



## Copyright 2004, Instituto Brasileiro de Petróleo e Gás - IBP

Este Trabalho Técnico Científico foi preparado para apresentação no 3º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás, a ser realizado no período de 2 a 5 de outubro de 2005, em Salvador. Este Trabalho Técnico Científico foi selecionado e/ou revisado pela Comissão Científica, para apresentação no Evento. O conteúdo do Trabalho, como apresentado, não foi revisado pelo IBP. Os organizadores não irão traduzir ou corrigir os textos recebidos. O material conforme, apresentado, não necessariamente reflete as opiniões do Instituto Brasileiro de Petróleo e Gás, Sócios e Representantes. É de conhecimento e aprovação do(s) autor(es) que este Trabalho será publicado nos Anais do 3º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás

---

# SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA INFLUENCIA DA CONVECÇÃO FORÇADA NO PROCESSO DE DESCARGA DE SISTEMAS DE GNA

M. R. A. Souza<sup>1</sup>, J. A. Lima<sup>2</sup>

<sup>1</sup> UFRN/CT/PPPGEM, Av. Senador Salgado Filho, sn Lagoa Nova, Natal/RN – 59078-970,  
[mrengmec@yahoo.com.br](mailto:mrengmec@yahoo.com.br)

<sup>2</sup> UFRN/CT/DEM, Av. Senador Salgado Filho, sn Lagoa Nova, Natal/RN – 59078-970,  
[jalima@ufrn.dem.br](mailto:jalima@ufrn.dem.br)

**Resumo** – Com o crescimento exponencial do mercado de gás natural para o uso em abastecimento automotivo, várias pesquisas tem sido desenvolvidas para o melhor aproveitamento dessa tecnologia. Um desses advenços consiste na aplicação de materiais microporosos (adsorventes) no interior dos tradicionais reservatórios que armazenam o referido combustível. Os benefícios da adsorção no armazenamento de gás natural veicular (GNV) são vantajosos quanto ao processo de estocagem, principalmente no que se refere à queda de pressão e conseqüente redução das tensões nas paredes do reservatório. Contudo, alguns problemas relativos ao uso do gás natural adsorvido (GNA) tem sido descritos na literatura especializada. Dentre todos os argumentos contrários à adoção desta alternativa de armazenamento, o mais crítico é a perda de autonomia do reservatório diante dos efeitos térmicos, característicos do sistema de GNA. Dessa forma, vários estudos tem sido desenvolvidos objetivando minimizar as variações de temperatura observadas nos ciclos de carga e principalmente de descarga de gás. Diante disto, o presente trabalho propõe uma análise comparativa entre dois modelos numéricos, descritos na literatura, que representam um processo de descarga em reservatórios de GNA, com posterior aplicação do modelo mais promissor na simulação do desempenho de cilindros do mercado brasileiro submetidos à estocagem por adsorção.

**Palavras-Chave:** Adsorção; Gás natural; Simulação numérica.

**Abstract** – With the growth of market of natural gas for automotive refueling use, several researches have been developed for a better use of that technology. One of those arrivals consists of the application of microporous materials (adsorbents) inside the reservoirs that store the referred fuel. The adsorption's benefits in the storage of natural gas vehicles offer many advantages as for storage process, principally in reference at pressure drop and consequent reduction of the stress in the wall of the tank. However, some problems in the use of adsorbed natural gas (ANG) have been described in the literature. Among everyone arguments contrary to the adoption of this storage alternative, the most critical is the loss of autonomy of the reservoir before the thermal effects. That is characteristics of ANG system. This way, several study have been developed objecting to minimize the variations of temperatures observed in the charge and, principally, discharge cycles of gas. Before this, the present work proposes a comparative analysis between two numerical models, described on the literature, which represents a discharge process in ANG tanks. After that, the most promising model was applied in the simulation of the performance of cylinders of Brazilian market submitted to adsorption process.

**Keywords:** Adsorption, Natural gas, Numerical simulation

## 1. Introdução

O alto custo dos combustíveis tradicionais, associado às questões de preservação ambiental, incentivou a busca de formas alternativas para o abastecimento automotivo. O gás natural (GN) tem representado uma considerável fatia deste mercado, com uma participação cada vez maior, principalmente nas grandes metrópoles mundiais. De acordo com Alcañiz *et al.* (2002), o GN pode ser disponibilizado comercialmente em diferentes meios de estocagem, onde cada um apresenta custos e desempenho característicos.

Embora o confinamento do GN na forma comprimida corresponda a apenas 25% da densidade energética da gasolina para um mesmo volume, a utilização desta classe de estocagem tem sido uma alternativa adotada no mundo inteiro. A consequência da viabilidade deste combustível se dá no armazenamento sob elevados valores de pressão, com variações entre 16 a 25MPa (Mota *et al.*, 1997), onde, para isso, se faz necessário tanques muito robustos e com formato geralmente cilíndrico para suportar os níveis de tensão produzidos. Diante da necessidade de minimizar os transtornos causados pelo gás natural comprimido (GNC), alguns materiais, denominados adsorventes, tem sido utilizado dentro dos cilindros, proporcionando a redução da pressão necessária à compressão do gás, sem que para isso haja uma perda significativa da sua capacidade de abastecimento. No entanto, estudos oriundos da literatura especializada descrevem problemas quanto à utilização dessa tecnologia, uma vez que os efeitos térmicos da adsorção comprometem o desempenho do sistema de gás natural adsorvido (GNA) inviabilizando sua aplicação (Mota *et al.*, 1997).

O maior desses problemas é a perda de capacidade ao longo dos ciclos de carga e descarga. Segundo Chang e Talu (1996), o calor de adsorção gerado durante a carga pode ser minimizado com um enchimento lento (durante a noite). Dessa forma, a quantidade de metano não adsorvido é minimizada de forma a não prejudicar a autonomia do tanque. Por outro lado, a desorção (adsorção negativa), é um processo endotérmico, logo, um elevado calor é requerido durante a descarga do gás, resultando, portanto, em um substancial resfriamento do sistema de GNA, uma vez que esse calor não é reposto. Essa queda de temperatura durante o processo de descarga favorece a permanência de uma quantidade residual de gás no interior do reservatório, representando até 35 % da capacidade máxima armazenada (Matranga *et al.*, 1991).

Uma alternativa proposta na literatura especializada para amenizar essas variações de temperatura, principalmente no ciclo de descarga, foi a aplicação de um dispositivo com convecção forçada no lado externo da parede do reservatório (Vasiliev *et al.*, 2000; Biloe *et al.*, 2001). Este dispositivo é utilizado para suprir o calor requerido pelo sistema de GNA durante o consumo do gás pelo motor e pode ser constituído pela recirculação dos gases de combustão desviados para fornecer o calor necessário ao processo em questão.

Diante deste contexto o presente trabalho se propõe a fazer uma análise comparativa de dois modelos numéricos disponíveis na literatura (Mota *et al.*, 1997; Biloe *et al.*, 2000), desenvolvidos para simular o processo de descarga em sistemas de GNA. Com base nestes modelos, é possível adicionar ou remover detalhes das equações para uma melhor representação do fenômeno da desorção. Obtendo-se, portanto, um novo modelo matemático utilizado para simular os efeitos térmicos oriundos de reservatórios comuns ao mercado brasileiro, onde seu desempenho é analisado frente à aplicação de adsorção com ou sem o recurso da convecção forçada.

## 2. Desenvolvimento do Modelo Matemático

No presente trabalho, o procedimento de descarga de gás em um reservatório do tipo CILBRAS® com 8 mm de espessura, dimensões entre 244 mm e 910 mm (diâmetro externo  $\times$  comprimento total), apresentando capacidade para 30 litros e adaptado ao sistema de adsorção é simulado com base nos modelos desenvolvidos por Mota *et al.* (1997) e Biloe *et al.* (2000). Esses modelos representam os efeitos da desorção, em reservatórios equipados com sistema de GNA, por meio de equações diferenciais parciais (EDP). A modelagem destas equações é normalmente constituída da formulação de balanços de massa e de energia para o sistema investigado dentro de um maior ou menor grau de detalhamento referente aos fenômenos de transferência envolvidos. A construção destes modelos é concebida de acordo com suposições que simplificam a representação da física do problema. Dessa forma, tem-se que:

- a) A razão entre o diâmetro e o comprimento, associada à presença de um difusor de gás (figura 1), faz com que o fluxo considerado seja unicamente na direção radial. Dessa forma o domínio do sistema se resume a condição unidimensional ao longo do raio do reservatório (Biloe *et al.*, 2001);
- b) As resistências entre as partículas são desprezadas para transferência de massa e calor, representando equilíbrio local entre a fase gasosa e o sólido poroso (Mota *et al.*, 1995). Dessa forma, não há necessidade da aplicação de balanço diferenciado de massa e energia para as fases de fluido adsorvido, fluido não adsorvido e adsorvente;
- c) As propriedades referentes ao gás natural são consideradas como sendo unicamente do metano. Isso se dá devido a grande quantidade deste gás presente na composição do gás natural, chegando a 95 % de sua composição total (Biloe *et al.*, 2001);
- d) O metano assume o comportamento de um gás ideal devido a seu coeficiente de compressibilidade ( $Z$ ) ser aproximadamente 97 % (Biloe *et al.*, 2002). Dessa forma, suas propriedades (calor específico, massa específica

- e viscosidade), bem como as propriedades do reservatório são consideradas constante na faixa de temperatura e pressão que vai de 0,1 a 3,5 MPa e 245 a 300 K respectivamente (Biloe *et al.*, 2001);
- e) A lei de Fourier rege o fluxo de calor no bloco adsorvente. Para o processo de descarga a lei de Darcy determina o fluxo de massa no meio poroso (Biloe *et al.*, 2001);
  - f) A convecção natural dentro do reservatório é desprezada (Mota *et al.*, 1997; Lamari *et al.*, 2000).

De acordo com as suposições descritas, o reservatório CILBRAS® pode ser discretizado, como ilustrado na figura 1, em um domínio unidimensional, onde seu comportamento dinâmico é regido pela solução das equações da conservação da massa e da energia.

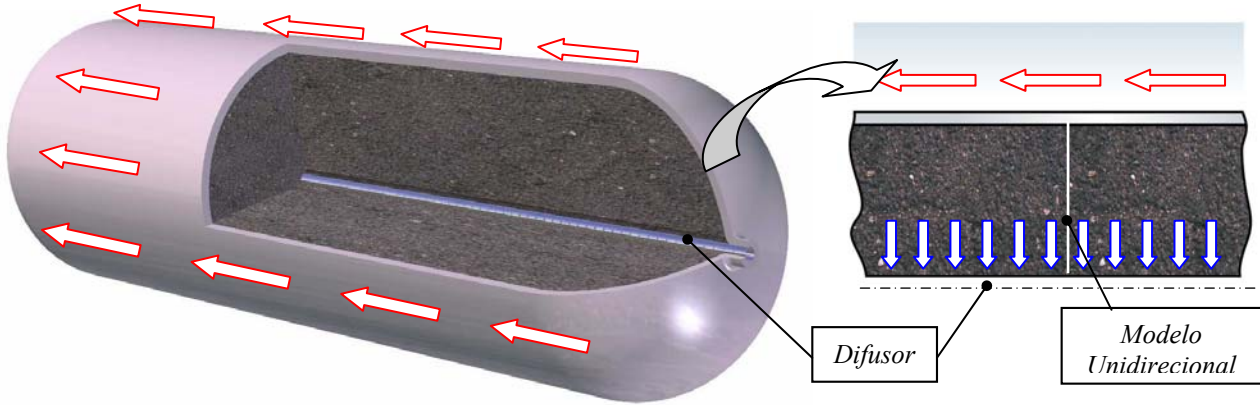


Figura 1. Esquema de discretização do reservatório CILBRAS® com a ilustração da convecção forçada (setas vermelhas), do escoamento através do difusor (setas azuis) e do domínio unidimensional (linha branca).

## 2.1. Balanços de Massa e Energia no Sistema de GNA

O modelo numérico proposto por Mota *et al.* (1997) para o processo de descarga considera nulo, o gradiente de pressão ao longo do raio do reservatório. Esta premissa torna desnecessária a aplicação da equação da conservação da massa no processo de simulação. Entretanto, para uma melhor representação do modelo experimental, proposto por Biloe *et al.* (2000), o presente estudo considera o balanço de massa envolvendo os termos relacionados ao adsorvente e ao metano, em sua fases comprimida e adsorvida, sendo expresso por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_t \rho_g + \rho_s q) + \nabla \cdot (\rho_g u_g) = 0 \quad (1)$$

Onde os termos derivados com relação ao tempo  $\varepsilon_t \rho_g$  e  $\rho_s q$  correspondem, respectivamente, à taxa de acumulação da fase gasosa e à taxa de gás na fase adsorvida. O termo  $\nabla \cdot (\rho_g u_g)$  representa o fluxo advectivo do gás na direção radial. Dentro desse contexto, a porosidade acessível ao gás ( $\varepsilon_t$ ) é função da quantidade adsorvida, sendo expressa por Biloe *et al.* (2002). A massa específica do gás não adsorvido ( $\rho_g$ ), dada em kg/m<sup>3</sup>, e a quantidade de metano desorvido ( $q$ ), dada em kg/kg, são respectivamente representadas, de acordo com o modelo proposto por Biloe *et al.* (2000), pela equação dos gases perfeitos, relacionando pressão ( $P$ ) e temperatura ( $T$ ), e pela isoterma de Dubinin-Astakhov. As propriedades referentes a esta equação, definidas experimentalmente por Biloe *et al.* (2000), são listadas na tabela 1. Logo:

$$\rho_g = \frac{M_g P}{RT} \quad (2)$$

$$q = W_0 \rho_a \exp \left[ - \left( \frac{RT \ln \left( \frac{P_s}{P} \right)}{E_0 \beta} \right)^n \right] \quad (3)$$

Onde  $W_0$  é o máximo volume que o gás adsorvido pode ocupar por unidade de massa de adsorvente. A variável  $\beta$  é o coeficiente de afinidade ou similaridade,  $E_0$  representa a energia característica para um fluido adsorvido e  $n$  é um parâmetro adimensional referente à distribuição de tamanho dos microporos (Do, 1998). Os termos  $\rho_a$  e  $P_s$  representam a massa específica do gás adsorvido, dada em kg/m<sup>3</sup>, e a pseudo pressão de saturação do metano (MPa), obtidos a partir das considerações propostas por Ozawa *et al.* (1976). A variável correspondente à velocidade superficial ( $u_g$ ), se restringe à equação de Darcy devido à baixa velocidade caracterizada pelo consumo do gás no reservatório (Mota, 1995).

Tabela 1. Propriedades dos parâmetros da isotema de Dubinin-Astakhov

| Parâmetro         | Valor                 | Referência                   |
|-------------------|-----------------------|------------------------------|
| $W_0 (m^3/kg)$    | $1,17 \times 10^{-3}$ | Biloe <i>et al.</i> , 2001   |
| $R (J/mol.K)$     | 8,31441               | Biloe <i>et al.</i> , 2001   |
| $E_0 (J/mol)$     | 15884                 | Biloe <i>et al.</i> , 2001   |
| $\rho_a (kg/m^3)$ | Eq. 2.17              | Ozawa <i>et al.</i> , 1976   |
| $P_s (MPa)$       | Eq. 2.16              | Ozawa <i>et al.</i> , 1976   |
| $\beta$           | 0,35                  | Stoekli <i>et al.</i> , 2000 |
| $n$               | 1,39                  | Biloe <i>et al.</i> , 2001   |

A equação de Darcy relaciona a queda de pressão em um meio poroso pela sua permeabilidade ( $k$ ) e a viscosidade do fluido ( $\mu$ ), dada por:

$$u_g = -\frac{k}{\mu} \nabla P \quad (4)$$

O balanço de energia no adsorvente é dado por:

$$C_{pa} \frac{\partial}{\partial t} ((\varepsilon_t \rho_g + \rho_s q) T) + \rho_s \frac{\Delta h}{M_g} \frac{\partial q}{\partial t} - \varepsilon_t \frac{\partial P}{\partial t} + \rho_s C_{ps} \frac{\partial T}{\partial t} + C_{pg} \nabla \cdot (T \rho_g u_g) - \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = 0 \quad (5)$$

A definição dos termos que formulam a Equação 5 é fundamentada, principalmente, pelo balanço proposto por Mota *et al.* (1997). Estes autores, ao contrario de Biloe *et al.* (2000), consideram, na equação da energia, o termo que corresponde à capacidade calorífica por unidade de volume da fase não adsorvida ( $C_{pa} \cdot \varepsilon_t \cdot \rho_g \cdot T$ ), proporcionando, portanto, uma melhor caracterização do fenômeno investigado no presente trabalho.

O adsorvente tomado como parâmetro para a simulação proposta no presente trabalho, consiste em um compósito onde é misturado um carvão ativado (PX-21®) altamente empacotado dentro de uma matriz de flocos de grafite com polímeros. Este bloco adsorvente foi utilizado e caracterizado por Biloe *et al.* (2000 e 2001), onde a grande vantagem de sua aplicação se dá no alto valor obtido no coeficiente de condutividade térmica ( $\lambda$ ) que, tradicionalmente, é muito baixo, prejudicando a troca de calor neste meio.

Dentro deste contexto, tem-se que:  $\rho_s$  representa a massa específica do meio poroso, fornecida em  $kg/m^3$ ,  $M_g$  é a variável correspondente à massa molar do metano dada em  $(kg/mol)$ . Os parâmetros  $C_{ps}$  e  $C_{pa}$  são as respectivas capacidades de calor do adsorvente e do gás adsorvido. No que se refere à capacidade calorífica do gás na fase adsorvida, Biloe *et al.* (2000) consideram que o valor atribuído a esta variável, corresponde ao valor característico da fase líquida, citado na tabela 2. Esta aproximação é considerada pelos autores devido à proximidade física que o fenômeno de adsorção apresenta em relação ao processo de condensação do gás (Ozawa *et al.*, 1976). Por fim, o parâmetro  $\Delta h$ , corresponde ao calor isostérico de adsorção, dado em  $J/kg$ .

Tabela 2. Propriedades dos parâmetros que representam o bloco adsorvente, o fluido adsorvido e o não adsorvido.

| Propried.          | Adsorvente <sub>(s)</sub> | Gás adsorvido <sub>(g)</sub> | Cilindro <sub>(w)</sub> | Referência                 |
|--------------------|---------------------------|------------------------------|-------------------------|----------------------------|
| $\rho (kg/m^3)$    | 450                       | Ozawa <i>et al.</i> , 1976   | 8238                    | Biloe <i>et al.</i> , 2001 |
| $C_p (J/kg.K)$     | 1241,25                   | 2316                         | 468                     | Biloe <i>et al.</i> , 2001 |
| $\Delta h (J/mol)$ | -                         | -16000                       | -                       | Biloe <i>et al.</i> , 2001 |
| $\lambda (W/m.K)$  | 7,3                       | -                            | -                       | Biloe <i>et al.</i> , 2001 |
| $k (m^2)$          | $1 \times 10^{-14}$       | -                            | -                       | Biloe <i>et al.</i> , 2001 |
| $\mu (kg/m.s)$     | -                         | $1,25 \times 10^{-5}$        | -                       | Mota <i>et al.</i> , 1997  |
| $M_g (kg/mol)$     | -                         | $1,604 \times 10^{-2}$       | -                       | Mota <i>et al.</i> , 1997  |

Como condições iniciais para o processo de descarga do gás tem-se:

$$T(r, t = 0) = T_0 \quad (6)$$

$$P(r, t = 0) = P_{carga} \quad (7)$$

Onde  $T_0$  e  $P_{carga}$  são a temperatura inicial do sistema e a pressão no interior do reservatório antes da abertura da válvula, respectivamente. As condições de contorno aplicadas ao modelo são dadas por:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=r_0} = 0 \quad (8)$$

$$e_w C_{pw} \rho_w \frac{\partial T}{\partial t} = h_w (T_{fluido} - T_{\eta}) - \lambda \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=r_1} \quad (9)$$

Onde  $e_w$  e  $\rho_w$  representam a espessura e a massa específica do reservatório,  $h_w$  corresponde ao coeficiente de transferência de calor por convecção, resultante do escoamento dos gases externos à parede do cilindro, dado em  $W/m^2.K$ , e  $\lambda$  é o parâmetro correspondente a condutividade térmica do bloco adsorvente, dado em  $W/m.K$ .

## 2.2. Metodologia de Solução do Modelo Matemático

Os resultados que caracterizam a solução numérica foram obtidos por meio de um algoritmo adaptado à linguagem de programação C++®, onde um sistema algébrico constituído de equações discretas segundo a formulação proposta por Patankar (1980), é solucionado por aplicação do método direto de eliminação de Gauss.

A não-linearidade, presente nas equações 1 e 5, associada ao valor desconhecido de pressão no difusor de gás, conduz a dois processos iterativo dentro de cada passo de tempo. O primeiro “laço” de iterações se justifica para minimizar as não-linearidades entre os termos que constituem a matriz. A cada nível de iteração os valores dos coeficientes da matriz mudam. Portanto é necessário comparar os novos valores de pressão e temperatura com os valores calculados em um nível imediatamente anterior de iteração, até que a diferença relativa entre os níveis vigente e anterior dos dois parâmetros alcancem uma convergência de 0,1 %, de maneira que os coeficientes da matriz não mudem dentro desta tolerância. Uma vez obtida a convergência do primeiro “laço” tem-se início o segundo processo iterativo, objetivando a determinação de um valor satisfatório da pressão prescrita no difusor de gás ( $P_{Difusor}$ ), que é usada como segunda condição de contorno para o balanço de pressão. A convergência do segundo “laço” é alcançada quando a vazão mássica no difusor se torna igual à vazão mássica na boca do reservatório, dentro da mesma tolerância utilizada no primeiro ciclo.

## 3. Resultados e Comentários

De acordo com a figura 2, o modelo proposto (em azul) apresenta maior proximidade com a curva experimental (pontos) nos perfis de pressão e temperatura. Isso se deve a uma confecção mais completa do modelo oriundo do presente estudo.

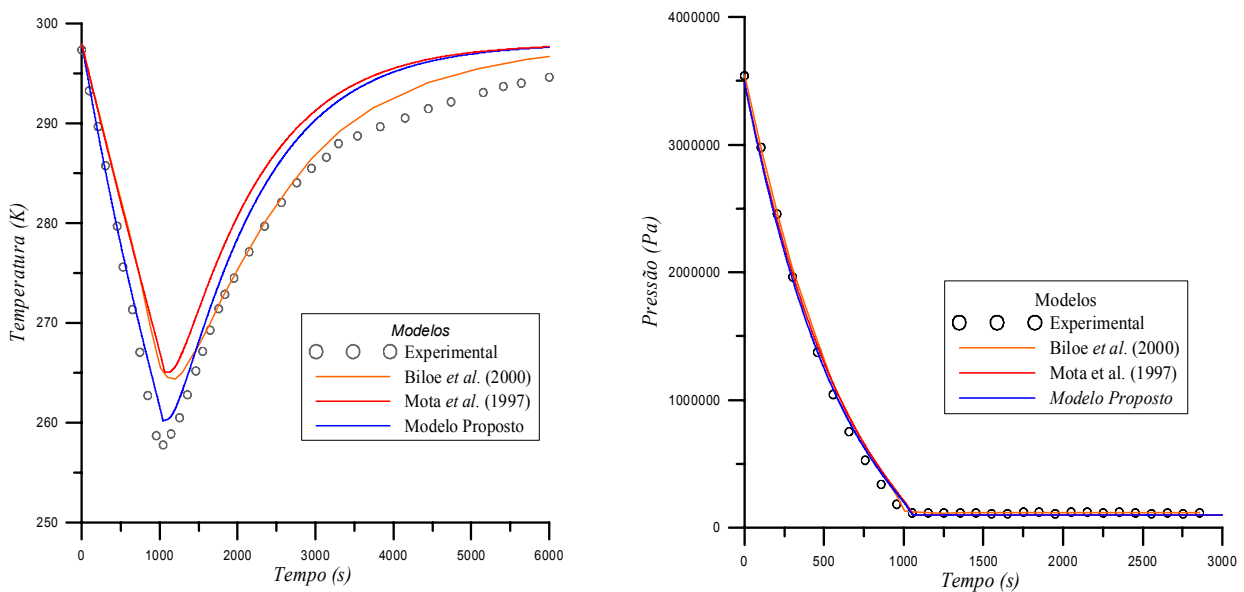


Figura 2. Validação do modelo aplicado ao cilindro CILBRAS perante dados experimentais de temperatura (esquerda) e queda de pressão na região do difusor de gás (direita).

A partir da validação do modelo, os efeitos do dispositivo de convecção forçada puderam ser avaliados. O sistema foi simulado com a aplicação da passagem dos gases de combustão pela parede do reservatório, representando convecção forçada ( $h_w = 80 W/m^2.K$ ), e com o coeficiente de transferência de calor por convecção mais baixo, enfatizando a convecção natural a temperatura ambiente ( $h_w = 80 W/m^2.K$ ). Os efeitos referentes aos dois modelos podem ser verificados na figura 3, onde a temperatura foi obtida em dois pontos para cada modelo. No difusor, a

temperatura é sempre mais baixa devido ao forte efeito advectivo provocado pela passagem do gás enquanto que a parede do reservatório mantém uma temperatura mais elevada devido ao fluxo que vem de fora para dentro do reservatório.

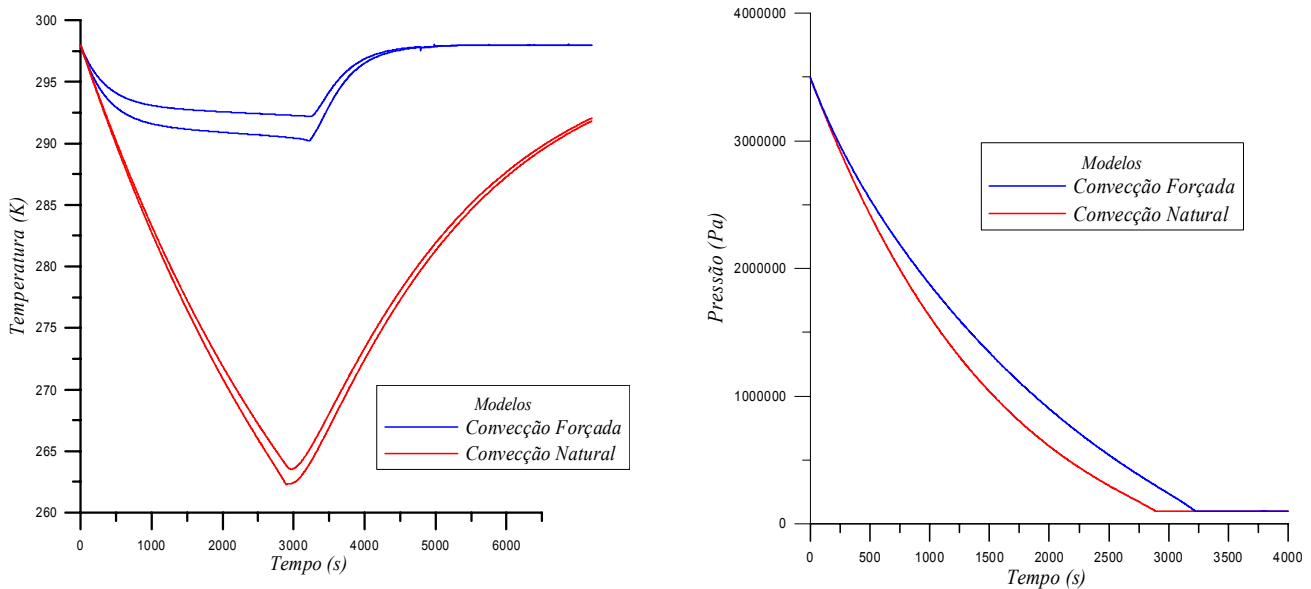


Figura 3. Efeitos da convecção forçada aplicada à parede do reservatório CILBRAS®. A esquerda, a comparação entre o desempenho na estabilização da temperatura, no difusor de gás e na parede do reservatório, para os modelos com convecção forçada (azul) e com convecção natural (vermelho). A direita a queda de pressão para os mesmos modelos.

### 3.1. Análise de Eficiência nos Modelos Propostos

Diante do desempenho dos modelos, quanto às curvas de temperatura e pressão, se fez necessário o uso de um indicador do desempenho do sistema de GNA, nas duas configurações propostas. Este indicador quantifica o impacto do calor de adsorção no desempenho global, que é medido pela eficiência dinâmica do reservatório, expressa por:

$$\eta = \frac{V/V_{Dinamico}}{V/V_{Isoterma}} \quad (10)$$

Onde  $V/V$  representa a relação entre o volume de gás descarregado em condições ambientais e o volume do adsorvente, dado em  $m^3$  (Chang e Talu, 1996).

## 4. Conclusões

O impacto da passagem dos gases de combustão pela face externa da parede do reservatório é substancial para o bom desempenho do sistema de GNA, uma vez que o rendimento alcançado no modelo com convecção forçada contribui para uma eficiência de aproximadamente 97,5 %, enquanto que a aplicação tradicional do sistema de GNA representa um desempenho de 88,6 %. O ganho de eficiência diante da aplicação de um dispositivo proveniente do próprio automóvel representa um ganho na eficiência de mais de 10 %, considerando-se que o objeto do presente estudo foi um reservatório constituído de uma liga Cromo-Molibdenio (Cr-Mo). Outros estudos serão desenvolvidos em reservatórios constituídos por materiais mais favoráveis a transferência de calor entre o meio externo e o bloco adsorvente.

## 5. Referências

- CHANG, K. J. e TALU, O., (1996), "Behavior and performance of adsorptive natural gas storage cylinders during discharge", Applied Thermal Engineering, Vol. 16, p. 359 – 374;
- MOTA, J. P. B., SAATDJIAN, E., TONDEUR, D. E RODRIGUES, A. E., (1995), "A simulation model of a high-capacity methane adsorptive storage system", Adsorption, Vol. 1, p. 17 – 27;
- BILOE, S, GOETZ, V. e MAURAN, S., (2000), "Dynamic Discharge and Performance of a New Adsorbent for Natural Gas Storage", Environmental and Energy Engineering, Vol. 47, p. 2819 – 2830;
- PATANKAR, S. V., (1980), "Numerical Heat and Fluid Flow", Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Sciences, 1ª Edição. ISBN – 0-89116-522-3.