



*Universidade Federal da Paraíba*  
*Centro de Tecnologia*  
*Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica*  
*- Mestrado - Doutorado*

# **ANÁLISE NUMÉRICA DE UM LEITO POROSO APLICADO EM UM SISTEMA DE REFRIGERAÇÃO POR ADSORÇÃO**

**por**

**Gustavo Roque Martorelli**

Dissertação de Mestrado apresentada à Universidade Federal da  
Paraíba para obtenção do grau de Mestre.

**GUSTAVO R. MARTORELLI**

**ANÁLISE NUMÉRICA DE UM LEITO POROSO APLICADO EM UM  
SISTEMA DE REFRIGERAÇÃO POR ADSORÇÃO.**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Departamento de Engenharia Mecânica, como parte das exigências para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal da Paraíba – UFPB – Campus I.

**Área de concentração:** Termofluidos

**Orientador:** Professor Dr. Gilberto Augusto A. Moreira

JOÃO PESSOA

2018

M387a Martorelli, Gustavo Roque.

Análise numérica de um leito poroso aplicado em um sistema de refrigeração por adsorção / Gustavo Roque Martorelli. - João Pessoa, 2018.

74 f. : il.

Orientação: Gilberto Augusto Amado Moreira.  
Dissertação (Mestrado) - UFPB/CT.

1. Engenharia Mecânica. 2. Dinâmica dos fluidos computacional. 3. Fluxos em meios porosos. 4. Adsorção. I. Moreira, Gilberto Augusto Amado. II. Título.

UFPB/BC

**ANÁLISE NUMÉRICA DE UM LEITO POROSO  
APLICADO EM UM SISTEMA DE REFRIGERAÇÃO POR  
ADSORÇÃO**

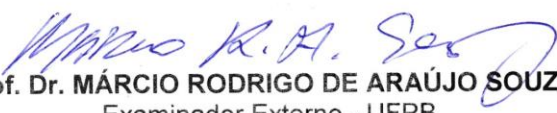
por

**GUSTAVO ROQUE MARTORELLI**

*Dissertação aprovada em 31 de julho de 2018*

  
Prof. Dr. GILBERTO AUGUSTO AMADO MOREIRA  
Orientador – UFPB

  
Prof. Dr. JOSÉ MAURÍCIO ALVES DE MATOS GURGEL  
Examinador Interno - UFPB

  
Prof. Dr. MÁRCIO RODRIGO DE ARAÚJO SOUZA  
Examinador Externo - UFPB

*Dedico este trabalho aos meus pais, Eduardo dos Santos  
Martorelli e Jacirami Roque Martorelli.*

## **AGRADECIMENTOS**

Primeiramente, agradeço a Deus por ter me protegido e me guiado ao longo deste período e por toda minha vida.

Agradeço a minha família, que muito me apoiou durante o período de realização deste Mestrado. Em especial a meus pais, Eduardo e Jacirami, que sempre me deram todo o suporte e os devidos conselhos para que eu nunca parasse de estudar e seguir meus sonhos.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Gilberto Augusto Amado Moreira, por toda a paciência, compreensão e orientação.

A minha namorada Tâmara e a sua família, que também me apoiaram nestes dois anos.

Agradeço ao Prof. Dr. José Josimar Soares, pelo acolhimento no Laboratório quando ainda estava finalizando o seu doutorado, pelo apoio e pelos conhecimentos passados durante a realização deste Mestrado.

Agradeço aos meus amigos e companheiros de laboratório, Diógenes, Priscila, Amanda e Mickaela, por toda a ajuda na realização deste Mestrado e pelos momentos de descontração e amizade que tanto ajudam a ter dias melhores.

Por fim agradeço à CAPES pelo auxílio financeiro concedido durante o Mestrado.

## RESUMO

Esta dissertação tem como objetivo observar através de simulação utilizando ferramentas de dinâmica dos fluidos computacional, com o auxílio do software Ansys CFX, o comportamento da dinâmica de adsorção aplicada a um leito adsorativo que trabalha com o par carvão ativado e etanol. As simulações foram preparadas no LABRADS/CEAR/UFPB, utilizando o software gerenciador Ansys Workbench, no qual as geometrias foram desenhadas no componente Design Modeler e a malha foi criada no Meshing. Em seguida, foi inserido no software CFX-Pre todas as condições de contorno de acordo com a referência usada para verificação. Concluída esta etapa, ainda no CFX-Pre, foram aditados termos fontes a serem considerados nas equações da continuidade e da conservação de energia. Tais termos foram construídos através de expressões que consideravam funções geradas a partir de pontos extraídos de curvas representativas da taxa de adsorção para os domínios estudados. Outro ponto que merece ser destacado em tal estudo é que foram consideradas três geometrias diferentes (Domínios I, II e III) com variações na altura e na largura, mantendo o mesmo volume, sendo para os três casos, aplicadas as mesmas condições de contorno. Como resultados, foram encontrados para os domínios I, II e III, quedas de pressão que demonstraram que a medida em que se tem domínios mais altos e estreitos obtém-se um maior gradiente de pressão, assim como se verifica no referencial. No que tange aos gradientes de temperaturas relativos aos mesmos domínios, foi encontrada uma maior variação de temperaturas, para os domínios mais largos e baixos. Os contornos representativos do gradiente de pressão e da difusão térmica, através das partículas adsorventes, que foram obtidos para os diferentes domínios, apresentaram uma aproximação compatível, em resultados e em comportamentos, com os respectivos dados usados para verificação.

Palavras-chave: Dinâmica dos fluidos computacional. Fluxos em meios porosos. Adsorção.

## ***ABSTRACT***

This dissertation aims to observe the behavior of the adsorption dynamics applied to an adsorption bed that works with the pair activated carbon and ethanol, by the computational fluid dynamics simulation with the help of Ansys CFX software. The simulations were prepared in LABRADS / CEAR / UFPB, using Ansys Workbench software, in which the geometries were drawn in the Design Modeler component and the mesh was created in the Meshing. Then, all boundary conditions were entered in the CFX according to the reference used for validation. Then, all boundary conditions were inserted in the CFX-Pre software according to the reference used for verification. Once this stage was completed, sources terms were added to be considered in the continuity and conservation equations. These terms were constructed using expressions that considered functions generated from points extracted from curves representative of the adsorption rate for the studied domains. Another point that deserves to be highlighted in this study is that three different geometries (Domains I, II and III) with variations in height and width, maintaining the same volume, and for the three cases, the same contour conditions were applied. As results, pressure drops were found for domains I, II and III, demonstrating that for the higher and narrow domains observes a bigger pressure gradient, as is verified in the reference. Regarding the temperature gradients relative to the same domains, a bigger temperature variation was found, for the wider and lower domains. The representative contours of the pressure gradient and the thermal diffusion through the adsorbent particles, that were obtained for the different domains, presented to compatible approximation in results and in behaviors with the respective data used for verification.

**Key-words:** Computational Fluid Dynamics. Flows in porous media. Adsorption.

## LISTA DE SÍMBOLOS

COP	Coeficiente de Eficiência
SCP	Potência específica frigorífica
w	Frequência de comutação ótima
NTU	Número de Unidade de Transferência
Hr	Taxa de espessura do trocador de calor
Bi	Número de Biot
PER	Taxa de Energia Primária
q*/qs	Grau de Preenchimento
q*	Volume de adsorvato
qs	Volume Máximo a ser ocupado pelo adsorvato
A	Potencial de adsorção, área
E	Energia característica do par adsorvativo, Energia
R	Propriedade termodinâmica Constante
T	Temperatura
P	Pressão
n	Parâmetro que descreve a heterogeneidade dos poros do material adsorvente
t	Tempo
$\phi$	Propriedade qualquer
V	Velocidade
$\nabla$	Operador matemático
x0, y0	Posição no espaço
$\rho$	Densidade

$\rho_a$	Densidade do aparente
$\rho_f$	Densidade do fluido
$\rho_s$	Densidade do sólido, Densidade do esquelética
$\rho_p$	Densidade da Partícula
$\rho_{leito}$	Densidade do leito
$\nabla P$	Gradiente de pressão
$D/Dt$	Derivada Material
$\nabla \cdot \tau$	Divergente do tensor de tensões
$S_m$	Termo fonte a ser adicionado na equação da continuidade
$S_M$	Termo fonte a ser adicionado na equação da conservação de momento
$K$	Condutividade térmica
$\Gamma$	Propriedade referente ao termo difusivo
$\Upsilon$	Porosidade
$\forall$	Volume
$\alpha$	Permeabilidade
$\mu$	Viscosidade
$Q$	Vazão
$L$	Largura
$q$	fluxo de Darcy
$u$	Velocidade no eixo X
$v$	Velocidade no eixo Y
$w$	Velocidade no eixo Z

$d$	Operador matemático para derivada
$\partial$	Operador matemático para derivada parcial
$C$	Fator de resistência inercial, tensor dos fatores das resistências inerciais
$D$	Tensor de permeabilidades
$D_p$	Diâmetro da partícula
$S_\phi$	Termo fonte
$SD-F$	Termo fonte correspondente à dissipação de momento para o escoamento em um meio poroso
$E_f$	Energia da parcela fluida
$E_s$	Energia da parcela sólida
$K_{eff}$	Condutividade térmica efetiva
$K_f$	Condutividade térmica do fluido
$K_s$	Condutividade térmica do sólido
$K_g$	Condutividade térmica do gás
$K_p$	Condutividade térmica da partícula
$\nabla \cdot [V(\rho_f E_f + p)]$	Termo referente a advecção de energia para o fluido
$k_{eff} \nabla T$	Termo referente a difusão de
$\sum h_i j_i$	Termo referente a difusão de entalpia no domínio
$\tau \cdot V$	Termo referente a dissipação viscosa no domínio
$S_f^h$	Termo fonte de entalpia do fluido
$P_{sat}$	Pressão de saturação
$a$	Parâmetro da equação de Antoine
$b$	Parâmetro da equação de Antoine
$c$	Parâmetro da equação de Antoine
$C_{p,p}$	Capacidade calorífica específica da partícula porosa

$C_{p,s}$	capacidade calorífica do sólido adsorvente
$C_{p,l}$	capacidade calorífica do adsorbato considerado como em fase líquida
$dq/dt$	Taxa de adsorção de etanol no carvão ativado
$q^*$	Equilíbrio de adsorção encontrado pela equação de Dubinin-Astakhov (D-A)
$\tau$	Constante de difusão no tempo
$E_a$	Energia de ativação
$D_s$	Constante de difusão Pré-exponencial
$f(t)$	Função Interpolação
$h$	Entalpia
$Sh$	Termo fonte acrescentado na equação da conservação de energia
$Q_{st}$	Calor médio de adsorção
$T_{quente}$	Temperatura da fonte quente
$T_{frio}$	Temperatura da fonte fria
$T_{Ads,ent}$	Temperatura de entrada no adsorvedor
$P_{cond}$	Pressão no condensador
$P_{evap}$	Pressão no evaporador
$q_I$	Quantidade adsorvida inicialmente
$q_{II}$	Quantidade adsorvida no equilíbrio
$\Delta q_{max}$	Quantidade máxima adsorvida para as condições de operação
$T_{max}$	Temperatura máxima
$T_{min}$	Temperatura mínima

## LISTA DE NOMENCLATURAS E ABREVIACOES

BEN	Balano Nacional Energtico
EPE	Empresa de Pesquisa Energtica
CFD	Computational Fluid Dynamics
CA	Carvo Ativado
AC	Activated Carbon
Ansys CFX	Software comercial para simulaes de escoamentos fluidodinmico
Ansys Fluent	Software comercial para simulaes de escoamentos fluidodinmico
LABRADS	Laboratrio de Refrigerao por Adsoro
CEAR	Centro de Energias Alternativas e Renovveis da UFPB
UFPB	Universidade Federal da Paraba
CAPES	Coordenao de Aperfeioamento de Pessoal de Nvel Superior
BET	Modelo de adsoro fsica que recebeu a nomenclatura em homenagem a Brunauer, Emmett e Teller.
D-R	Modelo de adsoro fsica que recebeu a nomenclatura em homenagem a Dubinin e Radushkevich
D-A	Modelo de adsoro fsica que recebeu a nomenclatura em homenagem a Dubinin e Astakhov
COP	Coefficiente de desempenho
SCP	Capacidade Especfica de Refrigerao
CFC's	Clorofluorocarbonetos
NTU	Nmero de Unidade de Transferncia
SWS-1L	Topo de material adsorvente composto

MWCNT/MiL 100 (Fe)	Tipo de material adsorvente composto
HFC 134a	Tipo de adsorvato
Maxsorb III	Tipo de Carvão ativado
NIST	National Institute of Standards and Technology
LDF	Linear Driving Force Equation

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 Diagrama de Clapeyron para o ciclo termodinâmico teórico de refrigeração por adsorção.....	23
Figura 2.2 Acima (Secção transversal do adsorvedor e geometria do problema) e abaixo (fases de adsorção à direita e dessorção à esquerda).....	27
Figura 2.3 Visão esquemática (à esquerda) e fotografia do experimento (à direita).....	29
Figura 2.4 Diagrama esquemático do SAR (Sistema de refrigeração por adsorção solar). ....	29
Figura 2.5 - diagrama de Clapeyron para aumentar a transferência de massa do ciclo teórico	30
Figura 2.6 - Representação esquemática do equilíbrio dinâmico de adsorção.....	32
Figura 2.7 Aproximações de equilíbrio de adsorção, acima (isostere à direita e isobar à esquerda) e abaixo (isoterma).....	33
Figura 2.8 - Modelo de adsorção monocamada (a) segundo Langmuir e multicamada (b) segundo B.E.T. ....	34
Figura 2.9 - Descrição Euleriana e Lagrangiana da temperatura num escoamento .....	36
Figura 2.10 Representação dos diferentes tipos de poro: (a) fechados, (b) gargalo de garrafa, (c) cilíndricos, (d) afunilados, (e) interconectados, (f) irregulares. A letra (g) representa a rugosidade da superfície. ....	39
Figura 2.11 Representação esquemática da estrutura porosa de uma material adsorvente .....	40
Figura 2.12 Experimento de Darcy .....	43
Figura 3.1 Desenho esquemático do <i>chiller</i> de adsorção adotado.....	54
Figura 3.2 - Desenho geométrico dos domínios I, II e III.....	54
Figura 3.3 - Curvas de Adsorção em função do tempo .....	61
Figura 3.4 - Gráfico da Quantidade Adsorvida x Pressão .....	63
Figura 4.1 - Gradientes de pressão para os domínios I, II e III no instante $t = 10$ s.....	65
Figura 4.2 - Gradientes de pressão para os domínios I, II e III, do Artigo Referência .....	66
Figura 4.3 - Contornos de Temperaturas simulados para os três domínios no instante $t = 10$ s. ....	67
Figura 4.4 - Referencial para os contornos de temperaturas simulados para os três domínios no instante $t = 10$ s.....	68

# SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	16
1.1	MOTIVAÇÃO E CONTEXTUALIZAÇÃO .....	16
1.2	OBJETIVOS GERAIS .....	18
1.3	OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	18
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	20
2.1	UM BREVE HISTÓRICO SOBRE A TECNOLOGIA DE REFRIGERAÇÃO POR ADSORÇÃO .	20
2.2	A TECNOLOGIA DE REFRIGERAÇÃO POR ADSORÇÃO.....	20
2.2.1	<b>Vantagens da tecnologia de refrigeração por adsorção .....</b>	<b>22</b>
2.2.2	<b>Desvantagens da tecnologia de refrigeração por adsorção.....</b>	<b>22</b>
2.2.3	<b>Ciclo Termodinâmico teórico de refrigeração por adsorção.....</b>	<b>23</b>
2.2.4	<b>Desenvolvimentos da Refrigeração por Adsorção.....</b>	<b>24</b>
2.3	PRINCÍPIOS DA ADSORÇÃO .....	31
2.3.1	<b>Tipos de Sorção.....</b>	<b>31</b>
2.3.2	<b>Processo de Adsorção .....</b>	<b>31</b>
2.3.3	<b>Cinética de Adsorção.....</b>	<b>31</b>
2.3.4	<b>Equilíbrio de Adsorção .....</b>	<b>32</b>
2.3.5	<b>Isotermas de Adsorção .....</b>	<b>34</b>
2.4	CINEMÁTICA DO FLUIDOS .....	36
2.5	EQUAÇÕES GOVERNANTES .....	37
2.5.1	<b>Equação da conservação da massa .....</b>	<b>37</b>
2.5.2	<b>Equação da conservação de movimento .....</b>	<b>38</b>
2.5.3	<b>Equação da conservação da energia .....</b>	<b>38</b>
2.6	MEIO POROSO.....	38
2.6.1	<b>Porosidade (<math>\gamma</math>) .....</b>	<b>40</b>
2.6.2	<b>Permeabilidade (<math>\alpha</math>) .....</b>	<b>40</b>
2.6.3	<b>Viscosidade Efetiva (<math>\mu_e</math>) .....</b>	<b>42</b>
2.6.4	<b>Lei de Darcy .....</b>	<b>43</b>
2.6.5	<b>Equação de Darcy-Forchheimer .....</b>	<b>45</b>
2.6.6	<b>Equação de Ergun .....</b>	<b>46</b>
2.6.7	<b>Equação da conservação de uma propriedade genérica em um meio poroso.....</b>	<b>47</b>
2.6.8	<b>Equação da conservação de massa em um meio poroso .....</b>	<b>48</b>

<b>2.6.9</b>	<b>Equação da conservação de movimento em um meio poroso.....</b>	<b>49</b>
<b>2.6.10</b>	<b>Equação da conservação da energia em um meio poroso.....</b>	<b>50</b>
3	Metodologia .....	53
3.1	SOFTWARE E COMPONENTES .....	53
3.2	GEOMETRIA.....	53
3.3	QUALIDADE DA MALHA.....	55
3.4	PREMISSAS .....	55
3.5	MATERIAIS.....	55
<b>3.5.1</b>	<b>Etanol.....</b>	<b>56</b>
<b>3.5.2</b>	<b>Meio Poroso.....</b>	<b>56</b>
3.6	EQUAÇÕES GOVERNANTES .....	59
<b>3.6.1</b>	<b>Equação de Conservação da Massa .....</b>	<b>59</b>
<b>3.6.2</b>	<b>Equação da Conservação de Movimento .....</b>	<b>61</b>
<b>3.6.3</b>	<b>Equação da Conservação de Energia .....</b>	<b>62</b>
3.7	CONDIÇÕES DE CONTORNO .....	62
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO .....	64
4.1	Gradientes de pressão .....	64
4.2	Gradiente de temperatura .....	66
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS E PESPECTIVAS FUTURAS.....	69
5.1	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	69
5.2	Pespectivas de pesquisas futuras.....	70
6	REFERÊNCIAS .....	71

# CAPÍTULO 1

## 1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo, serão expostos alguns motivos que levaram a escolha do tema investigado, do sistema escolhido assim como a ferramenta utilizada para tal. Além de apresentar o que se busca alcançar, em termos de contribuição científica, introduzindo os objetivos gerais e específicos.

### 1.1 MOTIVAÇÃO E CONTEXTUALIZAÇÃO

Devido aos avanços tecnológicos e a industrialização, a humanidade está numa curva ascendente no consumo de energia elétrica. O Relatório síntese com ano base 2017 do Balanço Energético Nacional – BEN 2017 expõe que no Brasil a fonte de energia mais utilizada é a hidroelétrica. O mesmo, também mostra, um aumento de 7% da energia hidráulica disponibilizada, causada por motivos naturais, quando após quatro anos de estresse nas condições hidrológicas, essas condições voltaram a ser favoráveis (EPE, 2017).

Ainda segundo (EPE, 2017), devido à maior oferta hídrica, juntamente com a expansão da geração de energia eólica, a participação das fontes de energia renováveis na matriz energética avançou de 75,5% para 81,7%, mesmo assim houve queda na oferta total de energia com fatores determinantes para essa queda, a retração de 5,6% na oferta interna de petróleo e derivados adicionado ao recuo de 13,2% do gás natural no período. Fazendo com que assim, a matriz energética brasileira em 2016 seja composta por 68,1% de fonte hidráulica, 9,1% de gás natural, 8,2% de biomassa, 3,7% dos derivados do petróleo, 2,9% carvão e derivados, 5,4% eólica, 2,6% nuclear e 0,0% solar fotovoltaica.

Estes dados mostram uma tendência no incremento da geração de energia oriundas de origem renovável, evitando assim eventuais aumentos de tarifas decorrentes do acionamento emergencial das termoeletricas em épocas de condições hídricas desfavoráveis. Além de aumentar o custo da energia para o consumidor, este acionamento causa poluição do ar e efeito estufa, devido a utilização de combustíveis de origem fóssil na geração de energia.

Em países tropicais e principalmente em regiões próximas da linha do equador, como a região Nordeste do Brasil, onde as altas temperaturas são registradas quase que o ano inteiro, faz-se necessário o estudo e controle da temperatura em ambientes fechados.

O controle da temperatura em ambientes fechados possui diversas aplicações industriais e em nosso cotidiano, mostrando assim que a produção do frio proporciona uma melhoria na qualidade de vida (Riffel, 2008).

O termo “produção do frio” compreende não apenas, o ar condicionado doméstico, mas também a refrigeração industrial, o condicionamento de alimentos e medicamentos, tornando assim o consumo de energia elétrica, por parte dos sistemas de refrigeração, uma parcela importante a ser considerada. Justificando a busca por sistemas cada vez mais eficientes, e também aqueles que utilizem fontes de energia gratuita e/ou renováveis.

Atualmente, a tecnologia de refrigeração mais utilizada é a de compressão a vapor, que apresenta desvantagens relativas ao alto consumo de energia elétrica e a danos ambientais. O alto consumo de energia elétrica é devido a utilização do compressor de vapor, já os danos ambientais são decorrentes do uso dos fluidos refrigerantes que apesar de bem desenvolvidos causam depleção da camada de ozônio.

Por sua vez, no sistema de refrigeração por adsorção, o efeito frigorífico é obtido com um ciclo de aquecimento que pode operar com fontes de calor com um gradiente de temperatura relativamente pequeno, como calor rejeitado ou a energia solar, além de trabalhar com refrigerantes naturais que não causam depleção da camada de ozônio como: água, amônia e metanol. Tornando assim, o sistema de refrigeração por adsorção uma alternativa interessante para os sistemas de compressão a vapor recebendo destaque por aproveitar energia gratuita e renovável (Oliveira, 2011).

A dinâmica dos fluidos computacional ou fluidodinâmica computacional, que vem do inglês como *Computational Fluid Dynamics* (CFD), é uma área da ciência que trata da simulação numérica de fenômenos de transporte de calor e massa, em escoamentos de fluidos. Originou-se a partir da combinação de duas disciplinas: mecânica dos fluidos e cálculo numérico. Com as equações que regem o escoamento de fluidos podendo ser resolvidas por meio de diferentes métodos numéricos.

Ela é amplamente usada na engenharia, nos mais diversos equipamentos, podendo ser empregada desde a fase conceitual de um projeto, analisando diversos cenários, até a etapa de produção, o que permite determinar a viabilidade e qual a melhor solução para

um determinando produto, reduzindo custos financeiros em relação aos estudos experimentais, os conhecidos protótipos.

Segundo Augier; Laroche e Brehon., (2008) concluíram em seu artigo que, a aplicação de modelos CFD é uma ótima ferramenta para desenvolvimento no campo dos processos de adsorção, e que certamente, pode ser extensivamente aplicável no desenvolvimento de adsorvedores industriais.

A proposta deste trabalho é de contribuir com o estudo e análise de um adsorvedor de tubo aletado que trabalha com o par Carvão Ativado (CA) e etanol, empregado em um sistema de refrigeração por adsorção, fazendo uso da (CFD), permitindo que através de simulações, usando o software Ansys CFX, seja realizada uma análise dos parâmetros envolvidos no desempenho do sistema, com a intenção de servir de aporte técnico no desenvolvimento de um sistema de refrigeração por adsorção, e assim poder melhor dimensionar um Chiller de adsorção evitando desta maneira gastos desnecessários.

Uma vez que, investiga-se a adsorção física em um Chiller de adsorção, que nada mais é que, um dispositivo que em seu interior encontra-se um meio poroso, onde ocorrerão os processos de adsorção e dessorção. Torna-se necessário para realização desta proposta de trabalho: o entendimento da CFD, conhecimento de termodinâmica, transferências de calor e massa, fenômeno da adsorção e dos conceitos sobre os fenômenos físicos que ocorrem em um meio poroso.

## 1.2 OBJETIVOS GERAIS

Estudar e analisar o fluxo fluido em um meio poroso, através de simulações computacional de fluidodinâmica, de modo a servir de aporte técnico para sistemas de refrigeração por adsorção sólida.

## 1.3 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Os objetivos específicos contidos neste trabalho são:

- Realizar no software comercial Ansys CFX uma simulação para um leito adsorativo que trabalha com par carvão ativado e etanol.

- Desenvolver termos fontes a partir de funções extraídas de curvas representativas da massa adsorvida em função do tempo, encontradas em um gráfico originado a partir das equações de dinâmica de adsorção.
- Aplicar estes termos fontes nas equações de conservação de massa e de energia.
- Verificar como se comportam o gradiente de pressão e a difusão térmica através das partículas adsorventes para três domínios com proporções de altura e largura diferentes, mas com o mesmo volume.
- Validar com dados simulados já comprovados na literatura.

## CAPÍTULO 2

### 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo, foi realizado um apanhado sobre os principais temas que circundam a proposta desta dissertação, tais como: tecnologia de refrigeração por adsorção, princípios do fenômeno da adsorção, cinemática dos fluidos, meios porosos e equações governantes para fluxo em um meio poroso.

#### 2.1 UM BREVE HISTÓRICO SOBRE A TECNOLOGIA DE REFRIGERAÇÃO POR ADSORÇÃO

White (2012) relata em sua tese de doutorado que, a tecnologia de refrigeração por adsorção foi deixada de lado na década de 70, por causa do desenvolvimento da compressão mecânica a vapor e o surgimento e aperfeiçoamento dos fluidos refrigerantes CFC's. No entanto, o interesse nessa tecnologia voltou a crescer rapidamente a partir da década de 80, com pesquisadores de sistemas de refrigeração por adsorção em todo o mundo trabalhando em uma variedade destes sistemas.

Segundo Goyal *et al.*, (2016), o registro mais antigo do fenômeno da adsorção aconteceu em 1848 no laboratório de Faraday onde a capacidade de resfriamento foi gerada quando o cloridrato de prata adsorveu amônia. Em 1920, G. E. Hulse, propôs um sistema de refrigeração que usava sílica gel e dióxido de enxofre como par adsorativo para o condicionamento de alimentos em um trem. Já no período de 1940 a 1945, também em um trem que realizava o percurso de Londres para Liverpool, o par cloreto de cálcio e amônia era utilizado para o condicionamento de alimentos.

#### 2.2 A TECNOLOGIA DE REFRIGERAÇÃO POR ADSORÇÃO

Segundo Riffel; Belo e Leite., (2007) sistemas de refrigeração por adsorção baseiam-se numa interação entre o adsorvente (meio poroso) e o adsorvato (fluido de trabalho) com o transporte do fluido realizado devido a gradientes térmicos provindos de origens como calor residual de processos, energia solar ou calor de uma combustão. Esta tecnologia de refrigeração por adsorção é vantajosa em comparação com a tecnologia por

absorção por requerer menos componentes, como por exemplo não necessitando de dispositivos de expansão e redutores de pressão, resultando em menores custos de manutenção e operação.

Segundo Wang e Oliveira., (2006), as vantagens que o sistema por adsorção traz em relação ao sistema por compressão a vapor são: economizar energia, ter um controle simples com custo de operação baixo, ser livre de vibrações e utilizar calor residual ou energia solar como fonte de alimentação. Já em comparação com sistemas de absorção de líquidos o sistema por adsorção leva vantagem por não necessitar de uma bomba hidráulica ou retificador para o refrigerante, além de não apresentar problemas de corrosão devido aos pares de trabalho. Contudo, apesar de todas as vantagens faladas anteriormente, estes sistemas têm desvantagens, como um baixo coeficiente de performance ou em inglês *coefficient of performance* “COP”, além de baixas potências específicas de resfriamento que vem do inglês como *specific cooling power* “SCP”.

Segundo Choudhury *et al.*, (2013), as tecnologias de refrigeração por adsorção são muito atraentes pelo potencial em atender a demanda por conservação de energia e pelos benefícios ambientais. Todavia os obstáculos como, custo de investimento alto, tamanhos maiores dos chillers, baixas potências frigoríficas específicas do sistema, levam a conclusão que para esta tecnologia tornar-se competitiva é necessário, pesquisas sobre, aumento de transferência de calor e massa do sistema, materiais adsorventes, ciclos avançados entre outras.

Segundo Fernandes *et al.*, (2014, p. 103)

Os sistemas de refrigeração por adsorção aparecem como uma boa alternativa para substituir (ou integrar) os sistemas de refrigeração tradicionais por sistemas mais ecológicos, que podem ser alimentados por fontes de energia renováveis e contribuir para um desenvolvimento sustentável, cumprindo as diretrizes internacionais atuais.

De acordo com os autores supracitados, conclui-se que a tecnologia de refrigeração por adsorção aparece como uma excelente alternativa aos sistemas de refrigeração por compressão de vapor, pois a primeira aproveita energia gratuita e renovável, dentre outras vantagens.

### **2.2.1 Vantagens da tecnologia de refrigeração por adsorção**

De acordo com os estudos realizados, foram compiladas as principais vantagens da tecnologia de refrigeração por adsorção, que são:

- I. É considerada uma tecnologia mais ecológica, alimentada por fontes de energias gratuitas e renováveis (calor residual ou energia solar).
- II. Os materiais utilizados são ecológicos (Ex. Sílica Gel, Zeólita).
- III. Poucas peças móveis, livre de vibrações e ruídos, com o potencial de baixo esforço de manutenção e custos.
- IV. Requer menos componentes que o ciclo de absorção, não necessitando de dispositivos de expansão e redutores de pressão, o que resulta em menores custos de operação e manutenção
- V. Não necessita de utilização de uma bomba ou compressor, tornando o consumo de eletricidade necessário apenas para o acionamento de válvulas de comunicação e unidade de controle;
- VI. Não precisa de um retificador para o refrigerante, e não apresenta problemas de corrosão devido aos pares de trabalho.

### **2.2.2 Desvantagens da tecnologia de refrigeração por adsorção**

Também foram resumidas as principais desvantagens da tecnologia de refrigeração por adsorção, que são:

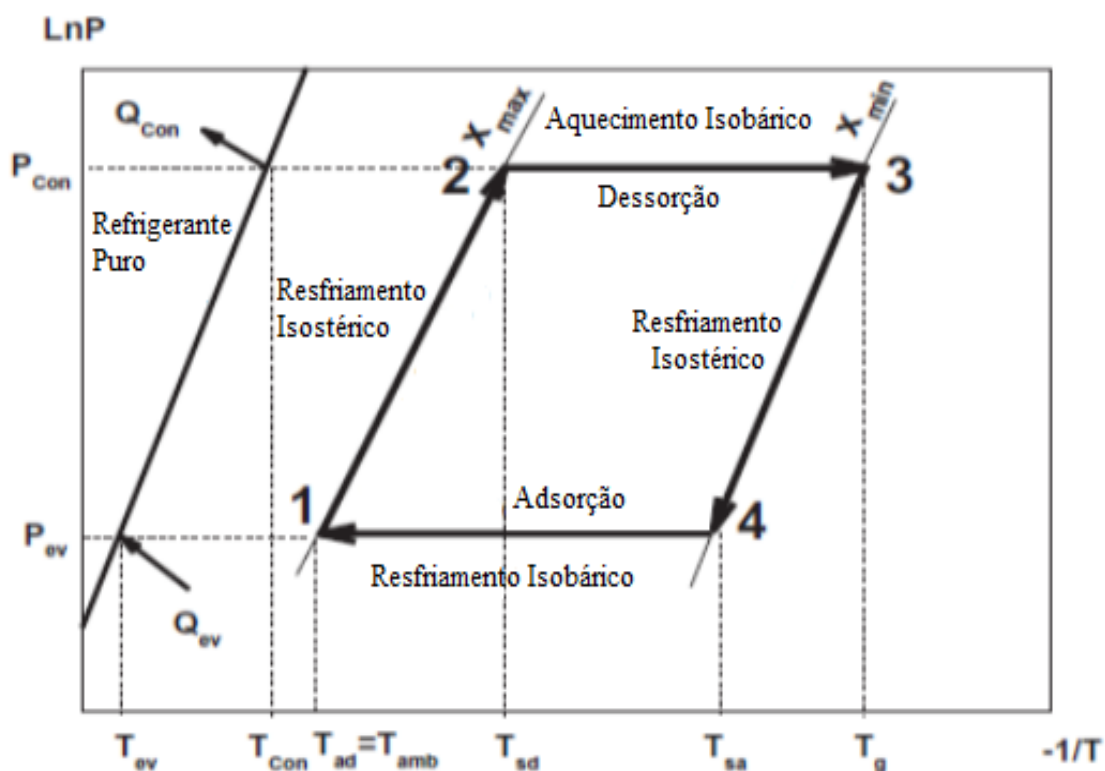
- I. O baixo coeficiente de eficiência “COP”;
- II. A baixa potência frigorífica específica “SCP”, levando a tamanhos maiores dos chillers;
- III. Elevadas exigências de vácuo do recipiente, requerendo alta tecnologia e projetos especiais para manter o vácuo elevado;
- IV. Precisa de muita pesquisa sobre materiais adsorventes, aumento de transferência de calor e massa do sistema;
- V. Princípios de trabalho intermitente;
- VI. No caso de sistemas de refrigeração alimentados termicamente por energia solar, estes têm uma fonte intermitente e algumas vezes altamente irregular durante dias nublados e estações.

### 2.2.3 Ciclo Termodinâmico teórico de refrigeração por adsorção

Para o estudo do ciclo termodinâmico teórico de sistemas de refrigeração por adsorção se fez necessário o estudo de diversas pesquisas, a mais didáticas encontradas está citada abaixo.

Ammar; Benhaoua e Bouras., (2017) mostram o que seria o ciclo termodinâmico teórico de refrigeração por adsorção, onde através do diagrama de Clapeyron exposto na Figura 2.1, onde é possível analisar cada uma das etapas do ciclo.

Figura 2.1 Diagrama de Clapeyron para o ciclo termodinâmico teórico de refrigeração por adsorção.



Fonte: Adaptado de Ammar; Benhaoua e Bouras., (2017)

Observando a Figura 2.1, é possível descrever do ciclo termodinâmico de refrigeração por adsorção nas seguintes etapas:

- 1 – 2. Aquecimento Isostérico, com a massa de adsorvato mantida constante e,  $X_{max}$ .

2 – 3. Aquecimento Isobárico, dando início à dessorção, no final desta etapa a massa de vapor do adsorvato atinge o valor mínimo  $X_{\text{Min}}$ , correspondente a temperatura máxima de regeneração  $T_g$ .

3 – 4. Resfriamento Isostérico.

4 – 1. Resfriamento isobárico, início da adsorção, nesta fase o frio é produzido sendo proporcional à variação da massa do ciclo ( $\Delta X = X_{\text{Max}} - X_{\text{Min}}$ ), no final desta etapa a massa de adsorvato aumenta até o valor máximo  $X_{\text{max}}$  no estado 1.

#### **2.2.4 Desenvolvimentos da Refrigeração por Adsorção.**

Para embasar as investigações desta pesquisa foi necessário o estudo de diversos autores até a presente data, obedecendo uma ordem cronológica.

O seguinte estado da arte teve como intuito descrever algumas tentativas e desenvolvimentos realizados no campo de pesquisa que envolve a tecnologia da refrigeração por adsorção, componentes, pares adsortivos, transferência de calor e massa em leitos adsortivos, metodologias, experimentos e simulações, com o objetivo de tornar esta tecnologia competitiva.

Sakoda e Suzuki., (1984) realizaram experimentos sobre o sistema de refrigeração por adsorção, empregando sílica gel e água como par adsortivo, e propuseram um modelo que considerava as propriedades de adsorção e as características do aparelho, sendo os resultados experimentais interpretados pelo modelo com sucesso. Esclarecendo quantitativamente a contribuição da temperatura de regeneração sobre o desempenho do sistema.

Sakoda e Suzuk., (1986) propuseram um modelo CFD teórico para interpretar resultados experimentais obtidos de um equipamento em escala reduzida de um sistema de refrigeração por adsorção do tipo fechado, e concluíram com este modelo que o COP solar desse sistema é controlado pela eficiência dada pela taxa de calor usada para a regeneração dos adsorventes, e também, que a eficiência é influenciada pela área de transferência de calor entre as partículas de adsorvente dentro do recipiente do adsorvente, e o trocador de calor.

Saha; Boelman e Kashiwagi., (1995) investigaram o desempenho de um chiller de três estágios para uso em um ar condicionado que utilizava o sistema de adsorção de sílica gel e água, em um ciclo fechado, movido termicamente. Foi construído um programa para

simulação do ciclo, para análise das condições de operação como temperaturas, taxas de fluxo e tempos de adsorção / dessorção e, após as simulações do ciclo, observou-se que o refrigerador de três estágios pode ser operado com fontes de calor de 50° C e 40 °C em combinação com fontes de resfriamento de 39°C e 30 °C, respectivamente. Seus resultados mostraram que para o funcionamento eficaz, fontes de calor a 50°C, precisavam de fontes de resfriamento entre 20°C e 25°C, enquanto fontes de 40°C requeriam fontes de resfriamento entre 20°C a 28° C.

Alam *et al.*, (2000) realizaram estudos numéricos afim de investigar a influência dos parâmetros de projeto do trocador de calor sobre o desempenho de um sistema de refrigeração por adsorção em um ciclo fechado, com dois leitos adsortivos, sendo o par de trabalho sílica gel e água. Chegando à conclusão que para o determinado conjunto de parâmetros o sistema possuía uma frequência de comutação ótima ( $\omega$ ), que aumenta com o aumento do número de unidade de transferência (NTU), taxa de espessura do trocador de calor (Hr) e com a diminuição do número de Biot (Bi). E o desempenho do sistema é seriamente declinado uma vez que ele não opere nessa frequência.

Anyanwu e Ogueke., (2005) apresentaram o procedimento de projeto termodinâmico para refrigeração por adsorção solar e aplicado em sistemas que usam como pares de trabalho carvão ativado / metanol, carvão ativado / amônia e zeólita / água. Os resultados obtidos mostraram que o par zeólita / água foi o melhor para aplicação de ar condicionado, enquanto o carbono ativado / amônia foi preferível para a fabricação de gelo, congelamento profundo e preservação de alimentos.

Chang; Wang e Shieh., (2007) projetaram, um chiller de adsorção que operava com sílica gel e água com par adsortivo, e analisaram experimentalmente os efeitos das condições operacionais no poder frigorífico e no coeficiente de performance. Observaram que o desempenho do sistema tinha uma forte dependência das condições de operação como: temperaturas de operação, taxas de fluxo e tempos de ciclo. Encontrando também que para menores taxas de fluxo de água quente era obtido um COP superior ao encontrado em condições padrão de operação.

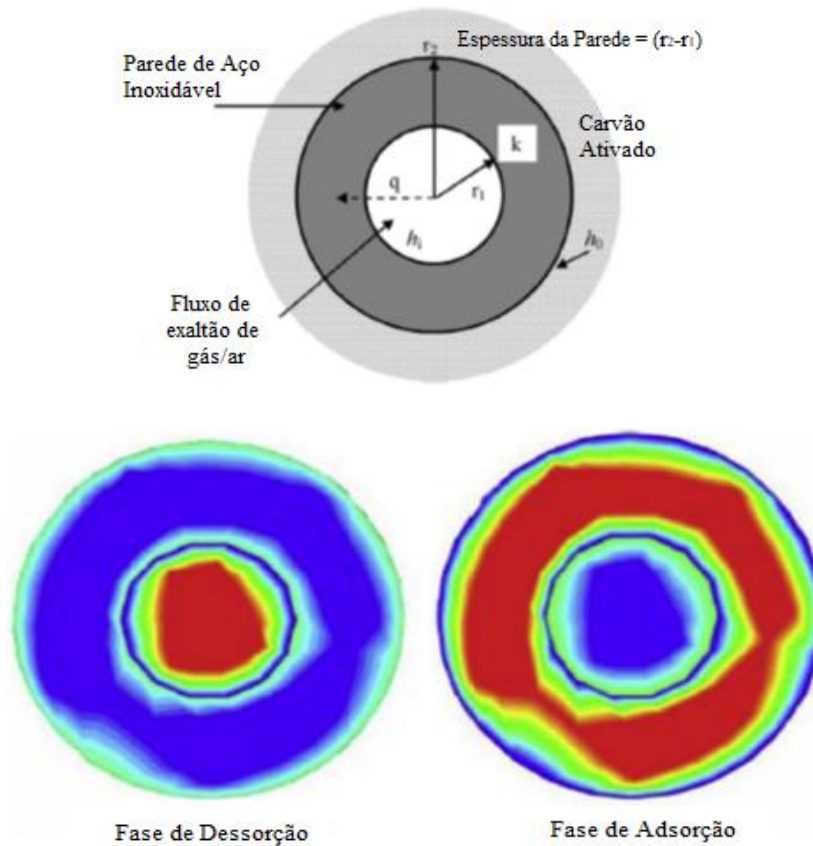
Augier; Laroche; Brehon., (2008) implementaram um modelo numérico em um software CDF, objetivando simular o transporte e a adsorção em geometrias 2D ou 3D, com a avaliação da hidrodinâmica do modelo feita em dois diferentes casos testes experimentais. O estudo realizado mostrou que a eficiência da adsorção é fortemente afetada pela hidrodinâmica dentro de colunas.

White, (2012) dedica o capítulo três da sua tese, para demonstrar os princípios da CFD, focado no fenômeno de fluxo em meio poroso e modelos matemáticos para vapor de água e transferência de calor em leito adsortivo em um sistema de refrigeração por adsorção. Na tese referida, White simula via CFD um leito adsortivo que trabalha com sílica gel e água com par adsortivo em um sistema de refrigeração por adsorção.

Mahdavikhah e Niazmand., (2013) examinaram o desempenho de um chiller de adsorção que trabalhava com o adsorvente composto SWS-1L e água como par, apresentando um modelo numérico 3D de não equilíbrio para descrever as transferências de massa e calor, e estudaram os efeitos de configurações do leito, como altura e espaço entre as aletas, no desempenho do sistema. Investigaram também a importância de cada parte do sistema durante a fase de aquecimento, a partir da energia de entrada, e apresentaram para diferentes configurações do leito. Concluindo que o COP aumenta com o aumento da altura do leito, e o SCP diminui consideravelmente com o aumento da altura da aleta, devido ao aumento do tempo do ciclo e da massa de adsorvente.

Ramji; Leo e Abdullah., (2014) investigaram por simulações, empregando CFD, o efeito da espessura da parede sobre a temperatura de dessorção, e o desempenho de resfriamento, para um sistema de ar condicionado que usa calor de exaustão, e trabalha com o par carbono ativado / metanol. Nesta investigação foi observado os seguintes dados: entrada de gás de exaustão a 200° C, temperatura do leito em cerca de 120° C, além de parede de aço inoxidável de 20 mm. Conclui-se que para aquecer o adsorvente foi utilizado cerca de 10 minutos, e o mesmo tempo aproximadamente para que a temperatura diminuísse até a temperatura ambiente. Para estes dados foram obtidos, uma potência de resfriamento de 0,65 KW e um COP de aproximadamente 0,25, para um ciclo de 1200 segundos. Chegando à conclusão de que a espessura de parede ideal deve ser de 20-30 mm de aço inoxidável. Entretanto, uma maior temperatura de entrada teria um tempo de ciclo relativamente mais longo, mas capaz de produzir uma maior potência de resfriamento em troca. A Figura 2.2 ilustra a secção transversal da geometria do adsorvedor e suas fases de adsorção e dessorção.

Figura 2.2 Acima (Secção transversal do adsorvedor e geometria do problema) e abaixo (fases de adsorção à direita e dessorção à esquerda).



Fonte: Adaptado de Ramji; Leo e Abdullah., (2014).

Pan et al (2015) analisaram teoricamente três métodos de recuperação de calor (circular, em série e passivo) aplicados em refrigeradores por adsorção, seus resultados mostraram que as recuperações de calor em série e passiva são melhores que a recuperação circular de calor, considerando a fabricação e o custo. Além disso, simularam os métodos em série e passivo via modelo CFD em um adsorvedor do tipo tubo aletado, e concluiu que pelo tempo de recuperação o método em série é mais confiável que o passivo.

Chen et al (2015) realizaram simulações numéricas de fluxo fluido em placas paralelas preenchidas com um meio poroso, para validar seu modelo de Lattice Boltzman, desenvolvido para resolver as equações generalizadas de Navier-Stokes que incluem efeito de Klinkenberg. E corrigindo a permeabilidade aparente baseada na permeabilidade intrínseca e no número de Knudsen, empregando correlação de segunda ordem de Beskok e Karniadakis-Civan.

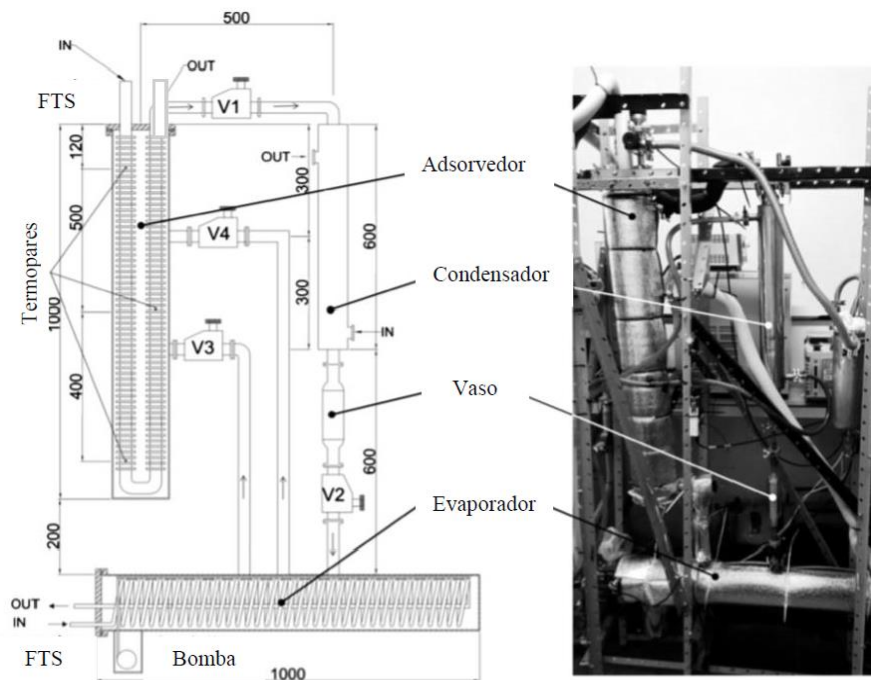
White, (2016) simulou via CFD um novo leito adsorvente formado por um trocador de calor de cobre aletado com arame, compactado com sílica gel, como parte de um sistema de refrigeração por adsorção. Estimando que por ter uma área superficial maior devido ao desenho da aleta de arame o COP seria melhorado e aumentaria a transferência de calor. E combinados com os resultados de CFD, foram realizados dois experimentos para analisar a transferência de calor entre as aletas de arame e o leito adsorvente poroso.

Qadir; Said e Mansour., (2017) realizaram um estudo objetivando melhorar o desempenho de refrigeração, de um chiller de adsorção que utiliza energia solar, através da utilização de um novo adsorvente formado por um composto de (MWCNT)/ MIL-100(Fe). Observando em seu estudo, que o novo composto contendo 6,1% de MWCNTs resultara em uma potência de refrigeração máxima alcançável de 455 W/kg para o chiller de adsorção. E concluirão que, o novo material adsorvente proposto pode ser considerado como um potencial substituto dos adsorventes atualmente utilizados como sílica-gel e carbono-ativado, para uso em novas gerações de chillers de adsorção solar de alto desempenho, com um nível de viabilidade comercial aceitável.

Panyam e Banker., (2017) apresentaram uma análise termodinâmica de uma usina de turbina a gás integrada com um sistema de refrigeração de adsorção que utiliza o calor de exaustão de resíduos da usina. Com o sistema de refrigeração por adsorção trabalhando com o par carbono ativado / HFC 134a, e o sistema inteiro avaliado numericamente baseado nos parâmetros, coeficiente de desempenho (COP), capacidade de refrigeração, temperatura dos gases de exaustão e taxa de energia primária (PER), e variação da temperatura ambiente e temperatura de dessorção. Concluíram que a mudança na temperatura ambiente tem um efeito mais significativo no desempenho do sistema se comparado a temperatura de dessorção. E notaram que não é vantajoso aumentar a temperatura de dessorção além de 90 °C por conta do tamanho do trocador de calor dos gases de exaustão.

Vodianitskaia *et al.*, (2017) apresentaram em seu artigo, a cinética de adsorção e a avaliação de desempenho de um chiller de adsorção experimental, que trabalhava com o par, sílica gel e água, alcançando um bom acordo entre os dados experimentais e calculados. Concluíram que, a temperatura máxima necessária para a dessorção estava no intervalo entre 70 e 80 °C. Ver Figura 2.3.

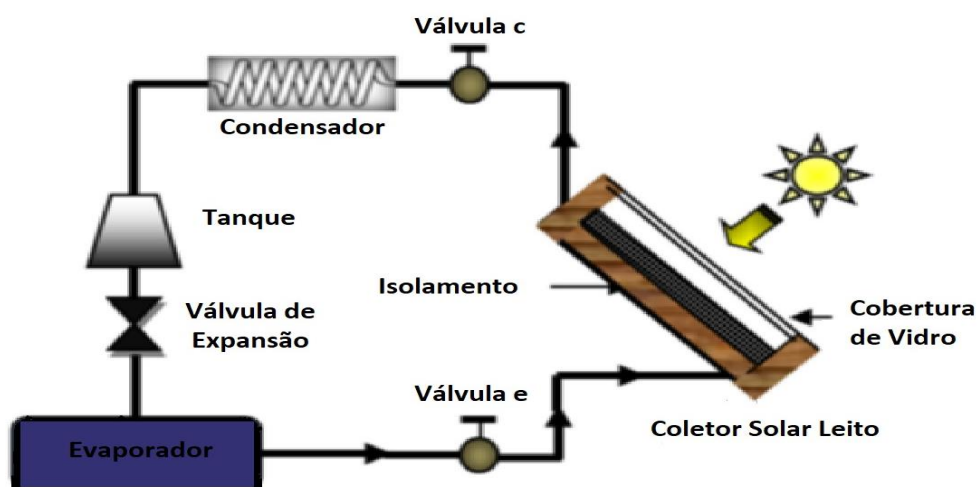
Figura 2.3 Visão esquemática (à esquerda) e fotografia do experimento (à direita).



Fonte: Adaptado de Vodianitskaia et al (2017)

Ammar; Benhaoua e Bouras, (2017) apresentaram em seu artigo o funcionamento e o desempenho de um sistema de refrigeração de adsorção conduzido por um coletor solar / leito, ilustrado na Figura 2.4, esse sistema operava com carbono ativado e metanol como par de trabalho, e a equação de Dubinin-Astakhov (D-A) foi usada para descrever este fenômeno.

Figura 2.4 Diagrama esquemático do SAR (Sistema de refrigeração por adsorção solar).

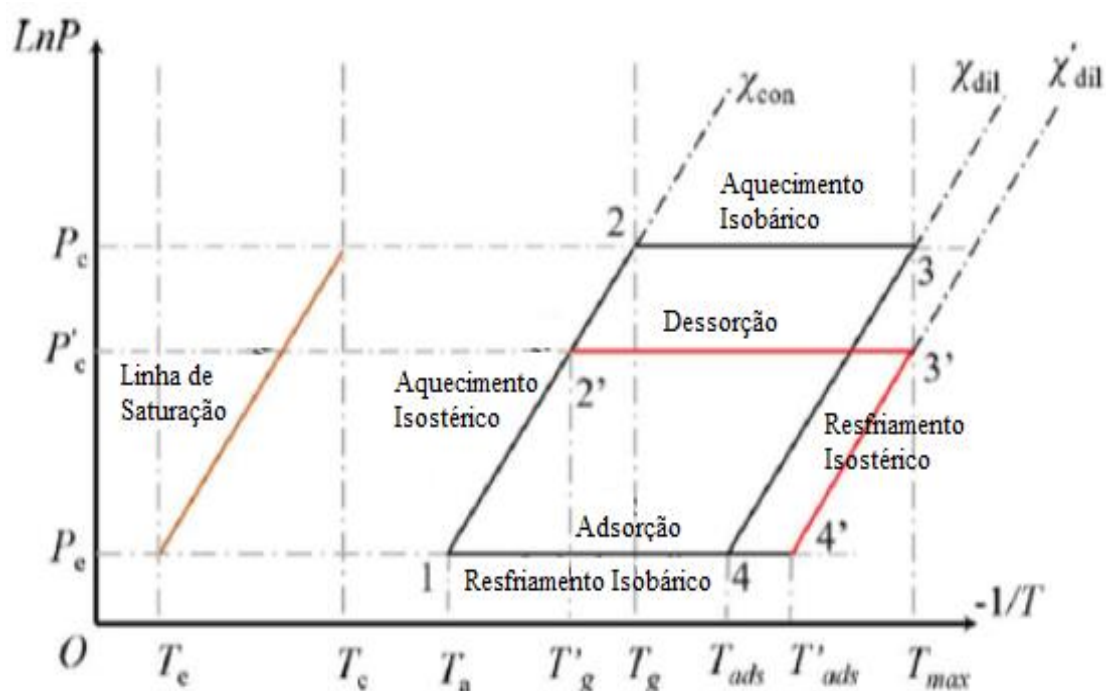


Fonte: Adaptado de Ammar; Benhaoua e Bouras., (2017).

Soares, (2017), realizou em sua tese o desenvolvimento de um *chiller* birreator por adsorção que trabalha com o par sílica gel e água, utilizando uma otimização experimental no processo envolvendo os tempos dos ciclos e adsorção. Alcançando resultados promissores em relação a estudos anteriores. Com destaque para o ciclo com adsorção simultânea e defasagem de fase de 2 minutos, uma inovação para o estudo dos tempos dos ciclos.

Wang et al., (2018) projetaram e construíram um sistema de refrigeração por adsorção que trabalhava com carvão ativado e metanol como par de trabalho, esse sistema é diferente do ciclo básico de adsorção devido ao uso de uma bomba de vácuo, com o intuito de reduzir a pressão interna do sistema no processo de dessorção. Com isso os resultados experimentais obtidos mostraram um melhoramento, no coeficiente de desempenho, na taxa de dessorção e na massa dessorvida. A Figura 2.5 abaixo retrata o aumento da transferência de massa teórico baseado no ciclo de adsorção sólida ideal.

Figura 2.5 - diagrama de Clapeyron para aumentar a transferência de massa do ciclo teórico



Fonte: Adaptado de Wang et al., (2018).

## 2.3 PRINCÍPIOS DA ADSORÇÃO

Neste tópico serão expostos o estado da arte de alguns dos principais trabalhos, considerado por este autor, envolvendo o fenômeno da adsorção.

### 2.3.1 Tipos de Sorção

Segundo Hassan *et al.* (2015), o termo sorção refere-se a dois processos fundamentalmente diferentes, que são os processos de: absorção e adsorção. No primeiro processo se tem um fenômeno volumétrico no qual a substância o adsorbato (gás ou fase de vapor) penetra e incorpora o adsorvente (outra substância). E no segundo, o fenômeno é de superfície onde o adsorbato (gás ou fase de vapor) são acumulados na superfície do sólido (adsorvente) e permanecem aderidos. Sendo muito importante que o meio poroso sólido forneça uma grande área superficial e um grande volume de poros e assim uma grande capacidade adsorptiva.

### 2.3.2 Processos de Adsorção

Segundo Hassan e Mohamad (2012) dependendo das forças envolvidas, o processo de adsorção pode ocorrer de duas maneiras, adsorção física e adsorção química. No processo de adsorção física as moléculas de adsorbato aderem à superfície do adsorvente devido às forças de Van der Waals. E no processo de adsorção química as forças envolvidas são de valência, a qual envolve a troca ou partilha de elétrons entre as moléculas do adsorbato e a superfície do adsorvente.

Nesta dissertação, foi considerada apenas a adsorção física, estabelecendo uma nítida separação de fase, para os processos de interação na interface sólido-vapor, que passará a ser chamado apenas de adsorção, tendo como par de trabalho sílica carvão ativado/etanol.

### 2.3.3 Cinética de Adsorção

Segundo Grilo (2003), a cinética de adsorção é controlada pela difusão no interior da estrutura porosa, já que na superfície dos grãos a difusão é muito rápida, e o processo

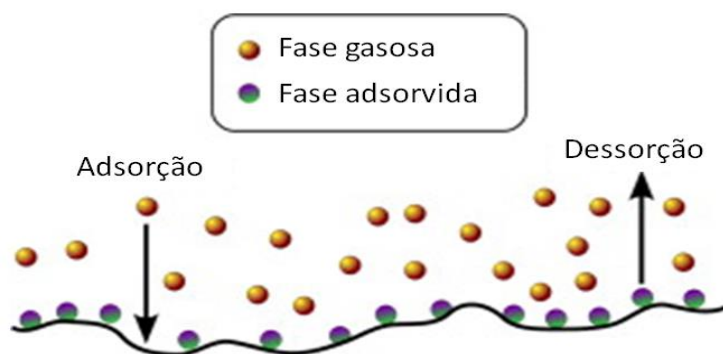
de adsorção pode ser representado por uma isoterma unicamente, sendo necessário para isso que a difusão de massa no interior do adsorvente seja suficientemente rápida. Do contrário o processo passará a depender também da fase adsorvida, a partir daí, passando a depender também do tempo, e não mais apenas das grandezas termodinâmicas.

Segundo Hadja Ammar; Benhaoua e Bouras, (2017) a taxa de adsorção é maior no início do processo devido a importância de uma superfície descoberta, a medida em que, a superfície do adsorvente começa a se torna mais coberta pelas moléculas do adsorvato a taxa de adsorção diminui. Já a taxa de dessorção cresce, à medida em que, as moléculas de adsorvato escapam da superfície coberta do adsorvente.

#### 2.3.4 Equilíbrio de Adsorção

Segundo Bansal e Goyal., (2005) *apud* Hassan et al., (2015) a medida em que, o tempo passa, e a taxa de adsorção diminui enquanto que a taxa de dessorção aumenta, até o ponto onde as taxas se igualam. Então neste estágio é dito que o adsorvente está em equilíbrio de adsorção com adsorvato. Caracterizando um equilíbrio dinâmico, devido ao número de moléculas que estão sendo adsorvidas serem iguais ao número de moléculas que estão sendo dessorvidas. A Figura 2.6 é a representa o equilíbrio dinâmico de adsorção como moléculas sendo adsorvidas e dessorvidas.

Figura 2.6 - Representação esquemática do equilíbrio dinâmico de adsorção.



Fonte: Adaptada de Hassan et al., (2015).

Para Bansal e Goyal., (2005) a concentração de equilíbrio para um sistema de adsorvente – adsorvato é dada pela Equação 2.1 em função da pressão e da temperatura.

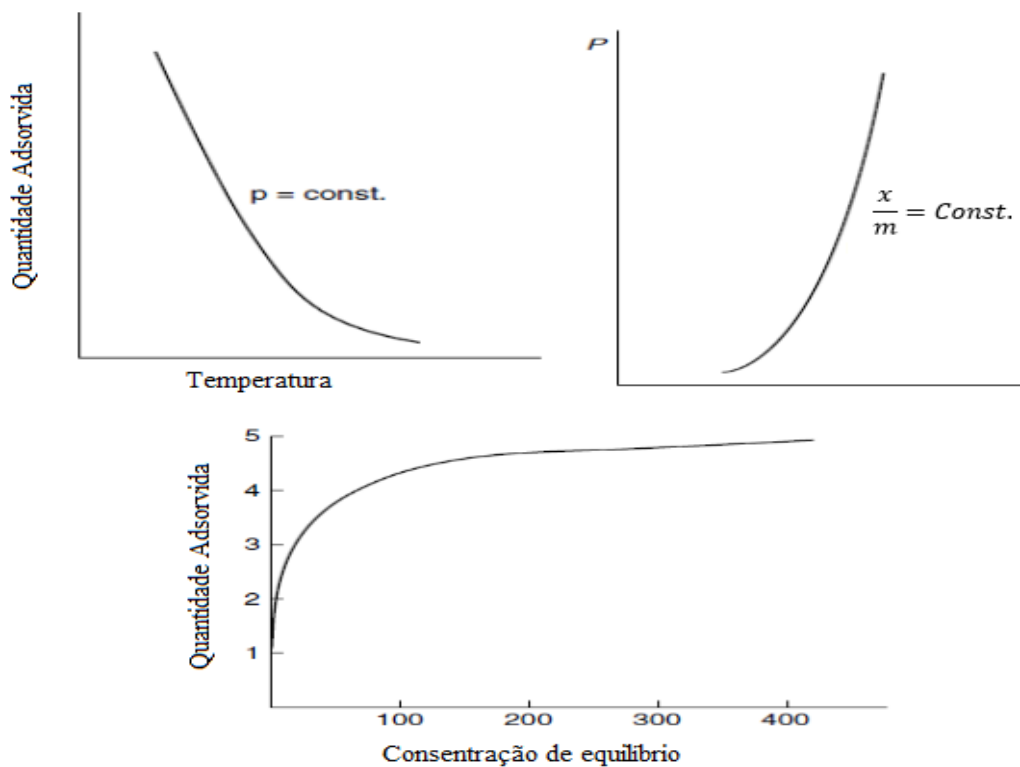
$$\frac{x}{m} = f(p, T) \quad (2.1)$$

Sendo,  $\frac{x}{m}$  a quantidade adsorvida por unidade de massa de adsorvente à pressão de equilíbrio e temperatura de adsorção. Podendo o equilíbrio de adsorção ser aproximado por três diferentes maneiras:

- Isoterma de Adsorção, com  $T = \text{Constante}$
- Isobar de Adsorção, com  $P = \text{Constante}$
- Isostere de Adsorção, com  $x/m = \text{Constante}$

Na Figura 2.7 são ilustradas as diferentes aproximações que podem representar o equilíbrio de adsorção.

Figura 2.7 Aproximações de equilíbrio de adsorção, acima (isostere à direita e isobar à esquerda) e abaixo (isoterma).



Fonte: Adaptado de Bansal e Goyal., (2005)

### 2.3.5 Isotermas de Adsorção

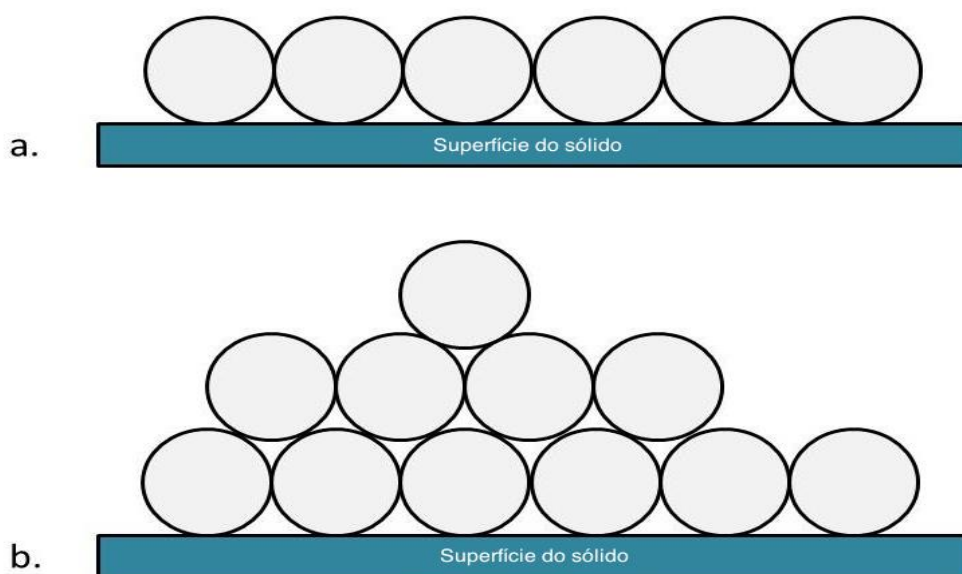
Segundo Foo e Hameed, (2010), uma isoterma de adsorção é uma curva que descreve o fenômeno de retenção (ou liberação) ou ainda a mobilidade, de uma substância a partir de um meio poroso. Sendo formulados ao longo dos anos, uma grande variedade de modelos de isotermas de equilíbrio (Freundlich, Langmuir, Brunauer–Emmett–Teller, Dubinin–Radushkevich, etc.), a partir de três aproximações fundamentais:

- A cinética
- A termodinâmica
- A teoria do potencial

Sendo interessante para a modelagem isotérmica, a derivação não apenas em uma aproximação, diferenciando e interpretando a física dos parâmetros do modelo.

Segundo Adolfo, (2015), a adsorção foi a priori descrita como monocamada por Freundlich (1909) e Langmuir (1916), depois de anos Brunauer, Emmett e Teller (1938) aperfeiçoando a teoria de Langmuir, descreveram a formação de multicamadas em um método que ficou conhecido pelas iniciais dos seus nomes (B.E.T). Na Figura 2.8a e 2.8b estão ilustrados respectivamente os modelos de Langmuir e B.E.T.

Figura 2.8 - Modelo de adsorção monocamada (a) segundo Langmuir e multicamada (b) segundo B.E.T.



Fonte: Adolfo, (2015)

Segundo Nguyen e Do., (2001) e Wu et al., (2014), a Equação 2.2 de Dubinin-Radushkevich (D-R) foi desenvolvida de maneira semi-empírica, e baseada na teoria de potencial de adsorção de Polanyi (1932), para descrever isotermas de adsorção, tendo sido amplamente utilizada para descrever o fenômeno da adsorção de vapores em sólidos micro porosos, sendo escrita da seguinte forma:

$$\frac{q^*}{q_s} = e^{\left[-\left(\frac{A}{E}\right)^2\right]} = e^{\left[-\left(\frac{RT \ln(x)}{E}\right)^2\right]} \quad (2.2)$$

Sendo,  $\frac{q^*}{q_s}$  o grau de preenchimento, onde  $q^*$  é o volume de adsorbato e  $q_s$  é o volume máximo que o adsorbato pode ocupar. Também com a letra A representando o potencial de adsorção, sendo  $A = RT \cdot \ln(x)$  onde,  $x = \frac{P}{P_0}$  que está em acordo com as condições termodinâmicas. E a letra “E” representando a energia característica, específica para o par adsortivo.

Segundo Do, (1998), a Equação (D-R) descreve bem sólidos carbonados ativados com um baixo grau de queimação. Porém para sólidos carbonados ativados por um alto grau de queimação, resultando em uma maior distribuição do tamanho dos poros, aumentando assim o seu grau de heterogeneidade. Para estes casos a Equação 2.3 que melhor se aplica, por permitir uma superfície heterogênea, foi proposta por Dubinin e Astakhov (D-A):

$$q^* = q_s \cdot e^{\left[-\left(\frac{A}{E}\right)^n\right]} \quad (2.3)$$

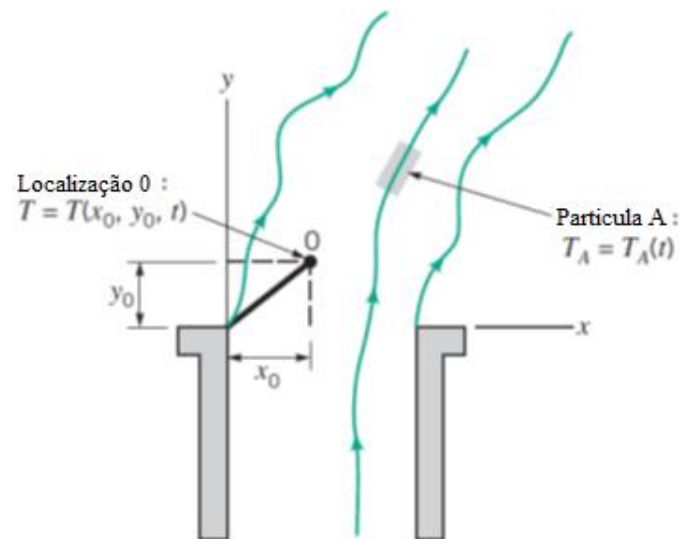
Sendo, n o parâmetro que descreve a heterogeneidade. Uma vez que dizemos que,  $n = 2$ , reduzimos a equação de D-A para a equação de D-R. Com o valor de “n” representando a relação entre a distribuição dos tamanhos dos poros com a largura da distribuição de energia. Com geralmente  $n < 2$  para carbonos ativados com micro poros

heterogêneos e  $n > 2$  para carbonos ativados com micro poros altamente homogêneos, tendo a grande maioria dos adsorventes compostos de carbono, o valor de  $n$  localizado no intervalo de 1 a 4.

## 2.4 CINEMÁTICA DO FLUIDOS

Existem duas maneiras de descrever o fenômeno do fluido em movimento, conforme descrito na Figura 2.9.

Figura 2.9 - Descrição Euleriana e Lagrangiana da temperatura num escoamento



Fonte: Adaptado de (Young et al., 2010)

A abordagem Lagrangiana considera o fluido um aglomerado de partículas que possuem uma pequena massa e são carregadas pelo escoamento com cada partícula evoluindo de forma diferente no tempo, considerando cada partícula como um sistema, portanto,  $T_A = T_A(t)$ , sendo este um método de descrição que acompanha a partícula. E na abordagem Euleriana é considerada a hipótese de que os fluidos podem ser tratados como um meio contínuo, em que há partículas individuais, mas um campo uniforme, e as propriedades em cada ponto do campo evoluem de forma diferente no tempo, cada ponto é um volume de controle, assim,  $T = T(x_0, y_0, t)$ , sendo este o método que foca as propriedades do escoamento em um determinado ponto no espaço como uma função do tempo.

As abordagens Euleriana e Lagrangiana estão relacionadas na Equação 2.4:

$$\underbrace{\frac{D\varphi}{dt}}_{\substack{\text{Evolução de uma} \\ \text{propriedade} \\ \text{qualquer} \\ \text{na partícula} \\ \text{no tempo} \\ \text{Abordagem Lagrangiana}}} = \underbrace{\frac{\partial\varphi}{\partial t}}_{\substack{\text{Evolução da} \\ \text{propriedade} \\ \text{no ponto no tempo} \\ \text{(Acúmulo)}}} + \underbrace{V \cdot \nabla\varphi}_{\substack{\text{Transporte de} \\ \text{propriedade} \\ \text{no ponto no tempo} \\ \text{(Advecção e Difusão)}}} \quad (2.4)$$

*Abordagem Euleriana*

## 2.5 EQUAÇÕES GOVERNANTES

Segundo Fox, R., et al (2012), as leis básicas aplicáveis a um fluido qualquer são:

- Conservação da massa
- Segunda lei do movimento de Newton
- Princípio da quantidade de movimento angular
- A primeira lei da termodinâmica
- A segunda lei da termodinâmica

A partir destas leis básicas, são encontradas as equações que governam a mecânica dos fluidos, equações estas conhecidas como: conservação de massa, conservação de momento e conservação de energia.

### 2.5.1 Equação da Conservação da Massa

A primeira equação que rege a dinâmica dos fluidos é a Equação 2.5 da conservação da massa:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho V) \quad (2.5)$$

Onde,  $\rho$  é a densidade do fluido e  $V$  é o vetor velocidade.

### 2.5.2 Equação da Quantidade de Movimento

A segunda equação que rege a dinâmica dos fluidos é Equação 2.6 da quantidade de movimento:

$$\rho \frac{DV}{Dt} = -\nabla P + \nabla \cdot \tau + S_M \quad (2.6)$$

Onde,  $-\nabla P$  é o gradiente pressão,  $\nabla \cdot \tau$  é o divergente do tensor de tensões e  $S_M$  é o termo fonte que pode ser devido à gravidade, força centrífuga, porosidade, etc.

### 2.5.3 Equação da Conservação da Energia

A terceira é a Equação 2.7 da conservação da energia:

$$\rho \frac{De}{Dt} = -\nabla \cdot (PV) + \nabla \cdot (\tau \cdot V) + \nabla \cdot (k\nabla T) + S_e \quad (2.7)$$

Onde,  $[-\nabla \cdot (PV) + \nabla \cdot (\tau \cdot V)]$  é a parcela referente ao trabalho realizado sobre o fluido,  $[\nabla \cdot (k\nabla T)]$  é a parcela referente a difusão de calor e  $S_e$  é o termo de geração ou termo fonte.

A Equação 2.8 considera que para uma propriedade qualquer  $\varphi$ , pode haver acúmulo, transporte por difusão e advecção bem como geração interna:

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t}}_{\text{Acúmulo}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho\varphi\mathbf{V})}_{\text{Advecção}} = \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma\nabla\varphi)}_{\text{Difusão}} + \underbrace{S_\varphi}_{\text{Fonte}} \quad (2.8)$$

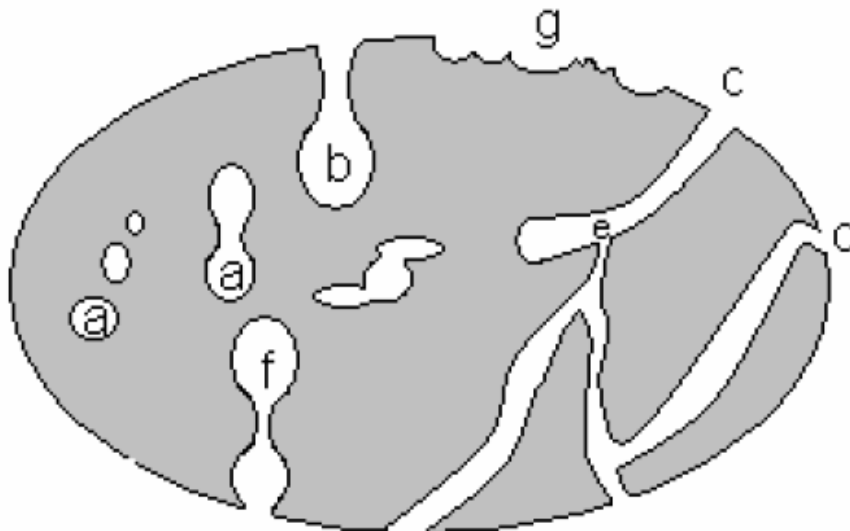
## 2.6 MEIO POROSO

Um meio poroso é um meio que contém vazios chamados poros, e sua estrutura mais comum é formada por uma matriz sólida e o poros preenchidos com fluidos.

De acordo com Alves; Gimenez; Ferreira, (2004), é possível classificar os poros segundo a sua disponibilidade a um fluido externo e segundo a sua forma geométrica,

assim temos o seguintes tipos de poros: abertos ou fechados, segundo a sua disponibilidade a um fluido externo. Sendo inativos os poros fechados, quanto ao fluxo de líquidos e gases, ainda assim estes exercem influência sobre as propriedades mecânicas, densidade e a condutividade térmica. Existem também os chamados poros “cegos”, aqueles que não têm abertura em uma das extremidades, eles também podem ser interconectados. Segundo sua forma geométrica eles podem ser: gargalo de garrafa, cilíndricos, afunilados e irregulares, é o que se observa na Figura 2.10. Vale a pena lembra que a rugosidade da superfície também pode ser considerada como porosidade.

Figura 2.10 Representação dos diferentes tipos de poro: (a) fechados, (b) gargalo de garrafa, (c) cilíndricos, (d) afunilados, (e) interconectados, (f) irregulares. A letra (g) representa a rugosidade da superfície.

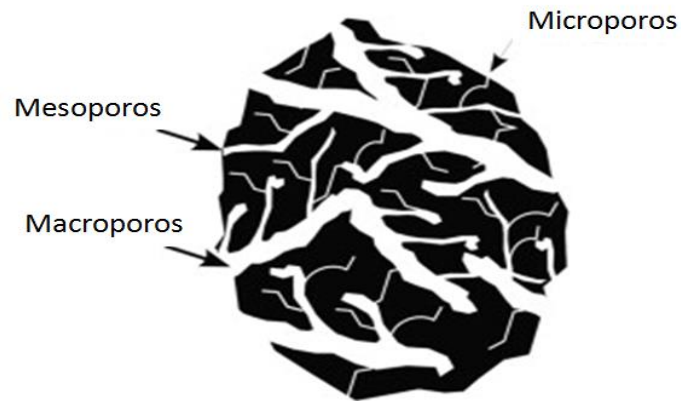


Fonte: (Alves; Gimenez; Ferreira, 2004)

Segundo Haber, (1991) outra classificação que os poros podem receber são de acordo com seus tamanhos, observados na Figura 2.11 da seguinte maneira:

- Macroporos – Poros com Largura > 50 nm.
- Microporos – Poros com Largura < 2 nm.
- Mesoporos – Poros com tamanhos intermediários (2 nm <Largura > 50 nm)

Figura 2.11 Representação esquemática da estrutura porosa de uma material adsorvente



Fonte: Adaptado de Hassan *et al.*, 2015.

### 2.6.1 Porosidade ( $\gamma$ )

A porosidade descrita na Equação 2.9, é a razão entre o volume dos poros (de espaços vazios) e o volume total.

$$\gamma = \frac{V_{Poros}}{V_{Total}} = 1 - \frac{V_{Grão}}{V_{total}} \quad (2.9)$$

Sendo, o volume total igual ao volume de poros mais o volume do grão, como pode ser visto na Equação 2.10:

$$V_{total} = V_{Poros} + V_{Grão} \quad (2.10)$$

### 2.6.2 Permeabilidade ( $\alpha$ )

A permeabilidade é a capacidade que um meio poroso tem para permitir o escoamento de um fluido. Ela pode ser representada como um número ou como uma matriz, sendo a forma mais correta uma matriz (tensor de segunda ordem) como na Equação 2.11:

$$\alpha = \begin{bmatrix} \alpha_{xx} & \alpha_{xy} & \alpha_{xz} \\ \alpha_{yx} & \alpha_{yy} & \alpha_{yz} \\ \alpha_{zx} & \alpha_{zy} & \alpha_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

Para um tensor permeabilidade qualquer, sempre existem direções  $x'$ ,  $y'$  e  $z'$  (direções principais) que tornam o tensor diagonal, a Equação 2.12 representa um tensor diagonal:

$$\alpha = \begin{bmatrix} \alpha_{x'/x'} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{y'/y'} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{z'/z'} \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

A permeabilidade pode ser classificada de duas maneiras, pode ser: isotrópica ou anisotrópica (direcional) e também pode ser homogênea ou heterogênea.

- Isotrópica: a permeabilidade é a mesma independente da direção principal, assim como pode ser visto na Equação 2.13:

$$\alpha = \begin{bmatrix} 10 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 10 \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

- Anisotrópica: a permeabilidade é diferente de acordo com a direção principal adotada, como exemplificado na Equação 2.14:

$$\alpha = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 35 & 0 \\ 0 & 0 & 18 \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

- Homogênea: a permeabilidade não varia no espaço, podendo ser isotrópica ou anisotrópica como exibido.

$$\alpha = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{bmatrix} \text{ ou } \alpha = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 35 & 0 \\ 0 & 0 & 18 \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

- Heterogênea: a permeabilidade varia com a posição no domínio.

$$\alpha = \begin{bmatrix} 3x - y & 0 & 0 \\ 0 & x + 3z & 0 \\ 0 & 0 & 4y \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

### 2.6.3 Viscosidade Efetiva ( $\mu_e$ )

O escoamento através dos poros introduz difusão de momento, e para modelar este fenômeno faz-se uso de uma viscosidade efetiva ( $\mu_e$ ) calculada a partir da Equação 2.17:

$$\mu_e = \mu_r \mu \quad (2.17)$$

Em que  $\mu_r$  é a viscosidade relativa e  $\mu$  é a viscosidade do fluido.

As Equações 2.18 a 2.20 representam os três principais modelos que relacionam a viscosidade relativa com a porosidade:

◦ Correção de Brinkman:

$$\mu_r = (1 - \gamma)^{-2,5} \quad (2.18)$$

◦ Fórmula de Einstein:

$$\mu_r = 1 + 2,5(1 - \gamma) \quad (2.19)$$

◦ Correlação de Breugem:

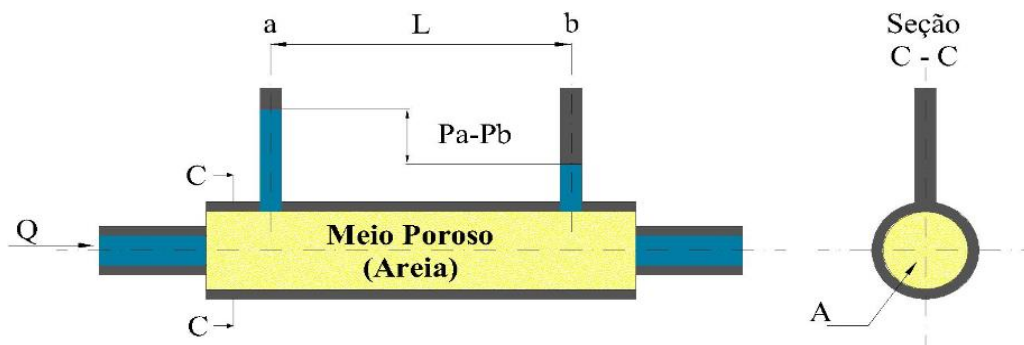
$$\mu_r = \frac{1}{2} \left( \gamma - \frac{3}{7} \right) \text{ para } \gamma \geq \frac{3}{7} \quad \text{ou} \quad \mu_r = 0 \text{ para } \gamma < \frac{3}{7} \quad (2.20)$$

Obs.: muitos estudos utilizam  $\mu_r = 1$  por falta de informação ou incerteza.

#### 2.6.4 Lei de Darcy

No ano de 1856, Henry Darcy publicou um estudo feito em leitos de areia, de forma experimental, para um meio isotrópico homogêneo e um escoamento muito lento, ou de Stokes ( $Re \ll 1$ ) com o comportamento linear entre a queda de pressão e a velocidade (efeitos viscosos predominantes) ele encontrou a Equação 2.21:

Figura 2.12 Experimento de Darcy



Fonte: Autor

$$Q = \frac{-\alpha A (P_b - P_a)}{\mu L} \quad (2.21)$$

A Equação 2.21, diz que a vazão,  $Q$ , é proporcional à área transversal do escoamento,  $A$ , à permeabilidade  $\alpha$ , à queda de pressão  $\Delta p = P_b - P_a$ , e é inversamente proporcional à viscosidade do fluido,  $\mu$  e ao comprimento do canal,  $L$ .

Reorganizando a equação de Darcy temos a Equação 2.22:

$$\frac{Q}{A} = \frac{-\alpha (P_b - P_a)}{\mu L} \quad (2.22)$$

Onde, o termo  $Q/A$  é a vazão por unidade de área, que também pode ser visto como velocidade média na área, uma vez que, a vazão é igual a velocidade vezes a área, como pode ser visto na Equação 2.23:

$$Q = VA \rightarrow V = \frac{Q}{A} = q \quad (2.23)$$

Onde 'q' é o fluxo de Darcy.

Como em um meio poroso, a área transversal deve ser considerada apenas  $\gamma A$  composta por fluido, que é exatamente a parte porosa. Sendo assim, a velocidade média real do fluido em um meio poroso será dada pela Equação 2.24:

$$V = \frac{Q}{\gamma A} \rightarrow q = \gamma V \quad (2.24)$$

Logo, para a velocidade no eixo X, encontra-se a Equação 2.25:

$$u = \frac{Q}{\gamma A} \quad \text{ou} \quad \frac{Q}{A} = \gamma u \quad (2.25)$$

Considerando um volume muito pequeno com dimensões infinitesimais onde a queda de pressão também será infinitesimal, teremos a Equação 2.26 para a velocidade direção x:

$$\frac{Q}{A} = -\frac{\alpha (P_b - P_a)}{\mu L} \rightarrow u = -\frac{\alpha_x dP}{\gamma \mu dx} \quad (2.26)$$

Logo, por consequência para as direções y e z, teremos as Equações 2.27 e 2.28:

$$v = -\frac{\alpha_y}{\gamma\mu} \frac{\partial P}{\partial y} \quad (2.27)$$

$$w = -\frac{\alpha_z}{\gamma\mu} \frac{\partial P}{\partial z} \quad (2.28)$$

Unindo as três equações em uma equação vetorial, obtém-se a Equação 2.29:

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = -\frac{\alpha}{\gamma\mu} \begin{bmatrix} \frac{\partial P}{\partial x} \\ \frac{\partial P}{\partial y} \\ \frac{\partial P}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (2.29)$$

Simplificando, encontramos a Equação 2.30 para a Lei de Darcy Tridimensional:

$$V = -\frac{\alpha}{\gamma\mu} \nabla P \rightarrow \nabla P = -\frac{\mu}{\alpha} \gamma V = -\frac{\mu}{\alpha} q \quad (2.30)$$

### 2.6.5 Equação de Darcy-Forchheimer

Devido à consideração de escoamento muito lento, para a Lei de Darcy, as forças inerciais não foram incluídas no modelo. Portanto havia ainda, erros quando o escoamento tinha Reynolds acima de 1. Forchheimer então propôs a adição de uma contribuição inercial (além da viscosa) na queda de pressão, para modelar melhor qualquer situação. Onde para um meio isotrópico homogêneo temos a Equação 2.31:

$$\nabla P = -\frac{\mu}{\alpha} q - \frac{1}{2} C\rho |q|q \quad (2.31)$$

Onde  $C$  é chamado de fator de resistência inercial.

Todavia, para um meio qualquer, a permeabilidade  $\alpha$  e o fator de resistência inercial  $C$  deixam de serem tratados como escalar, passando a serem tensores (matrizes) que permite assim escrever a Equação 2.32, uma forma mais genérica da equação de Darcy-Forchheimer:

$$\nabla P = -\mu\gamma(D \cdot V) - \frac{1}{2} \gamma^2 \rho (C |V|V) \quad (2.32)$$

Onde, as Equações 2.33 e 2.34 representam respectivamente os tensores da permeabilidade e do fator de resistência inercial:

$$D = \begin{bmatrix} \frac{1}{\alpha_x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\alpha_y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\alpha_z} \end{bmatrix} \quad (2.33)$$

$$C = \begin{bmatrix} C_x & 0 & 0 \\ 0 & C_y & 0 \\ 0 & 0 & C_z \end{bmatrix} \quad (2.34)$$

### 2.6.6 Equação de Ergun

Ergun S. (1952) apresentou uma formulação para as perdas de pressão, causadas pelas perdas de energia cinética e viscosa simultaneamente, com a Equação 2.35, podendo ser aplicável a todos os tipos de fluxo.

$$\frac{|\Delta P|}{L} = \frac{150 \mu}{D_P^2} \frac{(1 - \gamma)^2}{\gamma^3} q + \frac{1,75 \rho}{D_P} \frac{(1 - \gamma)}{\gamma^3} q^2 \quad (2.35)$$

Em um meio, em que a perda de carga é linear podemos considerar a Equação 2.36:

$$\frac{|\Delta P|}{L} = \left| \frac{\Delta P}{\Delta x} \right| = \left| \frac{\partial P}{\partial x} \right| \quad (2.36)$$

A Equação 2.37 apresenta uma correlação entre a equação de Ergun e a equação de Darcy- Forchheimer é utilizada para estimar os coeficientes de resistência viscosa e inercial para um leito fixo de esferas:

$$\frac{150 \mu (1 - \gamma)^2}{D_p^2 \gamma^3} q + \frac{1,75 \rho (1 - \gamma)}{D_p \gamma^3} q^2 = -\frac{\mu}{\alpha} q - \frac{1}{2} C \rho q^2 \quad (2.37)$$

Sendo que, os coeficientes de  $q$  e  $q^2$  devem ser iguais, logo teremos através das Equações 2.38 e 2.39 os valores para a permeabilidades e fator de resistência inercial:

$$\frac{150 \mu (1 - \gamma)^2}{D_p^2 \gamma^3} = -\frac{\mu}{\alpha} \rightarrow \alpha = \frac{D_p^2 \gamma^3}{150 (1 - \gamma)^2} \quad (2.38)$$

$$\frac{1,75 \rho (1 - \gamma)}{D_p \gamma^3} = \frac{1}{2} C \rho \rightarrow C = \frac{3,5 (1 - \gamma)}{D_p \gamma^3} \quad (2.39)$$

Onde  $\alpha$  é a permeabilidade e  $C$  é o fator de resistência inercial.

### 2.6.7 Equação da Conservação de uma Propriedade Genérica em um Meio Poroso.

Antes de mostrar as adaptações das equações algumas considerações importantes devem ser feitas a princípio como:

- Os efeitos de turbulência dentro de meios porosos são apenas aproximados.
- A porosidade será assumida como isotrópica.

- Não serão consideradas as interações entre o meio poroso e ondas de choque.

A Equação 2.40 representa a conservação de uma propriedade genérica:

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t}}_{\text{Acúmulo}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho\varphi\mathbf{V})}_{\text{Advecção}} = \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma\nabla\varphi)}_{\text{Difusão}} + \underbrace{S_\varphi}_{\text{Fonte}} \quad (2.40)$$

Tratando-se de um meio poroso o volume a ser considerado será apenas o volume que o fluido ocupa calculado a partir da sua porosidade pela Equação 2.41:

$$\delta V_{\text{fluido}} = \gamma \delta V_{\text{total}} = \gamma \delta x \delta y \delta z \quad (2.41)$$

Reconstruindo a equação da conservação de uma propriedade genérica para um escoamento em meio poroso, e assim adicionando a contribuição da porosidade em cada termo da Equação 2.40, teremos a Equação 2.42:

$$\underbrace{\frac{\partial(\gamma\rho\varphi)}{\partial t}}_{\text{Acúmulo}} + \underbrace{\nabla \cdot (\gamma\rho\varphi\mathbf{V})}_{\text{Advecção}} = \underbrace{\nabla \cdot (\gamma\Gamma\nabla\varphi)}_{\text{Difusão}} + \underbrace{\gamma S_\varphi}_{\text{Fonte}} \quad (2.42)$$

### 2.6.8 Equação da Conservação de Massa em um Meio Poroso

A partir da equação da conservação de uma propriedade genérica com a contribuição da porosidade em cada termo, e substituindo a propriedade genérica da equação ( $\varphi$ ) primeiramente por  $\varphi = 1$ , para assim encontrar a Equação 2.43:

$$\frac{\partial(\gamma\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\gamma\rho\mathbf{V}) + S_m = 0 \quad (2.43)$$

### 2.6.9 Equação da Quantidade de Movimento em um Meio Poroso

Agora a equação de conservação do movimento, a partir da equação de uma propriedade genérica em um meio poroso, é dada pela Equação 2.44:

$$\frac{\partial(\gamma\rho\mathbf{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\gamma\rho\mathbf{V}\mathbf{V}) = -\gamma\nabla p + \nabla \cdot (\gamma\boldsymbol{\tau}) + \gamma\mathbf{S}_M \quad (2.44)$$

Sabendo que, para um meio poroso há uma queda de pressão descrita pela Equação 2.45:

$$\mathbf{S}_{D-F} = -\frac{\gamma\mu}{\alpha}\mathbf{V} - \frac{1}{2}\gamma^2 C\rho|\mathbf{V}|\mathbf{V} \quad (2.45)$$

Sendo,  $\mathbf{S}_{D-F}$  o termo fonte correspondente à dissipação de momento para um escoamento em meio poroso, segundo as considerações da equação de Darcy-Forchheimer.

Incluindo esta contribuição do termo  $\mathbf{S}_{D-F}$  no lugar do termo  $\mathbf{S}_M$  na Equação 2.44, teremos a Equação 2.46:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\gamma\rho\mathbf{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\gamma\rho\mathbf{V}\mathbf{V}) \\ = -\gamma\nabla p + \nabla \cdot (\gamma\boldsymbol{\tau}) - \left( \frac{\gamma^2\mu}{\alpha}\mathbf{V} + \frac{1}{2}\gamma^3 C\rho|\mathbf{V}|\mathbf{V} \right) \end{aligned} \quad (2.46)$$

Onde,  $\frac{\gamma^2\mu}{\alpha}\mathbf{V}$  é a dissipação viscosa, e  $\frac{1}{2}\gamma^3 C\rho|\mathbf{V}|\mathbf{V}$  é a dissipação inercial.

Do ponto de vista computacional esta é, a equação mais custosa e mais completa. Todavia, em alguns casos os efeitos da porosidade podem ser desconsiderados na advecção e difusão de momento, com os efeitos da porosidade sendo levados em conta apenas no termo fonte, gerando um ganho computacional significativo.

### 2.6.10 Equação da Conservação da Energia em um Meio Poroso

Para a conservação da energia em um meio poroso existem duas abordagens: o modelo de equilíbrio e modelo de não equilíbrio, relacionados ao equilíbrio térmico entre a matriz sólida e o fluido. Sabendo que o modelo de não equilíbrio é mais complexo, ele será utilizado quando a diferença de temperatura for significativa, caso contrário é menos custoso utilizar o modelo de equilíbrio.

#### 2.6.10.1 Modelo de Equilíbrio

O modelo de equilíbrio, utiliza-se de uma condutividade térmica efetiva, e é formulado por uma única equação obtida resolvendo a Equação 2.47, de transporte energia:

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial T} + \nabla \cdot (V(\rho E + p)) = \nabla \cdot (k_{\text{eff}} \nabla T - \sum h_i J_i + \tau \cdot V) + S_f \quad (2.47)$$

Fazendo o uso das proporções de fluido e do meio sólido, baseado na porosidade encontra-se a Equação 2.48:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [\gamma \rho_f E_f + (1 - \gamma) \rho_s E_s] + \nabla \cdot [V(\rho_f E_f + p)] \\ = \nabla \cdot (k_{\text{eff}} \nabla T - \sum h_i J_i + \tau \cdot V) + S_f^h \end{aligned} \quad (2.48)$$

Onde, as parcelas  $\gamma \rho_f E_f$  e  $(1 - \gamma) \rho_s E_s$  do termo  $\frac{\partial}{\partial t} [\gamma \rho_f E_f + (1 - \gamma) \rho_s E_s]$ , são respectivamente a energia do fluido e a energia do sólido, sendo  $E_f$  a energia total do fluido e  $E_s$  a energia total do meio sólido. Com o termo referente a advecção de energia  $\nabla \cdot [V(\rho_f E_f + p)]$  (apenas para o fluido). Já o termo que trata da difusão de calor, considera uma condutividade térmica efetiva para o meio, sendo composto da seguinte forma:  $k_{\text{eff}} \nabla T$ . Os termos  $\sum h_i J_i$  e  $\tau \cdot V$  são referentes à difusão de entalpia no domínio e à dissipação viscosa, respectivamente, e  $S_f^h$  é o termo fonte de entalpia do fluido.

A condutividade térmica efetiva para um meio poroso isotrópico, é calculada por uma média ponderada pela porosidade, levando em conta a condutividade térmica do fluido e do sólido, calculada a partir da Equação 2.49:

$$k_{\text{eff}} = \gamma k_f + (1 - \gamma) k_s \quad (2.49)$$

Já a condutividade térmica efetiva para um meio poroso anisotrópico, pode ser calculada usando a média ponderada pela porosidade, da condutividade escalar do fluido e da matriz da condutividade do sólido, descrita na Equação 2.50:

$$[K_{\text{eff}}] = \gamma \begin{bmatrix} K_f & 0 & 0 \\ 0 & K_f & 0 \\ 0 & 0 & K_f \end{bmatrix} + (1 - \gamma) \begin{bmatrix} (K_{11})_s & (K_{12})_s & (K_{13})_s \\ (K_{21})_s & (K_{22})_s & (K_{23})_s \\ (K_{31})_s & (K_{32})_s & (K_{33})_s \end{bmatrix} \quad (2.50)$$

#### 2.6.10.2 Modelo de Não Equilíbrio

O modelo de não equilíbrio utiliza-se de 2 equações de energia, uma para o fluido e outra para o sólido.

A Equação 2.51 descreve a variação de energia para a parte fluida.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\gamma \rho_f E_f) + \nabla \cdot [V(\rho_f E_f + p)] \\ = \nabla \cdot (\gamma k_f \nabla T_f - \sum h_i J_i + \tau \cdot V) + S_f^h \\ + h_{fs} A_{fs} (T_s - T_f) \end{aligned} \quad (2.51)$$

Em que, os termos  $\frac{\partial}{\partial t} (\gamma \rho_f E_f)$  se refere ao acúmulo de energia,  $\nabla \cdot [V(\rho_f E_f + p)]$  se refere à advecção de energia,  $\gamma k_f \nabla T_f$  se refere à difusão de calor e  $\sum h_i J_i$  se refere à difusão de entalpia, no meio fluido.

O termo  $\tau \cdot V$  se refere à dissipação viscosa. E termo  $h_{fs} A_{fs} (T_s - T_f)$  é o termo fonte que acopla o campo de temperatura do sólido com o do fluido, realizando a troca térmica entre os dois.

Com a Equação 2.52, descrevendo a variação de energia para a parte sólida.

$$\frac{\partial}{\partial t} [(1 - \gamma)\rho_s E_s] = \nabla \cdot [(1 - \gamma)k_s \nabla T_s] + S_s^h + h_{fs} A_{fs} (T_f - T_s) \quad (2.52)$$

Onde o termo  $\frac{\partial}{\partial t} [(1 - \gamma)\rho_s E_s]$  se refere ao acúmulo de energia,  $(1 - \gamma)k_s \nabla T_s$  se refere à difusão de calor, no meio sólido. O termo  $h_{fs} A_{fs} (T_f - T_s)$  é o termo fonte que acopla o campo de temperatura do sólido com o do fluido, realizando a troca térmica entre os dois.

Neste capítulo, foi realizada uma pesquisa sobre os diversos assuntos, iniciando com um breve histórico sobre a tecnologia de refrigeração por adsorção, passando pelas vantagens e desvantagens desta tecnologia, ciclo teórico, continuando com a realização de um estado da arte, em seguida relatando os princípios da adsorção, cinemática dos fluidos, concluindo com o estudo dos meios porosos. Os conhecimentos adquiridos neste capítulo foram indispensáveis para embasar e alcançar os objetivos desta dissertação.

## CAPÍTULO 3

### 3 METODOLOGIA

Neste estudo foram simuladas a transferência de calor e massa envolvidas na adsorção de etanol em um leito de carvão ativado. O modelo proposto foi validado com um modelo já comprovado com validação experimental proposto por Mitra *et al.*, (2018).

#### 3.1 SOFTWARE E COMPONENTES

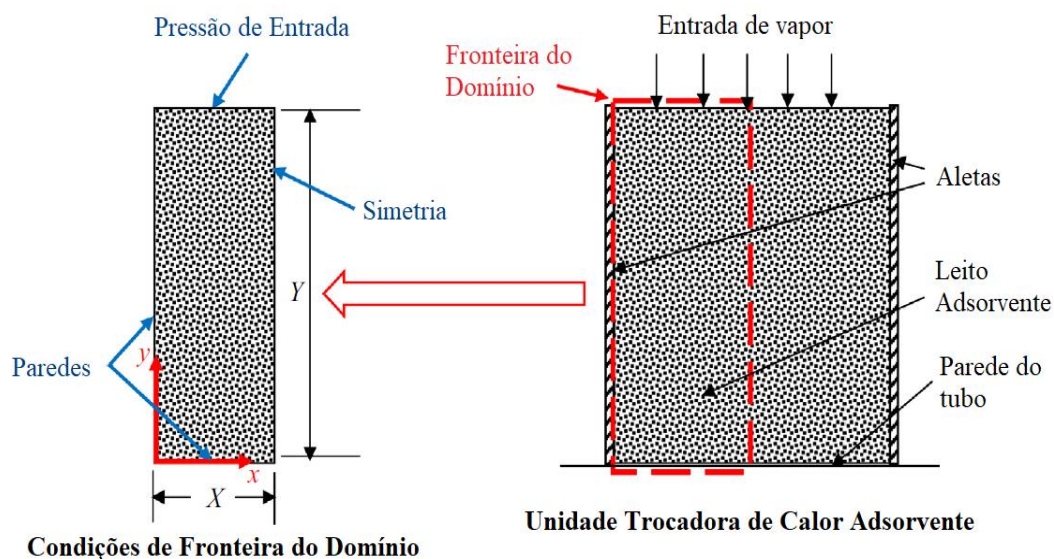
A simulação foi configurada fazendo uso do software gerenciador Ansys Workbench R15.0, a geometria foi desenhada no componente Design Modeler, a malha foi criada no Meshing. Em seguida, foi inserido no CFX-Pre o modelo matemático constituído das equações de isoterma e cinética de adsorção, confirmados na literatura e incorporadas às equações de conservação da massa, quantidade de movimento e da conservação da energia, também foram consideradas todas as condições de contorno dando início a fase de simulações.

#### 3.2 GEOMETRIA

A geometria foi desenhada da maneira como descrita no modelo o qual foi usado para validação proposto por Mitra *et al.*, (2018). Sendo o carbono ativado embalado no adsorvedor (um trocador de calor tubo aletado).

Na figura 3.1 podemos ver a geometria adotada por Mitra *et al.*, (2018), demonstrando esquematicamente o seu chiller de adsorção tubo aletado, que levou em consideração algumas simetrias, com o intuito de reduzir o tempo computacional fazendo com que a geometria fosse simplificada para uma coluna com a altura do domínio representando a altura das aletas, enquanto que a largura do domínio representa metade do passo entre as aletas.

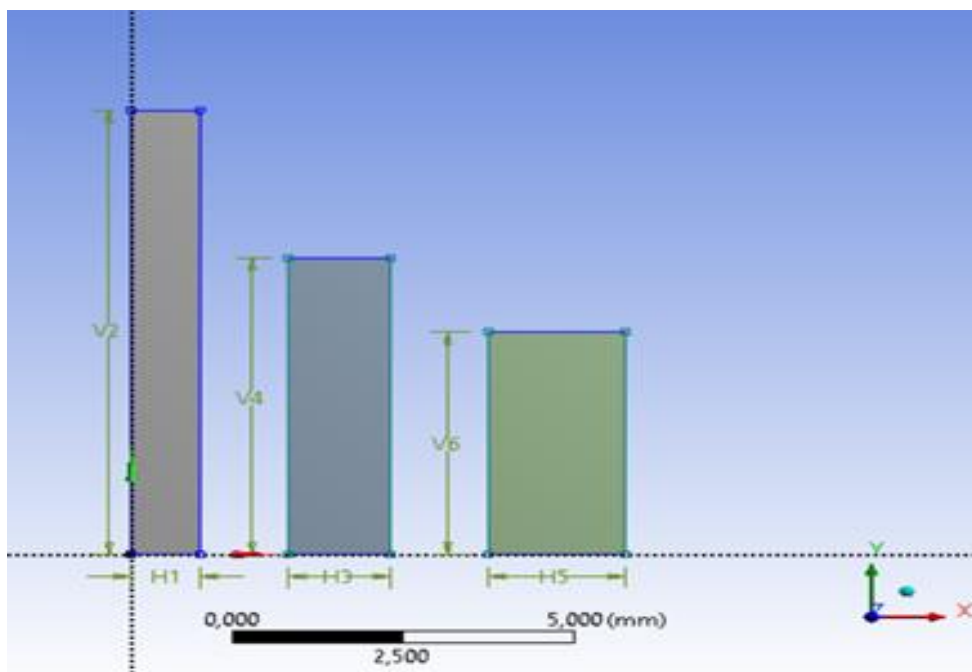
Figura 3.1 Desenho esquemático do *chiller* de adsorção tubo aletado adotado



Fonte: Adaptado de Mitra et al., (2018).

No presente trabalho foram consideradas três Domínios com variações diferentes de altura e largura, todavia com o mesmo volume, e a mesma área, com dimensões de altura das aletas pelas larguras de: 9x1mm (domínio I), 6x1,5mm (domínio II) e 4,5x2mm (domínio III) demonstrados na Figura 3.2.

Figura 3.2 - Desenho geométrico dos domínio I, II e III.



Fonte: autor

### 3.3 QUALIDADE DA MALHA

Para esta investigação foram geradas malhas para os três domínios considerados. Com diversos testes executados para verificar a qualidade das malhas a serem usadas, com a escolha feita a partir de resultados de qualidade ortogonal e desvio ortogonal.

Para todas as malhas o tamanho máximo do elemento escolhido foi de 0,05 mm. O domínio de simulação foi dividido em 3600 elementos e 7602 nós para o domínio I, 7502 nós para o domínio II e 7462 nós para o domínio III. O Ansys CFX reportou a seguinte qualidade da malha para os três domínios:

- I. Qualidade ortogonal mínima = 1, onde a qualidade ortogonal varia entre 0 e 1 e valores próximos a 0 corresponde a uma baixa qualidade.
- II. Máximo desvio ortogonal = 0,0000012074 onde o desvio ortogonal varia entre 0 e 1 e valores próximos de 1 corresponde a uma baixa qualidade.

Com os resultados dos testes reportados, foi confirmado que a malha apresentava uma ótima qualidade.

### 3.4 PREMISSAS

Para este estudo não foram consideradas quaisquer variações de temperatura ao longo da aleta ou da parede do tubo, assumindo assim essas paredes como isotérmicas e focando apenas no domínio poroso adsorvente. O meio poroso foi considerado como isotrópico e os coeficientes de perdas viscosas e inerciais foram calculados a partir das equações de Darcy-Forchheimer para fluxo através de um meio poroso.

As propriedades físicas como: condutividade efetiva, porosidade do meio poroso e viscosidade do etanol foram consideradas constantes durante o processo de adsorção. Consideramos que a fase adsorvida se comporta como fase líquido ocupando os volumes vazios.

### 3.5 MATERIAIS

Os materiais usados na simulação foram, o etanol como adsorvato (fase gasosa) e o carvão ativado Maxsorb III como adsorvente.

### 3.5.1 Etanol

A pressão de saturação do etanol para uma determinada temperatura foi considerada no Ansys CFX através da equação de Antoine Equação 3.1. Sendo segundo NIST, (2018) os parâmetros a, b e c para o intervalo entre 292,77K e 366,63K são respectivamente, 5,2468, 1598,673 e -46,424.

$$\log_{10} P_{Sat} = a - \frac{b}{T + c} \quad (3.1)$$

Para utilizar a equação acima é preciso estar ciente que a temperatura deve estar em Kelvin e o resultado da pressão de saturação será dado em bar.

### 3.5.2 Meio Poroso

O Material escolhido para compor o meio poroso, assim como no artigo que foi seguido como referência para validação é o carvão ativado do tipo Maxsorb III, e suas propriedades foram a densidade da partículas ( $\rho_p$ ), a capacidade calorífica específica ( $c_{p,p}$ ) e a condutividade térmica ( $K_p$ ).

#### 3.5.2.1 Densidade da Partícula

Sendo, segundo Jribi et al., (2017), uma massa de 0,259 kg de Maxsorb III empacotada em um espaço de  $9,867 \times 10^{-4} \text{ m}^3$ . Resultando em uma densidade aparente  $\rho_a = 262,47 \text{ kg m}^{-3}$ .

#### 3.5.2.2 Porosidade do adsorvente

Segundo Jribi et al., (2017) a porosidade do Maxsorb III é  $\gamma = 0,4345$ . Calculada a partir da Equação 3.2:

$$\gamma = 1 - \frac{\rho_a}{\rho_s} - v_\mu \rho_a \quad (3.2)$$

Onde, o termo  $\frac{\rho_a}{\rho_s}$  é o volume ocupado pelo sólido e o termo  $v_\mu \rho_a$  é o volume de micrósoros. Segundo Saha et al., (2011) o volume de micrósoros do Maxsorb III é  $v_\mu = 1,7 \text{ cm}^3\text{g}^{-1}$  e a densidade esquelética é  $\rho_s = 2200 \text{ kg m}^{-3}$ .

Segundo Jribi et al., (2017) a densidade da partícula é dada pela Equação 3.3:

$$\rho_p = \frac{\rho_s}{(1 + v_\mu \rho_s)} \quad (3.3)$$

Sendo, a densidade da partícula a razão entre a massa da partícula pelo volume da partícula incluindo o volume do micro poro. Encontrando assim  $\rho_p = 464,13 \text{ kg m}^{-3}$ .

Para Mitra et al., (2018), a porosidade  $\gamma = 0,38$  e a densidade do leite  $\rho_{leito} = 290 \text{ kg m}^{-3}$ . Com fins de validação adotaremos os valores de  $\gamma = 0,38$  e  $\rho_{leito} = 290 \text{ kg m}^{-3}$ .

### 3.5.2.3 Condutividade Térmica

Para Jribi et al., (2017), a condutividade térmica das partículas de adsorvente ( $K_p$ ) não será apenas a do adsorvente sólido ( $K_s$ ), mas dependerá também da quantidade de etanol adsorvido (q).

Segundo Ansys, (2009) o cálculo da condutividade térmica efetiva do meio poroso, e feito usando a Equação 3.4:

$$K_{eff} = \gamma K_g + (1 - \gamma) K_p \quad (3.4)$$

Com,  $K_g$  sendo a condutividade térmica do gás.

Sendo para Mitra et al., (2018),  $K_{eff} = 0,066 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ . Adotando assim também com fins de validação e já dito como premissa este valor como constante durante o processo de adsorção.

#### 3.5.2.4 Capacidade calorífica específica

De maneira análoga a capacidade calorífica da partícula de adsorvente ( $C_{p,p}$ ), depende da capacidade calorífica do sólido adsorvente ( $C_{p,s}$ ) e também da capacidade calorífica do adsorbato considerado como em fase líquida ( $C_{p,l}$ ). Sendo calculada pela Equação 3.5:

$$C_{p,p} = C_{p,s} + qC_{p,l} \quad (3.5)$$

Onde, para Biloe; Goetz e Mauran., (2001)  $C_{p,s} = 1375 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ .

Para Chakraborty et al., (2007) a capacidade calorífica da parte adsorvida e hora considerada como a capacidade calorífica do gás ( $C_{p,g}$ ) por alguns autores, assim como, por outros autores é considerada a capacidade calorífica do líquido ( $C_{p,l}$ ), podendo ainda ser considerado um valor intermediário.

Segundo Ansys, (2009) a capacidade calorífica do meio poroso pode ser calculada pela Equação 3.6:

$$(\rho C_p)_p = \gamma \rho_g C_{p,g} + (1 - \gamma) \rho_p C_{p,p} \quad (3.6)$$

Assim como Jribi et al., (2017) consideraram, para Mitra et al., (2018), a capacidade calorífica específica da fase adsorvida é considerada como a da fase líquida. Calculando a Capacidade Calorífica Específica do meio poroso, e encontrando o valor igual a  $0,82 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ . Assim com objetivo de validar, também o faremos considerando a capacidade calorífica do meio poroso segundo Mitra et al., (2018).

#### 3.5.2.5 Permeabilidade e Coeficiente de Perdas Inerciais

A permeabilidade ( $\alpha$ ) e o coeficiente de perdas inercias (C) são calculados segundo as Equações 3.7 e 3.8 obtidas a partir da equação semi-empírica de Ergun (Ergun, 1952), já comentada no capítulo 2:

$$\alpha = \frac{D_p^2 \gamma^3}{150 (1 - \gamma)^2} \quad (3.7)$$

$$C = \frac{3,5 (1 - \gamma)}{D_p \gamma^3} \quad (3.8)$$

Calculando para o diâmetro da partícula  $D_p = 30 \mu m$  e a porosidade  $\gamma = 0,38$  Obtém-se:

$$\alpha = 8,56e^{-13} m^2$$

$$C = 1318219,37114254 m^{-1}$$

### 3.6 EQUAÇÕES GOVERNANTES

Neste tópico são apresentadas as equações governantes da mecânica dos fluidos adaptadas para um meio poroso, e seus respectivos termos fontes consideradas na metodologia aplicada nesta dissertação.

#### 3.6.1 Equação de Conservação da Massa

A Equação 2.43 apresentada no capítulo 2 como equação da continuidade para um meio poroso com a adição de um termo fonte de massa, onde a Equação 3.9 representa este termo fonte correspondente a massa de gás de etanol que é adsorvida pelo meio poroso (acumulo). Segundo Mitra *et al.*, (2018) :

$$S_m = \rho_{leito} \frac{dq}{dt} \quad (3.9)$$

Com,  $\frac{dq}{dt}$  representando a taxa de adsorção de etanol no carvão ativado, aproximando de dados experimentais através da utilização da equação (LDF), usada por

(Jribi *et al.*, 2017; Mitra *et al.*, 2018), sigla que vem do inglês “Linear Driving Force”, que traduzindo seria algo como Força Motriz Linear, é dada pela Equação 3.11:

$$\frac{dq}{dt} = \frac{(q^* - q)}{\tau} \quad (3.10)$$

Sendo,  $q^*$ , o equilíbrio de adsorção encontrado pela equação de Dubinin-Astakhov (D-A), Equação 3.12:

$$q^* = q_s \exp \left\{ - \left[ \frac{RT}{E} \ln \left( \frac{P_s}{P} \right) \right]^n \right\} \quad (3.11)$$

Onde, segundo Jribi *et al.*, (2017),  $q_s = 1,2 \text{ kg kg}^{-1}$  é a quantidade saturação máxima,  $E = 139,5 \text{ kJ kg}^{-1}$  é a energia característica e  $n = 1,8$  é o parâmetro de heterogeneidade.

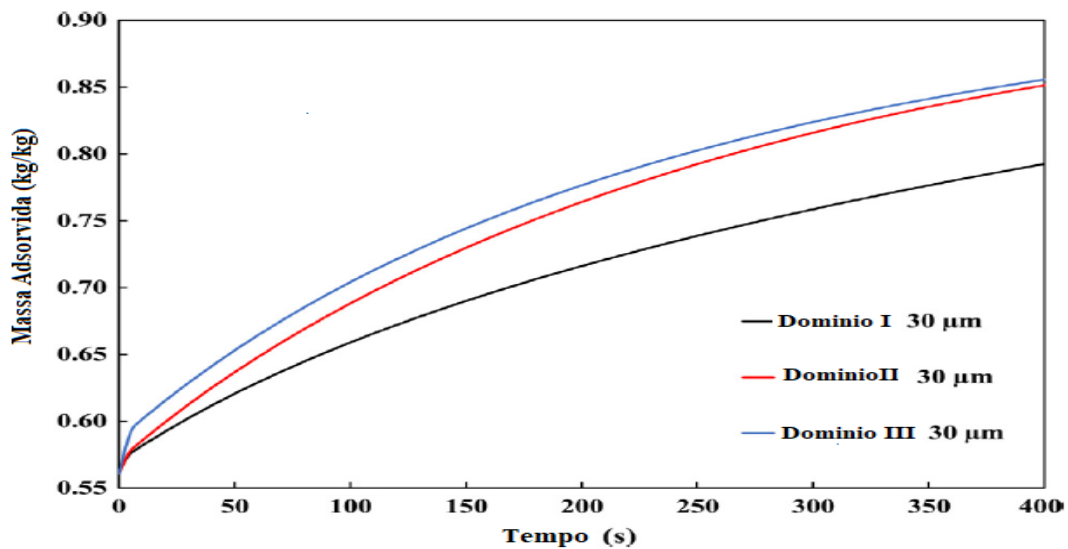
Com  $\tau$ , representando a constante de difusão no tempo encontrada por na Equação 3.13 de Arrhenius, calculada pela Equação 3.13:

$$\tau = \frac{d_p^2}{60 D_s \exp \left( - \frac{E_a}{RT} \right)} \quad (3.12)$$

Onde,  $d_p$  é o diâmetro da partícula,  $D_s = 1,972 \times 10^{-11}$  é a constante de difusão Pré-exponencial, e  $E_a = 225 \text{ kJ kg}^{-1}$  é a energia de ativação.

Para simplificar as equações em uma tentativa de evitar erros de interação numérica, foi aplicado um termo fonte oriundo de uma UF (*User Function*), que em português significa Função do Usuário, esta função foi extraída do Gráfico massa adsorvida (Kg/kg) em função do tempo (s) (Ver Figura 3.3), desenvolvido por (Mitra *et al.*, 2018), originado das equações de dinâmica de adsorção.

Figura 3.3 - Curvas de Adsorção em função do tempo



Fonte: Adaptado de Mitra et al., (2018)

Para a aplicação do termo fonte, foi necessário a utilização do programa computacional GetData Graph Digitizer para obtenção dos pontos do gráfico, em seguida a obtenção dos pontos das curvas de adsorção para os três domínios apresentados na Figura 3.2, foi criado no CFX uma UF, como uma função interpolação desses pontos, com intuito de multiplicando-se essa função interpolação  $f(t)$ , pela densidade do leito  $\rho_{leito}$  e pelo volume do domínio  $\forall$ , de maneira a formar um termo fonte de massa que represente o acúmulo fluido no meio poroso, sendo:

$$f(t) = [\text{kg de adsorvato} / \text{kg de adsorvente} * \text{s}],$$

$$\rho_{leito} = [\text{kg}/\text{m}^3]$$

$$\forall = [\text{m}^3]$$

Resultando no termo fonte de etanol  $S_m$  em  $[\text{kg}/\text{s}]$ . A ser considerado na equação de continuidade.

### 3.6.2 Equação da Quantidade de Movimento

A Equação 2.46 apresentada no capítulo 2 que representou a quantidade de movimento para um meio poroso Segundo ANSYS., (2009): onde o termo fonte  $S_{D-F}$  é referente a geração de movimento devido as perdas viscosas e inerciais.

### 3.6.3 Equação da Conservação da Energia

Segundo ANSYS., (2009) e considerando um equilíbrio térmico entre o sólido e o fluido, no meio poroso. A Equação 2.48 demonstrada no capítulo 2, foi utilizada para representar a conservação da energia em um meio poroso.

Onde,  $S_h$  é o termo fonte de calor que corresponde ao calor adicionado pelo processo de adsorção, que é um processo exotérmico.

A energia representada pela letra E é calculada pela Equação 3.16:

$$E = h + \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \quad (3.13)$$

A entalpia h é dada pela Equação 3.17:

$$h = \int_{T_{ref}}^T C_p DT \quad (3.14)$$

Com,  $S_h$  calculado através da Equação 3.18:

$$S_h = \rho_{leito} \frac{dq}{dt} Q_{st} = S_m Q_{st} \quad (3.15)$$

Aqui,  $Q_{st}$  representa o calor médio de adsorção do par etanol-carvão ativado, tipo Maxsorb III, calculado por Uddin et al., (2014), como  $Q_{st} = 1002,963 \text{ kJ kg}^{-1}$ .

Uma vez que o calor médio de adsorção é conhecido, o termo fonte  $S_h$  deve ser calculado da maneira análoga ao termo fonte  $S_m$ , também com o uso da Função Interpolação  $f(t)$ .

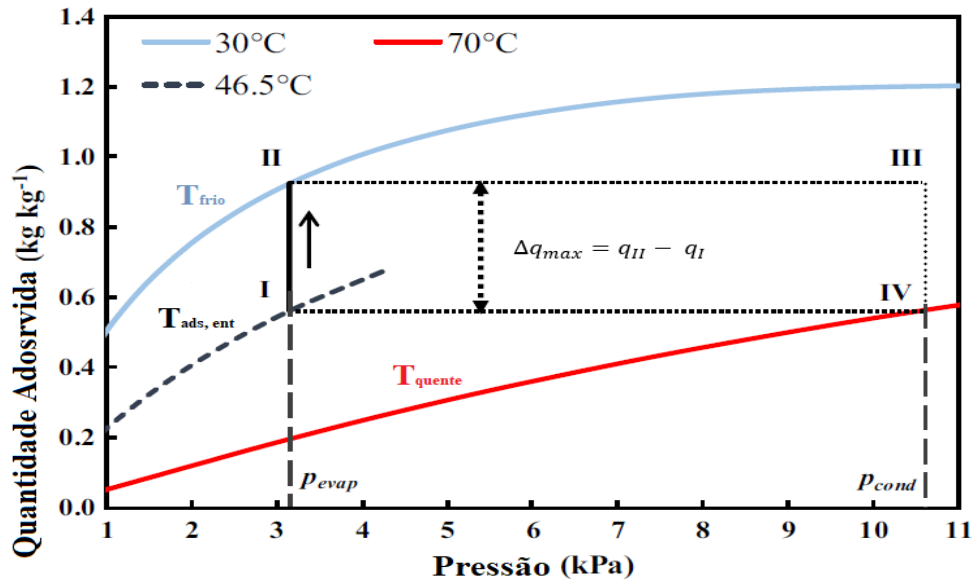
## 3.7 CONDIÇÕES DE CONTORNO

Neste trabalho a temperatura da fonte fria é  $T_{frio} = 30^\circ\text{C}$ , focando apenas no processo de adsorção  $I \rightarrow II$ , como pode ser observado na Figura 3.4 que representa o

ciclo de adsorção como um gráfico de quantidade adsorvida pela pressão, onde a diferença de temperatura imposta será ( $T_{Ads,ent} - T_{Frio}$ ).

A pressão no evaporador é de 3,2 kPa que corresponde a uma temperatura de saturação de 10 °C. E a pressão no condensador é  $P_{cond} = 10,6$  kPa que corresponde a pressão de saturação para  $T_{Frio}$ .

Figura 3.4 - Gráfico da Quantidade Adsorvida x Pressão



Fonte: Adaptado de Mitra et al., (2018)

A pressão de entrada do etanol no domínio durante o processo de adsorção é a  $P_{evap} = 3,2$  kPa. Com a temperatura inicial do domínio igual a  $T_{ads,ent} = 46,5$  °C.

Uma vez configuradas no CFX todas as condições de contorno, propriedades dos materiais, equações, funções e expressões (termos fontes), deu-se início as simulações, que foram primeiramente rodadas em regime permanente, preparando para simulação em regime transiente. Com os resultados das simulações apresentados no capítulo 4.

## CAPÍTULO 4

### 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo apresenta-se detalhadamente os resultados das simulações realizadas para os diferentes domínios citados no capítulo anterior. Destacado que todos os resultados apresentados a seguir, foram obtidos no instante  $t = 10s$ .

#### 4.1 GRADIENTES DE PRESSÃO

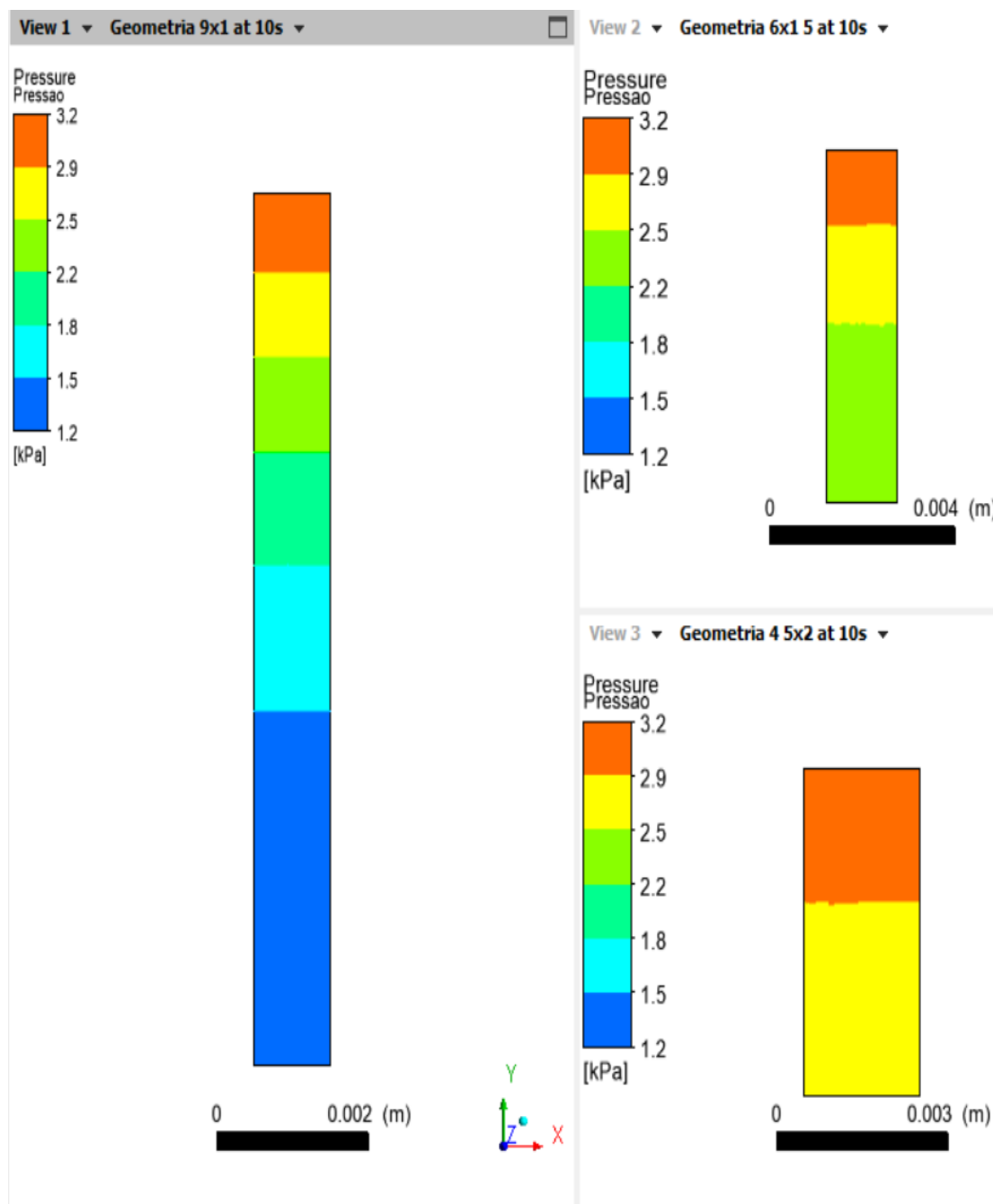
Os resultados encontrados para o gradiente de pressão, utilizando o CFX, referente aos três domínios, demonstram uma queda de pressão de 2 kPa para o domínio I, 0,92 kPa para o Domínio II, e de 0,52 kPa para o domínio III. Já, os respectivos números alcançados pelo referencial, obtidos com o Fluent, são aproximadamente os seguintes: 2 kPa, 1,7 kPa e 1 kPa.

Confrontando os resultados obtidos pelos dois softwares, citados no parágrafo acima, é possível concluir que para o primeiro domínio os resultados foram compatíveis, porém para nos demais existiu uma diferença de 45,88% para o domínio II e de 48% para o domínio III

Apesar da diferença encontrada para os domínios II e III, os comportamentos apresentados pelos três domínios, em ambas as simulações, foram iguais. Mostrando para o domínio I uma maior queda de pressão, enquanto que para o domínio III obteve-se uma menor queda, ou seja, para domínios mais altos e estreitos, se observa um maior gradiente de pressão.

Observando-se a Figura 4.1 verifica-se que o domínio III exibe uma queda de pressão menor se comparado com os demais domínios, com o maior gradiente de pressão exibido pelo domínio I.

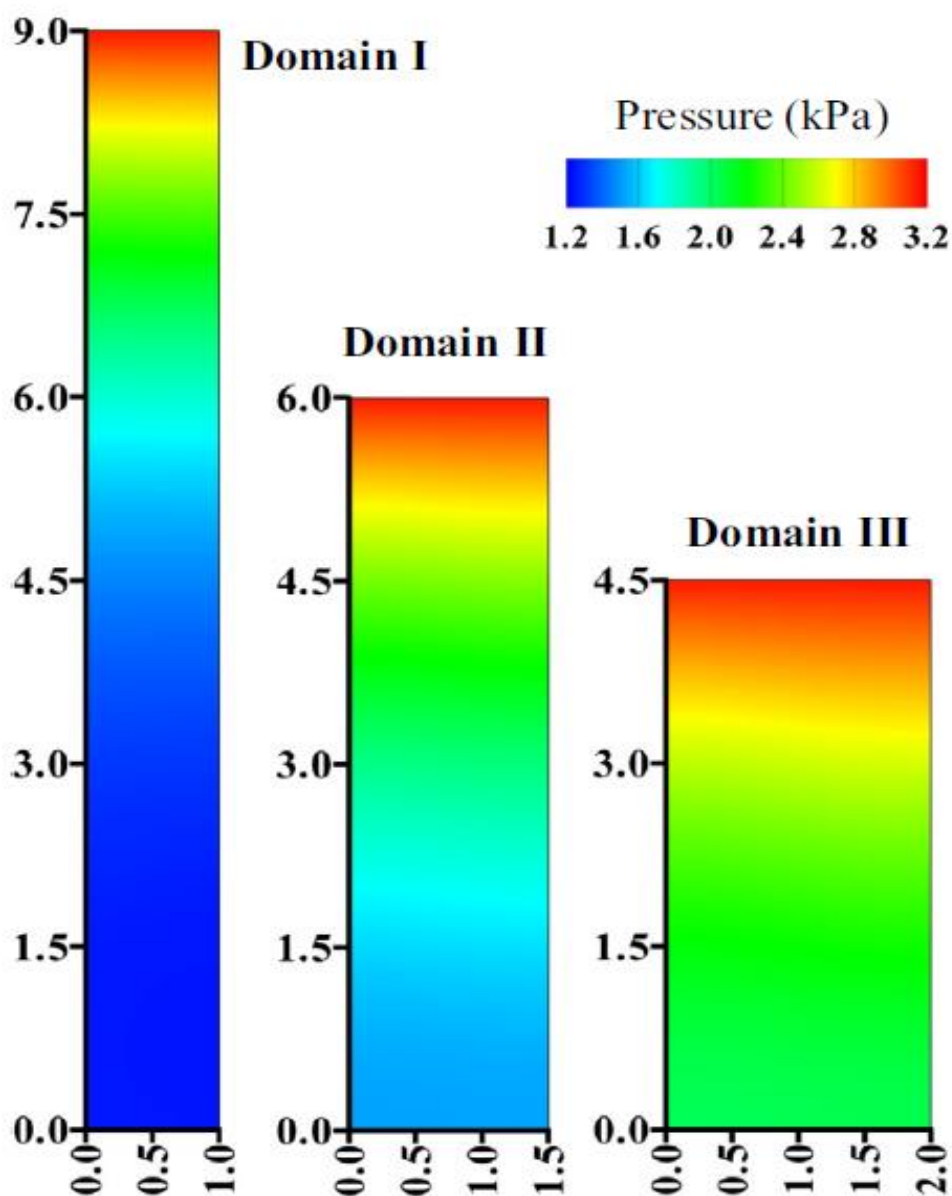
Figura 4.1 - Gradientes de pressão para os domínios I, II e III no instante  $t = 10$  s.



Fonte: Autor

Na Figura 4.2 observa-se que o referencial adotado encontrou o mesmo padrão de comportamento, constatando uma menor queda de pressão também no domínio III, já que o mesmo tem uma região de entrada de vapor mais larga.

Figura 4.2 - Gradientes de pressão para os domínios I, II e III, do Artigo Referência



Fonte: Mitra et al., (2018)

## 4.2 GRADIENTE DE TEMPERATURA

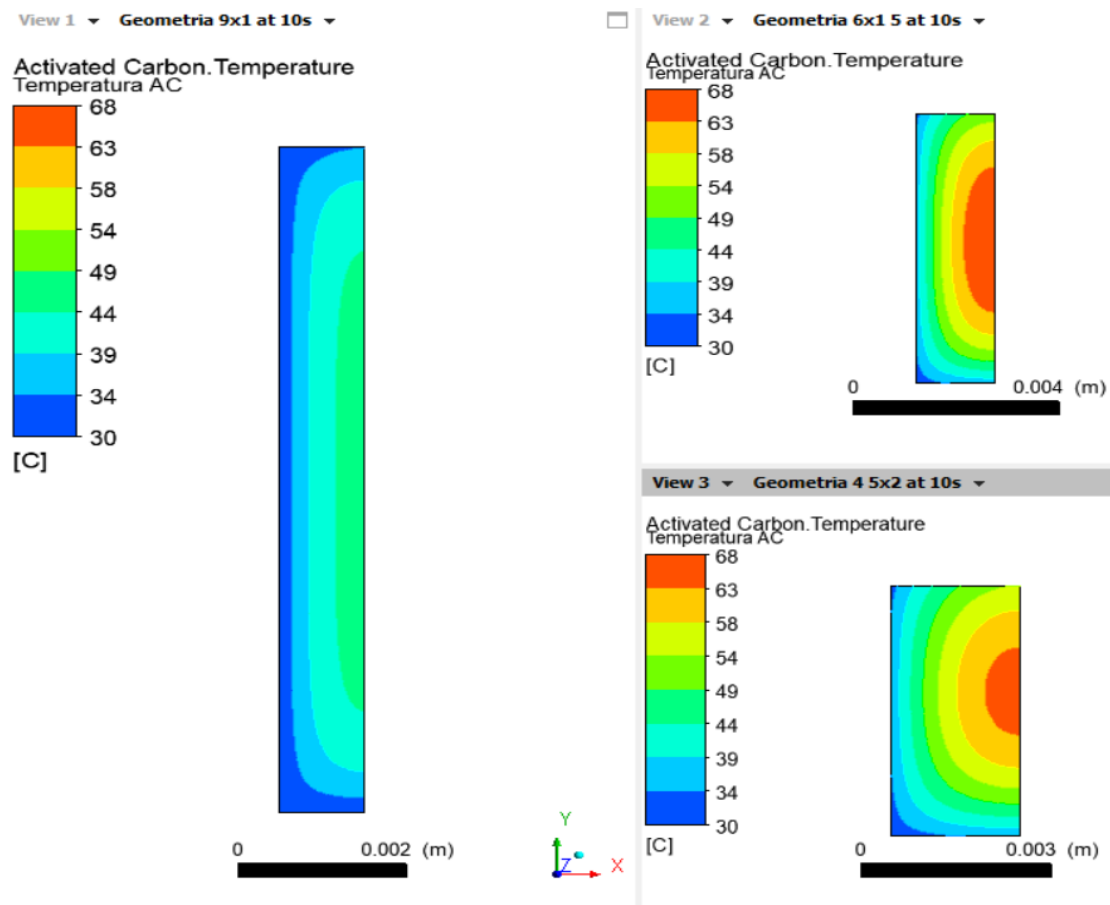
Os contornos de temperatura encontrados utilizando o CFX, para os três domínios apresentaram os seguintes intervalos de temperaturas mínimas e máximas: 30 °C até 45,85 °C para o domínio I, e 30 °C até 68 °C para os domínios II e III. Contudo, os respectivos valores encontrados pelo referencial, são de aproximadamente: 30 °C até 38 °C para o domínio I, 30 °C até 41 °C para o domínio II e 30 °C até 43 °C para o domínio III.

A diferença de 7,58 °C, 27 °C e 25 °C entre os resultados obtidos e os resultados de validação, para os respectivos domínios, mostram que enquanto os resultados simulados no CFX atingiram a temperatura máxima de 68 °C no domínio II e no domínio III, na simulação no Fluent a temperatura máxima foi exibida apenas no domínio III.

Mesmo assim, os contornos encontrados para a distribuição da temperatura nos três diferentes domínios, assim como os gradientes de pressão comentados no tópico anterior, exibiram também um comportamento semelhante ao desejado, observando uma distribuição mais uniforme da temperatura no domínio I, com o domínio III exibindo a sua região de temperatura mais elevada localizada distante das paredes isotérmicas frias.

Nas Figuras 4.3 é possível visualizar os contornos de temperaturas para os três domínios simulados, onde devido a uma área superficial mais alta, o domínio I apresenta uma distribuição de temperatura mais uniforme.

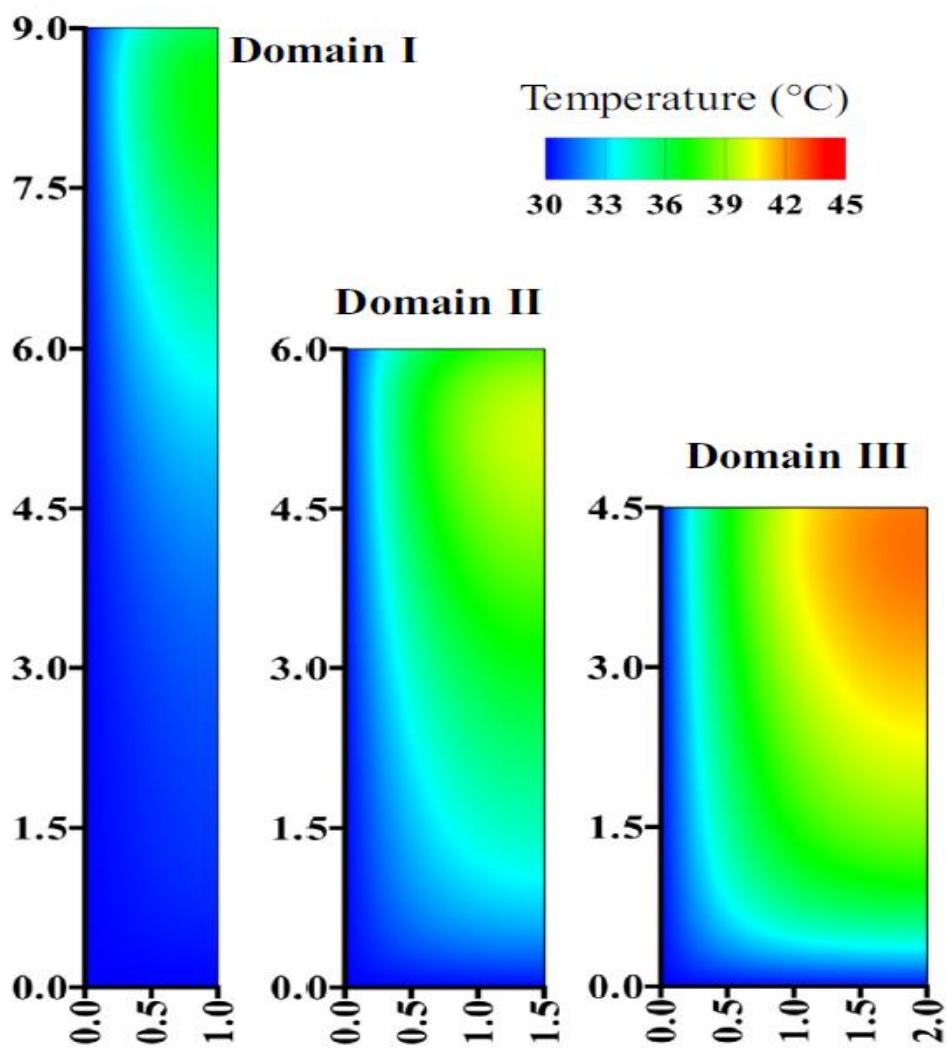
Figura 4.3 - Contornos de Temperaturas simulados para os três domínios no instante  $t = 10s$ .



Fonte: Autor

Olhando para a Figura 4.4 nota-se que o domínio III apresenta a região mais quente localizada distante das paredes isotérmicas frias, assim como verificado na simulação realizada nesta dissertação.

Figura 4.4 - Referencial para os contornos de temperaturas simulados para os três domínios no instante  $t = 10s$ .



Fonte: Mitra et al., (2018)

## CAPÍTULO 5

### 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS E PERSPECTIVAS FUTURAS

Neste capítulo, será discutido os métodos utilizados, assim como os resultados encontrados, expondo erros e acertos do modelo proposto. Além de apontar perspectivas para futuras pesquisas.

#### 5.1 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Nesta dissertação foi configurada no software comercial Ansys CFX, uma simulação para um leito adsorativo que trabalha com o par carvão ativado e etanol, através da aplicação de termos fontes nas equações de conservação de massa e de energia. Estes termos fontes foram desenvolvidos a partir de funções geradas pelos pontos das curvas representativas da massa adsorvida em função do tempo.

A simulação investigou a influência de diferentes proporções de altura e largura, mas mantendo o mesmo volume dos domínios considerados, na dinâmica de adsorção. Chegando aos seguintes resultados: o domínio mais alto e estreito exibiu um maior gradiente de pressão, enquanto que no domínio mais curto e largo o gradiente de pressão foi menos adverso. Já em relação aos gradientes de temperaturas, foi verificado que este último domínio expôs um maior gradiente de temperatura, enquanto que, o primeiro exibiu uma distribuição de temperaturas mais uniforme.

Destaca-se que os comportamentos dos perfis obtidos na simulação realizada nesta investigação estão de acordo com os comportamentos esperado, para os gradientes de pressão e temperatura, já comprovado na literatura existente.

A simulação CFX utilizou-se de um termo fonte escrito como uma expressão que considerava uma função (UF) interpolação dos pontos de uma curva representativa da massa adsorvida em função do tempo, no entanto, a referência realizou a sua experiência com o uso do software Fluent inserindo seu termo fonte via *User Defined Function* (UDF) que traduzindo para o português significa “Função Definida pelo Usuário”, através de programação escrita em linguagem C++.

Ressaltando que a inserção de termo fonte nesses programas não é feita da mesma forma, configurando assim, uma metodologia diferente para a configuração dos

parâmetros que foram adicionados nos programas, respeitando as condições de contorno e características dos materiais.

Assim, pode-se considerar que o modelo é válido para examinar o comportamento dos contornos obtidos, possibilitando, através de simulação CFX, a escolha da melhor configuração geométrica do domínio.

Este estudo trouxe para o Laboratório de Refrigeração por Adsorção (LABRADS) da UFPB, uma nova abordagem na maneira de estudar um trocador de calor adsorativo. Valendo destacar que, foi um estudo inovador que servirá de aporte técnico para futuras pesquisas no campo das simulações de dinâmica dos fluidos computacional ligadas aos sistemas de refrigeração por adsorção.

## 5.2 PERSPECTIVAS DE PESQUISAS FUTURAS

Pesquisas posteriores poderão tratar mais detalhadamente os seguintes assuntos:

Análises comparativas para diferentes tamanhos de partículas adsorventes e avaliar como os resultados são alterados uma vez que, o diâmetro médio da partícula influencia diretamente no fator de resistência inercial e na permeabilidade, consequentemente na queda de pressão escrita na equação de Darcy-Fourchheimer.

Desenvolvimento de uma programação em linguagem C, de maneira a acoplar o termo fonte em função da pressão e temperatura do domínio, considerando a equação de Dubinin-Astakhov, e com isso obter uma UDF para com o Fluent poder gerar as curvas características da taxa de adsorção. Obtendo-se assim, provavelmente, resultados mais próximos da realidade, permitindo também calcular a capacidade de resfriamento específica (SCC) e o coeficiente de eficiência (COP) para um sistema de refrigeração por adsorção.

## 6 REFERÊNCIAS

- ADOLFO, C. **MODELAGEM NUMÉRICA DE TANQUES DE ARMAZENAMENTO TÉRMICO APLICADA A SISTEMAS DE REFRIGERAÇÃO POR ADSORÇÃO**. [s.l.] UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA, 2015.
- ALAM, K. C. A.; SAHA, B. B.; KANG, Y. T.; AKISAWA, A.; KASHIWAGI, T. Heat exchanger design effect on the system performance of silica gel adsorption refrigeration systems. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 43, n. 24, p. 4419–4431, 2000.
- ALVES, O. L.; GIMENEZ, I. F.; FERREIRA, O. P. Desenvolvimento de ecomateriais: Materiais porosos para aplicação em Green Chemistry (Química Verde). *In*: ROSSI, P. T.; DE, R. H. (Eds.). **Química Verde En Latinoamérica**. Primeira ed. Buenos Aires, Argentina: IUPAC - International Union of Pure and Applied Chemistry e Inca - Consorzio Interuniversitario “La Chimica per l’Ambiente”, 2004. p. 110–127.
- AMMAR, M. A. H.; BENHAOUA, B.; BOURAS, F. Thermodynamic analysis and performance of an adsorption refrigeration system driven by solar collector. **Applied Thermal Engineering**, 2017.
- ANSYS. **Ansys Fluent 12.0 User’s Guide**. Southpointe: SAS IP, Inc., 2009.
- ANYANWU, E. E.; OGUEKE, N. V. Thermodynamic design procedure for solid adsorption solar refrigerator. **Renewable Energy**, v. 30, n. 1, p. 81–96, 2005.
- AUGIER, F.; LAROCHE, C.; BREHON, E. Application of computational fluid dynamics to fixed bed adsorption calculations: Effect of hydrodynamics at laboratory and industrial scale. **Separation and Purification Technology**, v. 63, n. 2, p. 466–474, 2008.
- BANSAL, R. C.; GOYAL, M. **Activated carbon adsorption**. [s.l.] Taylor & Francis, 2005.
- BILOE, S.; GOETZ, V.; MAURAN, S. Dynamic discharge and performance of a new adsorbent for natural gas storage. **AIChE Journal**, v. 47, n. 12, p. 2819–2830, 2001.
- CHAKRABORTY, A.; SAHA, B. B.; KOYAMA, S.; NG, K. C. Specific heat capacity of a single component adsorbent-adsorbate system. **Applied Physics Letters**, v. 90, n. 17, 2007.
- CHANG, W. S.; WANG, C. C.; SHIEH, C. C. Experimental study of a solid adsorption cooling system using flat-tube heat exchangers as adsorption bed. **Applied Thermal Engineering**, v. 27, n. 13, p. 2195–2199, 2007.

- CHOU DHURY, B.; SAHA, B. B.; CHATTERJEE, P. K.; SARKAR, J. P. An overview of developments in adsorption refrigeration systems towards a sustainable way of cooling. **Applied Energy**, v. 104, p. 554–567, 2013.
- DO, D. D. **Adsorption Analysis: Equilibria and Kinetics**. [s.l.] Imperial College Press, 1998. v. 2
- EPE. Balanço Energético nacional 2017: Ano base 2016, Relatório Síntese. **Empresa de Pesquisa Energética - Rio de Janeiro: EPE, 2017**, p. 61, 2017.
- ERGUN, S. **Fluid flow through packed columns** **Chem. Eng. Prog.**, 1952.
- FERNANDES, M. S.; BRITES, G. J. V. N.; COSTA, J. J.; GASPAR, A. R.; COSTA, V. A. F. Review and future trends of solar adsorption refrigeration systems. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 39, p. 102–123, 2014.
- FOO, K. Y.; HAMEED, B. H. Insights into the modeling of adsorption isotherm systems. **Chemical Engineering Journal**, v. 156, n. 1, p. 2–10, 1 jan. 2010.
- GOYAL, P.; BARENDAR, P.; MITTAL, A.; SIDDIQUI, A. R. Adsorption refrigeration technology – An overview of theory and its solar energy applications. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 53, p. 1389–1410, 2016.
- GRILO, M. B. **FUNDAMENTOS DA ADSORÇÃO Conceitos básicos**. Campina Grande, Paraíba: [s.n.].
- HABER, J. **MANUAL ON CATALYST CHARACTERIZATION**. **Pure & Appl. Chem.**, v. 63, n. 9, p. 1227–1246, 1991.
- HASSAN, H. Z.; MOHAMAD, A. A. A review on solar-powered closed physisorption cooling systems. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 16, n. 5, p. 2516–2538, 2012.
- HASSAN, H. Z.; MOHAMAD, A. A.; ALYOUSEF, Y.; AL-ANSARY, H. A. A review on the equations of state for the working pairs used in adsorption cooling systems. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 45, p. 600–609, 2015.
- INC, A. **ANSYS FLUENT 12.0 User's Guide**. 12.0 ed. [s.l.: s.n.].
- JRIBI, S.; MIYAZAKI, T.; SAHA, B. B.; KOYAMA, S.; MAEDA, S.; MARUYAMA, T. CFD simulation and experimental validation of ethanol adsorption onto activated carbon packed heat exchanger. **International Journal of Refrigeration**, v. 74, p. 345–353, 2017.
- MAHDAVIKHAH, M.; NIAZMAND, H. Effects of plate finned heat exchanger parameters on the adsorption chiller performance. **Applied Thermal Engineering**, v. 50, n. 1, p. 939–949, 2013.

- MITRA, S.; MUTTAKIN, M.; THU, K.; SAHA, B. B. Study on the influence of adsorbent particle size and heat exchanger aspect ratio on dynamic adsorption characteristics. **Applied Thermal Engineering**, v. 133, p. 764–773, 2018.
- NGUYEN, C.; DO, D. D. The Dubinin-Radushkevich equation and the underlying microscopic adsorption description. **Carbon**, v. 39, n. 9, p. 1327–1336, 2001.
- NIST. **National Institute of Standards and Technology | NIST**. Disponível em: <<https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C64175&Units=SI&Mask=4#ref-18>>. Acesso em: 20 abr. 2018.
- OLIVEIRA, R. G. **Solar Powered Sorption Refrigeration And Air Conditioning**. [s.l: s.n.].
- PANYAM, V. R.; BANKER, N. Thermodynamic assessment of a gas turbine power plant integrated with an adsorption refrigeration system. 2017.
- QADIR, N. UL; SAID, S. A. M.; MANSOUR, R. BEN. Modeling the performance of a two-bed solar adsorption chiller using a multi-walled carbon nanotube/MIL-100(Fe) composite adsorbent. **Renewable Energy**, v. 109, p. 602–612, 2017.
- RAMJI, H. R.; LEO, S. L.; ABDULLAH, M. O. Parametric study and simulation of a heat-driven adsorber for air conditioning system employing activated carbon-methanol working pair. **Applied Energy**, v. 113, p. 324–333, 2014.
- RIFFEL, D. B. **Estudo Teórico e Experimental da Dinâmica e da Otimização de Refrigeradores Térmicos por Adsorção**. [s.l.] Universidade Federal da Paraíba - UFPB, 2008.
- RIFFEL, D. B.; BELO, F. A.; LEITE, A. P. F. Ar condicionado solar por adsorção: Fundamentos e estado da arte. **I CBENS - I Congresso Brasileiro de Energia Solar**, 2007.
- SAHA, B. B.; BOELMAN, E. C.; KASHIWAGI, T. Computational analysis of an advanced adsorption-refrigeration cycle. **Energy**, v. 20, n. 10, p. 983–994, 1995.
- SAHA, B. B.; JRIBI, S.; KOYAMA, S.; EL-SHARKAWY, I. I. Carbon Dioxide Adsorption Isotherms on Activated Carbons. **J. Chem. Eng. Data**, v. 56, p. 1974–1981, 2011.
- SAKODA, A.; SUZUKI, M. Simultaneous Transport of Heat and Adsorbate in Closed Type Adsorption Cooling System Utilizing Solar Heat. **Journal of Solar Energy Engineering**, v. 108, p. 239–245, 1986.
- SAKODA, A.; SUZUKI, M. Fundamental study on solar powered adsorption cooling system. **Journal of chemical engineering of Japan**, v. 17, n. 1, p. 52–57, 1984.

SOARES, J. J. **DESENVOLVIMENTO DE UM CHILLER BIRREATOR POR ADSORÇÃO FÍSICA COM OTIMIZAÇÃO EXPERIMENTAL**. [s.l.] Universidade Federal da Paraíba - UFPB, 2017.

UDDIN, K.; EL-SHARKAWY, I. I.; MIYAZAKI, T.; SAHA, B. B.; KOYAMA, S.; KIL, H.-S.; MIYAWAKI, J.; YOON, S.-H. Adsorption characteristics of ethanol onto functional activated carbons with controlled oxygen content. **Applied Thermal Engineering**, v. 72, p. 211–218, 2014.

VODIANITSKAIA, P. J.; SOARES, J. J.; MELO, H.; GURGEL, J. M. Experimental chiller with silica gel: Adsorption kinetics analysis and performance evaluation. **Energy Conversion and Management**, v. 132, p. 172–179, 2017.

WANG, R. Z.; OLIVEIRA, R. G. Adsorption refrigeration-An efficient way to make good use of waste heat and solar energy. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 32, n. 4, p. 424–458, 2006.

WANG, Y.; LI, M.; DU, W.; JI, X.; XU, L. Experimental investigation of a solar-powered adsorption refrigeration system with the enhancing desorption. **Energy Conversion and Management**, v. 155, n. September 2017, p. 253–261, 2018.

WHITE, J. **CFD Simulation of Silica Gel and Water Adsorbent Beds Used in Adsorption Cooling System**. [s.l.] UNIVERSITY OF BIRMINGHAM, 2012.

\_\_\_\_\_. CFD Simulation and Experimental Analyses of a Copper Wire Woven Heat Exchanger Design to Improve Heat Transfer and Reduce the Size of Adsorption Beds. **Computation**, v. 4, n. 1, p. 8, 2016.

WU, F. C.; WU, P. H.; TSENG, R. L.; JUANG, R. S. Description of gas adsorption isotherms on activated carbons with heterogeneous micropores using the Dubinin-Astakhov equation. **Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers**, v. 45, n. 4, p. 1757–1763, 2014.

YOUNG, D. F.; MUNSON, B. R.; OKIISHI, T. H.; HUEBSCH, W. W. **A Brief Introduction To Fluid Mechanics**. 5 ed. ed. [s.l.] John Wiley and Sons Ltd, 2010. v. 5