

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

André Pinho da Silva Sampaio ¹; Bruno Galelli Chieregatti ²

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

² 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 CO₂ 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 CO₂ 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 CO₂ 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 CO₂ 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 CO₂ 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 CO₂ 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.

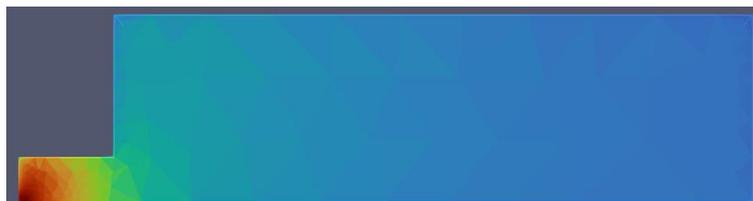




Figura 3: Corte do tanque para o T dos dados coletados

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:

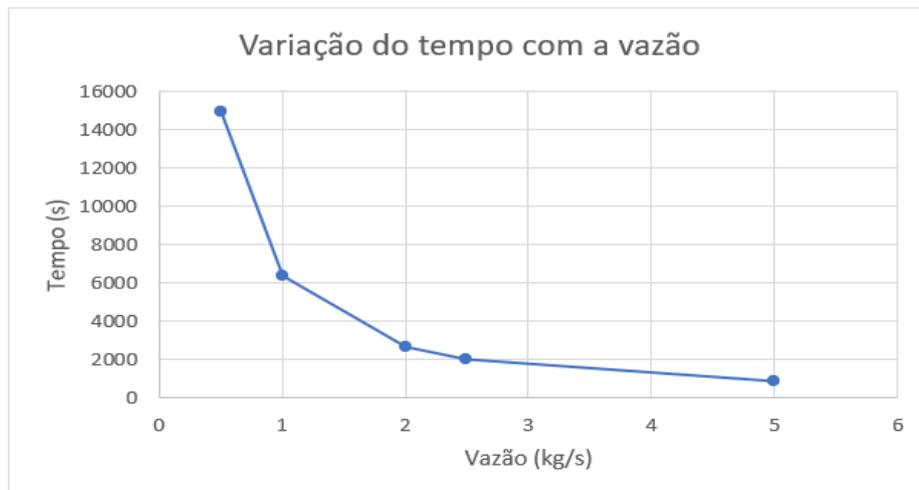


Figura 5: Gráfico de vazão x tempo

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.

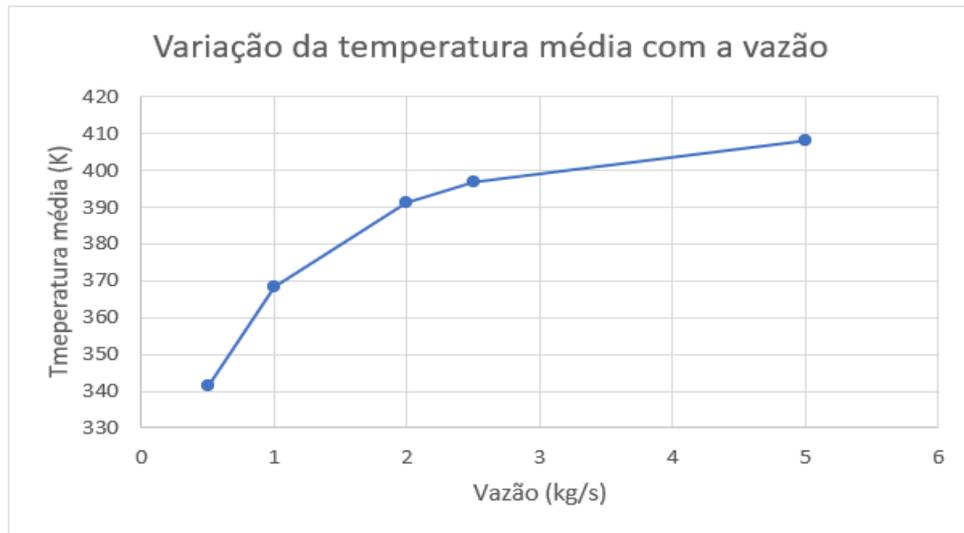


Figura 6: Gráfico de vazão x temperatura média

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.

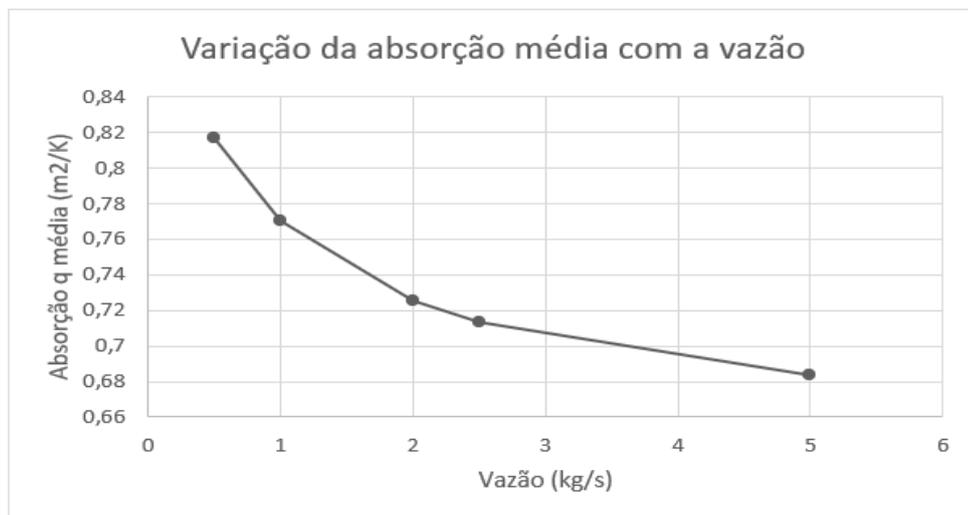


Figura 7: Gráfico de vazão x absorção média

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:

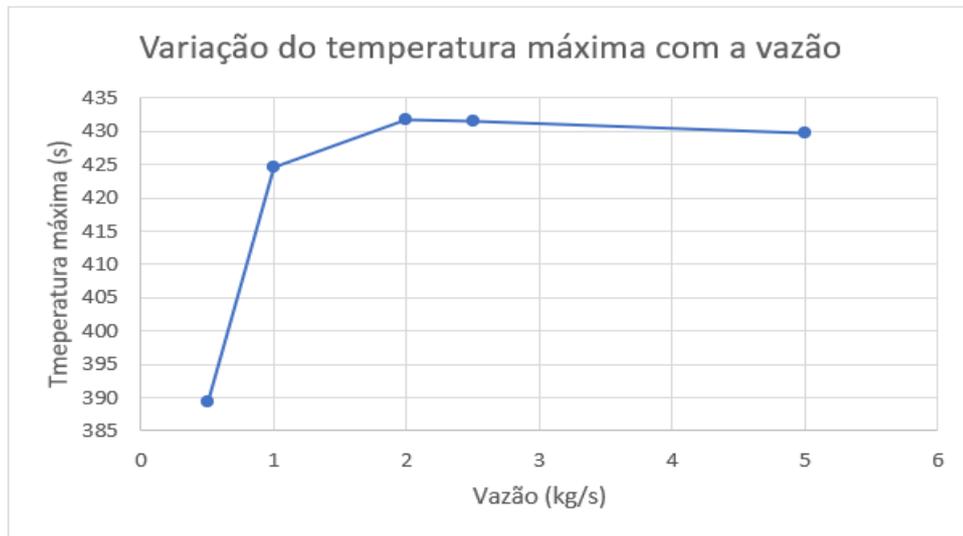


Figura 8: Gráfico de vazão x temperatura máxima

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),