg/s de vazão, sendo, portanto, uma característica sujeita a oscilações.

Abaixo, é possível notar essa pequena instabilidade:

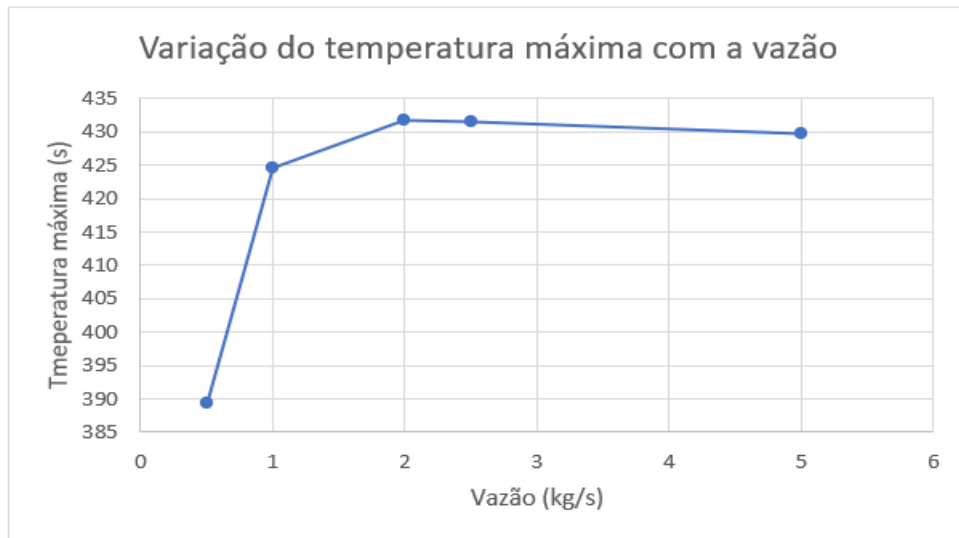


Figura 8: Gráfico de vazão x temperatura máxima

#### 4. Conclusões

De modo geral, existe impacto não só nos parâmetros  $q$ , temperatura máxima e temperatura média, como também são geradas alterações na pressão global do tanque, sendo mais relevantes para a análise os três parâmetros iniciais.

No teste para o primeiro valor do coeficiente convectivo, os valores iniciais encontram-se diferentes dos outros analisados, indicando que há influência imediata na troca de calor entre o tanque e o meio externo.

Comparando cada uma das tabelas, observa-se que o aumento do valor do coeficiente convectivo aumenta a quantidade de gás, mas diminui a temperatura média e a temperatura máxima dentro do tanque. Além disso, os valores do  $q$  possuem uma mudança muito pequena para o tempo analisado, sendo necessário uma mudança global nos parâmetros ou um aumento do tempo de análise.

Quando imposta uma pressão limite, a vazão de entrada do gás colabora logaritmicamente para o aumento da pressão geral, seguindo aumentos do mesmo tipo também no tempo, na temperatura média.

## 5. Referências Bibliográficas

VAN WYLEN, G.J, et al (2006). Fundamentos da Termodinâmica, tradução da 6ª edição americana, Blucher.

TORÍO, H.; ANGELOTTI, A.; SCHMIDT, D. Exergy analysis of renewable energybased climatisation systems for buildings: A critical view. Energy and Buildings. V. 41, 2009, p. 248-271.

CHIEREGATTI, BRUNO. (2020) Análise Exergética de processos de conversão de Energia

SILVA, S. R.;\* Niquini, G. R.; Turetta, L. F; Costa, A. O. S Rev. Virtual Quim., 2018,

LOURENÇO, ATÍLIO BARBOSA; Uma nova abordagem termoeconômica para o tratamento de equipamentos dissipativos, (2012),