

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO PROCESSO DE CARGA EM RESERVATÓRIOS DE GEOMETRIA TOROIDAL

SOUZA, M. R. A.¹ (Fundação Universidade Federal do Vale do São Francisco - UNIVASF), LIMA, J. A.²
(Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN)

¹UNIVASF/CEMEC, Av. Juazeiro Sobradinho, sn, Juazeiro/BA, mremgmecc@yahoo.com.br

²UFRN/CT/PPPGEM, Av. Senador Salgado Filho, sn Lagoa Nova, Natal/RN – 59078-970, jalima@dem.ufrn.br

Resumo/Abstract: O uso de adsorventes em sistemas de armazenamento de gás natural tem sido discutido com frequência devido à capacidade, característica desses materiais de diminuir a pressão do gás dentro dos reservatórios que armazena o referido combustível. No entanto, a utilização do meio poroso dentro dos reservatórios nos automóveis acarreta em sérios inconvenientes, desestimulando sua aplicação, dentre os quais se destaca os efeitos térmicos durante os processos de carga e descarga, que comprometem a capacidade volumétrica efetiva do reservatório, já afetada pela presença do bloco adsorvente. Diante disso, estudos a fim de solucionar ou amenizar tais efeitos têm sido propostos, vislumbrando-se o aproveitamento dos baixos níveis de pressão verificados com a adsorção do gás durante seu armazenamento. Tendo em vista essa característica, o projeto de reservatórios com geometria não cilíndrica se torna mais viável. Em consequência disso, a capacidade de armazenamento pode ser aumentada para compensar as perdas inerentes à presença do meio poroso, além do espaço ocupado pelo tradicional cilindro, que seria melhor aproveitado. No presente trabalho, os efeitos térmicos e o desempenho de um reservatório de geometria toroidal são simulados numericamente aplicando-se o modelo numérico ao processo de armazenamento do gás (carga), considerando que o toroide esteja vazio em sua condição inicial e dotado de galerias em torno de sua seção transversal (trocadores de calor) para o escoamento de fluido refrigerante durante o armazenamento do gás. Dessa forma, o coeficiente de transferência de calor por convecção na parede é aumentado, reduzindo os efeitos térmicos característicos do processo analisado e melhorando o desempenho do reservatório analisado. Esses resultados são comparados com os obtidos com a proposição de convecção natural na parede (sem trocadores de calor) no modelo simulado. Esses resultados possibilitam constatar a influência que os trocadores de calor exercem sobre a viabilidade dos sistemas de adsorção inclusive para reservatórios não cilíndricos.

Palavras-chave: 1. Adsorção, 2. Gás Natural, 3. Simulação computacional;

1. INTRODUÇÃO

Tendo em vista o considerável aumento, nos últimos anos, de veículos convertidos para combustão a gás natural (GN), algumas alternativas têm sido debatidas para incentivar, ainda mais, tal adesão no mercado automotivo, apesar de inconvenientes inerentes a essa conversão, como os causados pelo volumoso e pesado reservatório cilíndrico utilizado para armazenamento do gás na forma comprimida (20 MPa). Entretanto, é possível, também, armazenar o GN por meio de adsorção, com pressões mais moderadas (4 MPa). Essa prática, que tem sido aplicada em diversos processos na indústria, foi inicialmente empregada no setor automotivo para o transporte de gás em grandes reservatórios, onde a geometria não representa transtornos. Atualmente o processo de adsorção é alvo de frequentes estudos que buscam sua viabilidade a bordo de veículos populares (Mota *et al.*, 1997; Biloe *et al.*, 2001b) a fim de substituir os reservatórios existentes de maneira que esse ocupe menos espaço dentro do automóvel e/ou que seja fabricado a partir de materiais não tão robustos quanto o aço hoje utilizado. Além disso, segundo Lozano *et al.* (2002), há duas grandes vantagens no processo de adsorção para armazenamento do gás natural. Em princípio, de caráter econômico para quem fornece o combustível, uma vez que durante o armazenamento de gás em um sistema de adsorção, verifica-se uma diminuição de até 82 % da pressão que seria necessária ao enchimento sem adsorção, ou seja, somente pela compressão do gás. Isso significa que um compressor que bombeia o gás natural a 26 MPa, no processo convencional (compressão), poderá ser substituído por outro que o faça a no máximo 4 MPa (adsorção). A segunda vantagem característica do armazenamento por adsorção está, ainda, ligada aos moderados valores de pressão proporcionados pelo processo em discussão. Com a diminuição da pressão na parede do reservatório há, portanto, a possibilidade de se pensar em novas geometrias para o reservatório atualmente cilíndrico, visando melhor adequação desse vaso de pressão no interior do veículo. No entanto, na prática, a implantação de um sistema de adsorção para armazenamento de gás natural implica em alguns inconvenientes, como o “calor de adsorção”, gerado pela aderência das moléculas constituintes do gás nos microporos do adsorvente. Com o intenso calor gerado, a capacidade de armazenamento do reservatório durante o processo de carga é reduzida consideravelmente (Mota *et al.*, 1997).

Uma alternativa proposta, a partir de estudos já realizados (Chang e Talu, 1996; Mota *et al.*, 1997; Vasiliev *et al.*, 2000; Biloe *et al.*, 2001b), para amenizar as consideráveis variações de temperatura no meio poroso durante suas inúmeras cargas e descargas foi adequar, ao reservatório, um “dispositivo” que produza convecção forçada em sua parede, de modo que a transferência de calor do meio poroso para o meio externo aumente durante a carga e do meio externo para o interior do cilindro durante o consumo do gás. Uma vez que a descarga é naturalmente bem mais lenta que o processo de abastecimento do veículo (Chang e Talu, 1996), há uma tendência a se pensar que o referido “dispositivo” não contribuirá consideravelmente à problemática estabelecida (Mota *et al.*, 1997; Souza e Lima, 2006b). Diante do contexto apresentado, o presente trabalho se propõe a investigar, por meio de simulação numérica, os efeitos térmicos do processo de carga, bem como a contribuição efetiva de trocadores de calor durante o referido processo reservatório cuja geometria é inspirada na adaptação da forma clássica de vaso de pressão toroidal. Este trabalho é uma extensão de um estudo já realizado sobre tal geometria onde se considerou um processo de descarga de gás (Souza e Lima, 2006a) de maneira que a vazão de saída do combustível é substancialmente menor que a aplicada durante seu armazenamento, consequentemente, os efeitos térmicos são bem mais sutis do que os apresentados no presente estudo. Dessa forma, os perfis de temperatura e pressão obtidos a partir do modelo numérico que governa o processo de carga serão indicadores da eficiência dos trocadores de calor, bem como do desempenho prático do reservatório toroidal que não necessariamente deve ser eficaz durante sua descarga, mas também durante a carga, uma vez que ambos os processos se repetirão inúmeras vezes durante a vida útil de tal equipamento.

2. O RESERVATÓRIO E O MODELO MATEMÁTICO

O reservatório ilustrado na Figura 1 é proposto de forma tal que se encaixe nos compartimentos destinados ao pneu reserva dos automóveis, liberando, portanto, o espaço anteriormente ocupado por um reservatório cilíndrico tradicional. Contudo, as dimensões desse compartimento limitam as dimensões máximas do toróide, já que esse deve ser encaixado onde antes era alocado o pneu. Dessa forma, tem-se, como proposta de geometria, um reservatório de seção transversal circular com diâmetro interno de 238 mm, espessura de parede de 6 mm e dimensões externas máximas (largura e altura do reservatório) com 700 mm e 300 mm, respectivamente, levando-se em conta as galerias superior e inferior (Figura 1) necessárias para a circulação de fluido para favorecer a troca de calor com o meio poroso. Tais dimensões proporcionam ao reservatório toroidal uma capacidade de armazenamento de aproximadamente 63 litros, ou seja, quase o dobro da capacidade de um cilindro normalmente utilizado em automóveis populares cuja capacidade é de 33 litros (referência: 33.244.910V) tendo a vantagem de não se ter o porta-malas ocupado. Esse aumento da capacidade de armazenamento se dá devido ao reservatório com formato toroidal ser, na verdade, um cilindro cujo comprimento é equivalente ao da circunferência descrita pela linha imaginária que passa pelo centro do toróide.

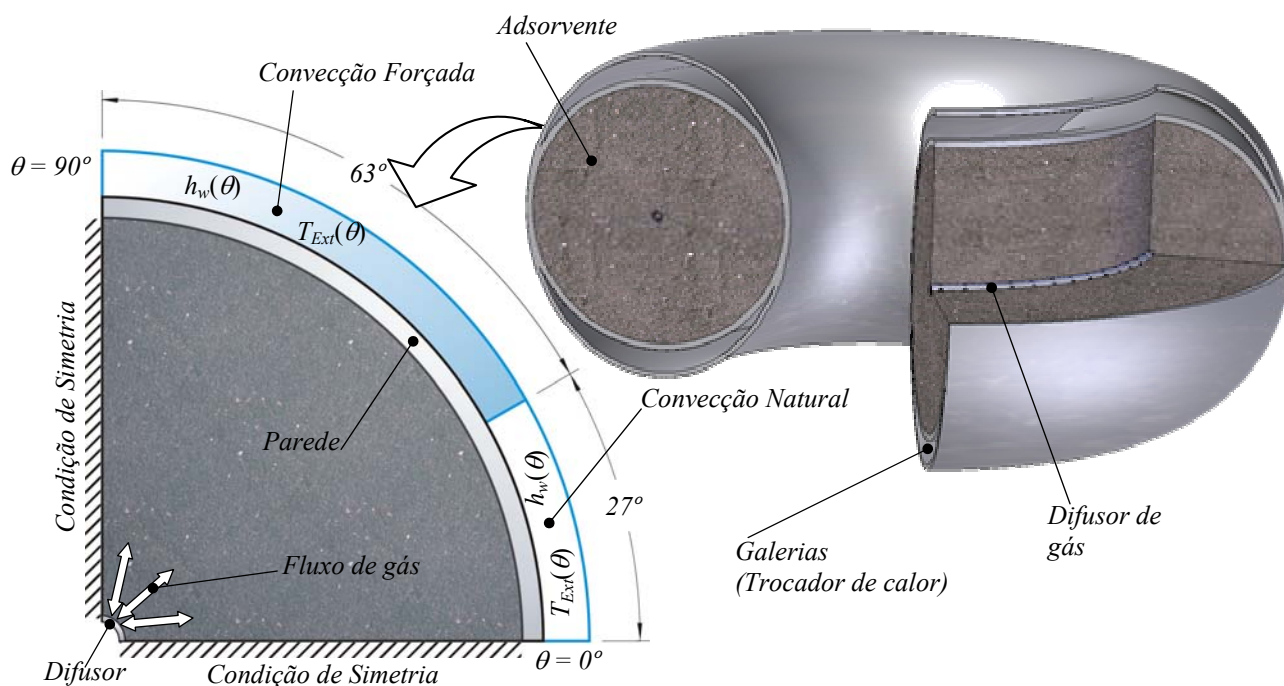


Figura 1. Reservatório toroidal (direita) com sua indicação do domínio computacional (esquerda) e as respectivas condições de contorno.

Os modelos matemáticos dos reservatórios cilíndrico e do toroidal, são praticamente idênticos (Souza, 2005). Entretanto, na segunda situação, as equações que regem o processo estudado são dependentes de r (raio) e θ (ângulo) devido à existência do difusor (ver Figura 1), que conduz o escoamento do gás preferencialmente na direção radial, além dos gradientes de temperatura que surgem ao longo da direção angular (θ), devido às galerias do trocador de calor não envolvem todo o contorno da seção transversal e, conseqüentemente, proporcionar uma intensificação da troca de calor em um ângulo de aproximadamente 63° , considerou-se o domínio computacional disposto em $\frac{1}{4}$ da seção transversal do reservatório devido à simetria a partir dos eixos “imaginários” vertical e horizontal da referida seção (Figura 1).

2.1. Considerações do modelo matemático

Para que o modelo matemático seja concebido de forma mais simplificada, algumas restrições e suposições são consideradas com base nas proposições verificadas em Mota *et al.* (1995), Biloe *et al.* (2001b) e Biloe *et al.* (2002), tais como:

- a) A presença de um difusor de gás (Figura 1), faz com que o fluxo de gás seja unicamente na direção radial (Biloe *et al.*, 2001b);
- 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);
- c) As propriedades referentes ao gás natural são consideradas como sendo unicamente do metano. Isso se dá pela grande quantidade desse na composição do GN (Biloe *et al.*, 2001b);
- d) O metano assume o comportamento de um gás ideal devido a seu coeficiente de compressibilidade (Z) ser próximo de 97 % (Biloe *et al.*, 2002);
- e) Propriedades do gás como massa específica e viscosidade, além das propriedades do material que constitui o reservatório são consideradas constantes na faixa de temperatura e pressão abordadas (Biloe *et al.*, 2001b);
- f) 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.*, 2001b);
- g) A convecção natural dentro do reservatório é desprezada (Mota *et al.*, 1995).

2.2. Balanço de massa e energia no domínio proposto

As equações governantes do processo de adsorção são frequentemente constituída de balanços de massa e energia para o domínio estabelecido. Esses balanços são equacionados levando-se em conta todos os temas envolvidos no processo em análise, dentro de um maior ou menor grau de detalhamento referente às formas de transferência envolvida. Estas equações, que podem ser aplicadas para o processo de carga ou descarga (dependendo das condições de contorno aplicadas) são baseadas nos estudos desenvolvidos por Mota *et al.* (1995; 1997; 2004), Chang e Talu (1996), Vasiliev *et al.* (2000) e Biloe *et al.* (2001b). Portanto, considerando-se os termos apresentados nos itens “a” a “g” da seção anterior, tem-se para o balanço de massa e energia as Equações 1 e 5, respectivamente com seus termos dados pelas equações que segue:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_t \rho_g + \rho_s q) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho_g r u_{gr}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\rho_g \frac{1}{r} u_{g\theta} \right) = 0 \quad (1)$$

Onde os termos $\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_t \rho_g)$ e $\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s q)$ representam a taxa de variação, com o tempo, do gás nas fases não adsorvida e adsorvida, respectivamente. Os outros termos representam os componentes advectivos nas direções “ r ” e “ θ ” do gás, sendo expressas pelas Equações 3 e 4, respectivamente. A definição das variáveis ρ_g , u_{gr} e $u_{g\theta}$ é obtida a partir das premissas estabelecidas nos itens “e” e “f” da seção anterior, onde:

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

$$u_{gr} = -\frac{k}{\mu} \frac{\partial P}{\partial r} \quad (3)$$

$$u_{g\theta} = -\frac{k}{\mu r} \frac{\partial P}{\partial \theta} \quad (4)$$

Os parâmetros que constituem a Equação (5) são a massa específica do meio poroso (ρ_s), em kg/m^3 , a massa molar do metano (M_g), dada em kg/mol , os parâmetros C_{ps} e C_{pa} que são os respectivos calores específicos do adsorvente e do gás na forma adsorvida, dados em $(J/kg.K)$ e o calor isostérico (q constante) de adsorção (Δh), dado em J/kg . Na Tabela 1 estão elencados os valores atribuídos às variáveis que constituem os balanços de massa e energia.

Tabela 1. Propriedades dos parâmetros que constituem as equações da conservação da massa Eq. (1) e da energia Eq. (5) para os três meios abordados no modelo numérico. Referência: Biloe *et al.*, 2001b, Mota *et al.*, 1997* e Ozawa *et al.*, 1976**

Adsorvente					
Propriedades	Massa específica: ρ_s (kg/m ³)	Calor específico: C_{ps} (J/kg.K)	Condutividade térmica: λ (W/m.K)	Permeabilidade: k (m ²)	
Valor	450	1241,25	7,3	1x10 ⁻¹⁴	
Gás adsorvido					
Propriedades	Massa específica: ρ_a (kg/m ³)	Calor específico: C_{pa} (J/kg.K)	Calor de adsorção: Δh (J/mol)	Viscosidade absoluta: μ (kg/m.s)	Massa molar: M_g (kg/mol)
Valor	$f(P,T)**$	2316	-16000	1,25x10 ^{-5*}	1,604x10 ^{-2*}
Cilindro					
Propriedades	Massa específica: ρ_w (kg/m ³)		Calor específico: C_{pw} (J/kg.K)		
Valor	8238		468		

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[(\rho_s C_{ps} + q \rho_a C_{pa}) T \right] + \rho_s \frac{\Delta h}{M_g} \frac{\partial q}{\partial t} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda r \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\lambda \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) = 0 \quad (5)$$

A equação que relaciona a quantidade de gás adsorvida (q) com a pressão e temperatura verificadas no meio poroso é representada pela isoterma de Dubinin-Astakhov (Equação 6), onde cada termo é descrito em Biloe *et al.* (2001b) com seus respectivos valores dispostos na Tabela 2.

$$q = W_0 \rho_a \exp \left[- \left(\frac{RT \ln \left(\frac{P_s}{P} \right)}{E_0 \beta} \right)^n \right] \quad (6)$$

Tabela 2. Propriedades dos parâmetros da isoterma de Dubinin-Astakhov. Referência: Biloe *et al.*, (2001b), Stoekli *et al.*, (2000)* e Ozawa *et al.*, (1976)**

Parâmetros	W_0 (m^3/kg)	R ($J/mol.K$)	E_0 (J/mol)	ρ_a (kg/m^3)	$P_s(P,T)$ (MPa)	β	n
Valor	$1,17 \times 10^{-3}$	8,31441	15884	$f(T)*$	$f(P,T)*$	0,35**	1,39

2.3. Condições iniciais e de contorno

Partindo do princípio de que na simulação considera-se que no reservatório não há gás armazenado em $t = 0$, tem-se as seguintes condições iniciais para as Equações 1 e 5, respectivamente:

$$P(r, \theta, 0) = P_{atm} \quad (7)$$

$$T(r, \theta, 0) = T_{Ext} \quad (8)$$

Onde P_{atm} e T_{Ext} são a pressão no interior do reservatório antes da abertura da válvula (pressão atmosférica) e a temperatura inicial no interior do reservatório (298,15 K) que está em equilíbrio térmico. As condições de contorno aplicadas as respectivas equações da conservação da massa e da energia, são formuladas a partir dos

balanços dos fluxos (de massa e energia) que entram e saem do domínio considerado. Para a equação da conservação da massa tem-se:

$$P(r_0, \theta, t) = P_{Difusor} \quad (9)$$

$$\left. \frac{\partial P}{\partial r} \right|_{r_1, \theta, t} = 0 \quad (10)$$

$$\left. \frac{\partial P}{r \partial \theta} \right|_{r_1, 0, t} = 0 \quad (11)$$

$$\left. \frac{\partial P}{r \partial \theta} \right|_{r_1, \pi/2, t} = 0 \quad (12)$$

Onde na Equação 9, a pressão é prescrita na interface referente ao difusor de gás (r_0). O valor de $P_{Difusor}$ é obtido por meio de um ciclo iterativo como será visto na seção 3. Nesse processo, a pressão no difusor tem seu valor incrementado até que se obtenha uma pressão onde não se tenha mais efeitos relevantes da adsorção (3,6 a 4 MPa). A partir desse instante, a vazão de descarga sofre uma redução brusca como visto nos gráficos a seguir. As Equações 11 e 12 são condições de simetria tal qual especificado na Figura 1.

Os balanços de energia no domínio proposto são feitos nas interfaces “difusor” (r_0) e “parede” (r_1), dando origem às condições de contorno de entrada de gás e da transferência de calor através da parede do reservatório para o meio externo.

$$\rho_g u_g C_{pg} (T_{Ext} - T_{r_0}) = -\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=r_0} \quad (13)$$

$$C_{pw} \rho_w \frac{\partial T}{\partial t} dr d\theta = h_w(\theta) [T_{r_1} - T_{Ext}(\theta)] - \lambda \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=r_1} - \lambda \left. \frac{\partial T}{\partial \theta} \right|_e - \lambda \left. \frac{\partial T}{\partial \theta} \right|_w \quad (14)$$

$$\left. \frac{\partial P}{r \partial \theta} \right|_{r_1, 0, t} = 0 \quad (15)$$

$$\left. \frac{\partial T}{r \partial \theta} \right|_{r_1, \pi/2, t} = 0 \quad (16)$$

A variável $h_w(\theta)$ corresponde ao coeficiente de transferência de calor por convecção sobre a parede do reservatório. Seu valor varia em função do perímetro externo do reservatório envolvido pelas galerias do trocador de calor (Figura 1). Para o setor submetido à convecção forçada, tem-se $h_w = 200 \text{ W/m}^2\text{K}$ para escoamento de água e $30 \text{ W/m}^2\text{K}$ para o escoamento de ar nas galerias durante o enchimento do reservatório. No trecho não envolvido pelo trocador de calor, considerou-se convecção natural com $h_w = 5 \text{ W/m}^2\text{K}$.

3. METODOLOGIA DE SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES

Uma vez que as Equações 1 e 5 são caracterizadas pela existência de fortes não-linearidades, e que o parâmetro $P_{Difusor}$ varia com a marcha no tempo, o algoritmo empregado na solução do sistema de equações contempla dois laços iterativos além do laço de avanço no tempo, onde no laço mais externo o campo de temperatura e pressão calculados, a partir de uma estimativa inicial, são comparados com seus campos em níveis de iteração anteriores até que o erro relativo entre os campos de temperatura e pressão dos níveis “atual” e “anterior” esteja dentro da tolerância previamente especificada. Uma vez convergido o laço mais externo, o algoritmo passa a efetuar o cálculo da pressão no difusor que é realizado por comparação com um valor de referência da vazão volumétrica de carga (Biloe *et al.*, 2001b; Souza 2005), onde a vazão mássica que entra no meio poroso (a jusante do difusor) é comparada à vazão mássica que entra na válvula do reservatório (a montante do difusor) dentro da tolerância previamente especificada. Com a convergência dos dois laços o programa avança no tempo até um período de tempo especificado ou até atingir o regime permanente.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta publicação será considerada somente uma das vazões de gás propostas durante a simulação do mesmo processo em um reservatório cilíndrico ($1,75 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$) em Souza (2005) e Souza e Lima (2006b), uma vez que dentre aquela faixa de valores adotados não se verificou uma associação entre o aumento dos efeitos térmicos e a variação da vazão de enchimento. Diante disso, adota-se, ainda, um dos valores de vazão volumétrica propostos nas referidas publicações a fim de evitar um excesso na reação exotérmica durante o processo em questão, já que tal reação se dá proporcionalmente à velocidade de entrada do gás. Dentro desse contexto, são representadas nas Figuras 2 e 3, a distribuição de temperatura em três instantes significativos do processo de carga para convecção forçada com ar e com água, respectivamente. Em cada uma dessas figuras verifica-se também uma distribuição de pressão para instantes após a pressão no difusor alcançar o valor nominal de carga (3,5 MPa) de maneira que é perceptível que o reservatório ainda não atinge sua capacidade máxima.

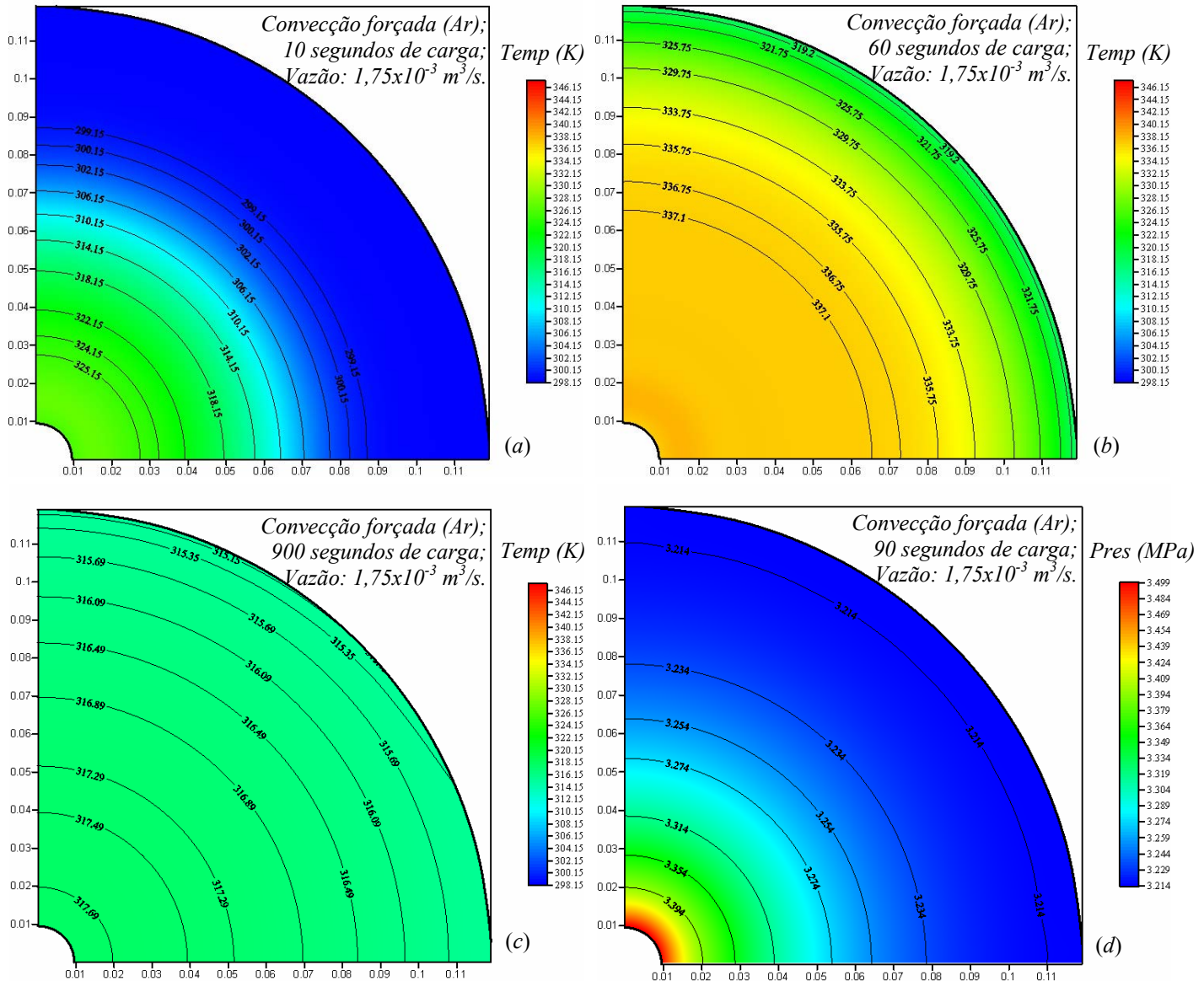


Figura 2. Carga com circulação de ar ($h_w = 30 \text{ W/m}^2\text{K}$) nas galerias e vazão de $1,75 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$ aos 10 s (a), 60 s (b) e 900 s (c). Em (d) campo de pressão alguns minutos depois da pressão na válvula atingir 3,5 MPa aos 90 s

Considerando que durante o enchimento do reservatório, escorrem ar nas galerias do trocador de calor, foram analisados os períodos 10, 60 e 900 segundos após o início da carga. Analisando os dois primeiros períodos percebe-se a rápida elevação da temperatura nos primeiros segundos de entrada de gás. O ultimo instante representa os efeitos do trocador de calor agindo sobre o meio poroso aquecido alguns segundos após a pressão no difusor atingir o valor de serviço ($P_{\text{Difusor}} = 3,5 \text{ MPa}$). A demonstração do campo de pressão se dá somente

Aos 72 segundos a pressão no difusor atinge 3,5 MPa, diminuindo, portanto, a variação de pressão na válvula do reservatório. A partir desse momento a vazão cai bruscamente (ver Figura 5b) até que se tenha um campo homogêneo de pressão no reservatório. Com a diminuição da vazão, os efeitos térmicos começam a sofrer significativas reduções. Entretanto, isso não significa que o reservatório está completamente cheio, uma vez que para 90 segundos de carga, ainda se percebe uma pressão mínima de 3,213 MPa como visto na Figura 2d. Dessa forma, para um longo período após os 72 segundos, ou seja, 900 segundos observa-se no difusor e na parede as temperaturas de 317,7 K e 315,0 K, tal qual ilustrado na figura 2c. A maior variação para esse instante é de 19,56 K com a pressão de 3,498 MPa obtida na parede do reservatório.

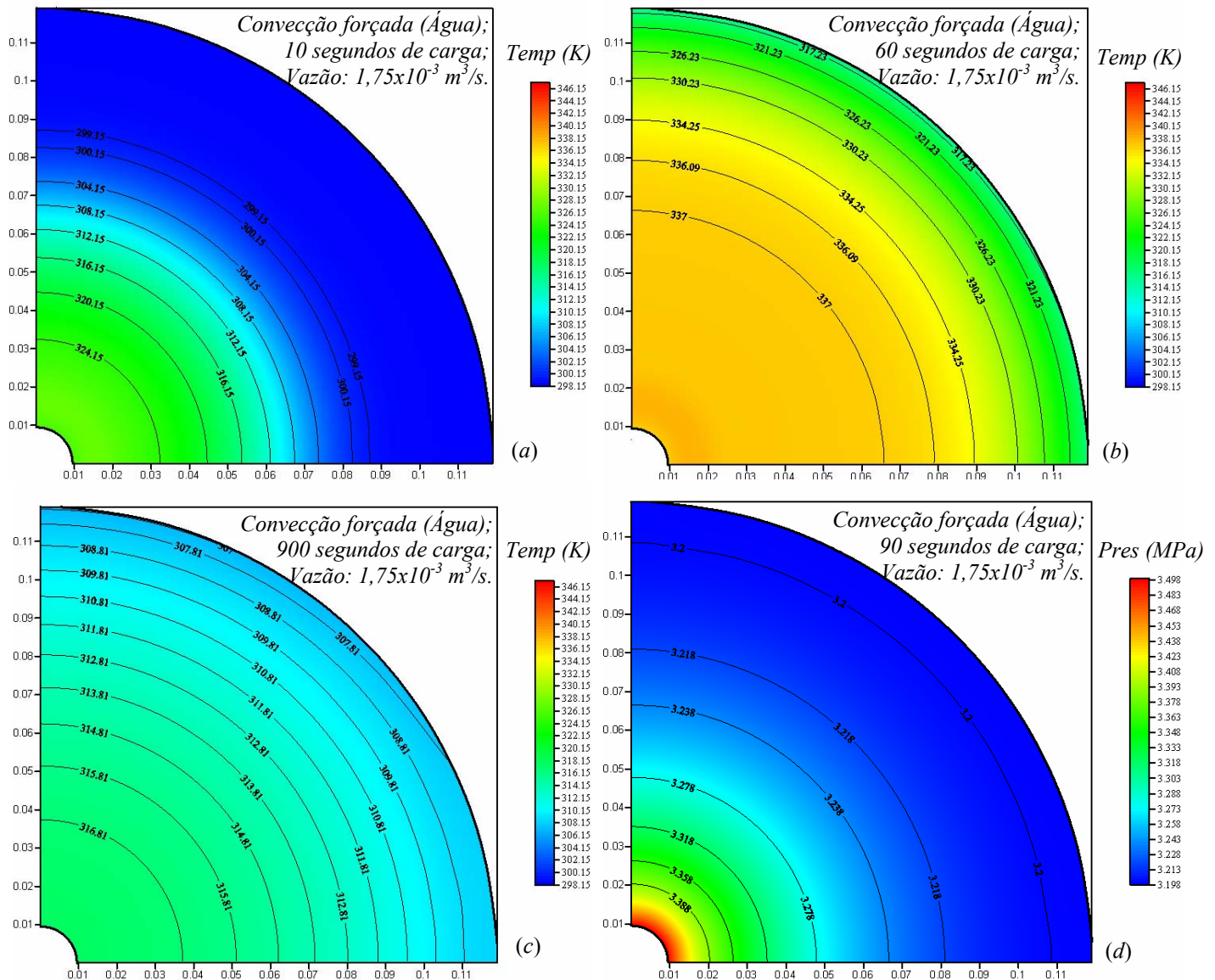


Figura 3. Carga com circulação de água nas galerias ($h_w = 200 \text{ W/m}^2\text{K}$) e vazão de $1,75 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$ aos 10 s (a), 60 s (b) e 900 s (c). Em (d) campo de pressão alguns minutos depois da pressão na válvula atingir 3,5 MPa aos 90 s

Considerando a segunda configuração, onde se propõe circulação de água nos trocadores de calor concomitante ao enchimento do reservatório, verifica-se uma considerável diminuição dos efeitos térmicos comparado com os constatados no interior do toróide durante a simulação da primeira configuração (Figura 2). Nos primeiros 10 segundos, verifica-se igualdade entre a distribuição de temperatura vista nas Figuras 2a e 3a. Aos 60 segundos de carga (Figura 3b) já se percebe a diferença causada pela influência de cada fluido utilizado em torno do toróide. A temperatura no difusor diminui moderadamente em relação à aplicação de ar nas galerias do trocador de calor, onde se verifica a temperatura de aproximadamente 337,0 K na interface “difusor”. Naturalmente constata-se uma diferença de temperatura quase insignificante, já que o processo de resfriamento se dá da parede para o difusor. Contudo, na interface “parede” os resultados são percebidos de maneira mais explícita, onde se registra 315,2 K no trecho do perímetro envolvido pelo trocador de calor ($\theta = 90^\circ$). A diferença, para esse ponto, entre a refrigeração do reservatório com ar ou água representa um resfriamento de 2,53 K para a aplicação de água nas galerias do reservatório toroidal que se reflete no desempenho global. Com a diminuição da vazão na válvula do reservatório, também aos 72 segundos, rapidamente o equilíbrio térmico é alcançado, apesar das temperaturas na parede e difusor continuarem subindo até os 118 e 140 segundos, respectivamente, onde alcançam seus respectivos valores máximos de 323,7 K e 347,0 K. Na Figura 3c, se verifica após um período significativo de 900 segundos (15 min) uma queda de temperatura para 317,6 K na interface “difusor”, enquanto para o modelo cujo fluido refrigerante foi o ar, observou-se 334,1 K para o mesmo instante de tempo. Tal diferença representa um meio poroso 16,46 K mais frio para o referido instante, ou seja, para aplicação de água nos trocadores de calor diminuições significativas dos efeitos térmicos são percebidos durante o armazenamento do gás em sistemas de adsorção.

Por fim, a última configuração proposta consiste na simulação dos efeitos referentes ao armazenamento do gás no reservatório toroidal sem a presença de qualquer fluido escoando pelas galerias do trocador, ou seja, convecção natural. Dessa forma, o coeficiente de transferência de calor por convecção (h_w) é uniforme para todo o perímetro da seção transversal do toróide com valor de $5 \text{ W/m}^2\text{K}$. Como não há variação desse coeficiente ao longo do perímetro da seção transversal do reservatório, não há variação das propriedades de estado P e T na direção angular (θ), de maneira que o perfil dessas variáveis é o mesmo para quaisquer pontos desse perímetro, sendo desnecessário a representação em duas dimensões dessas variáveis como se pode ver na Figura 4.

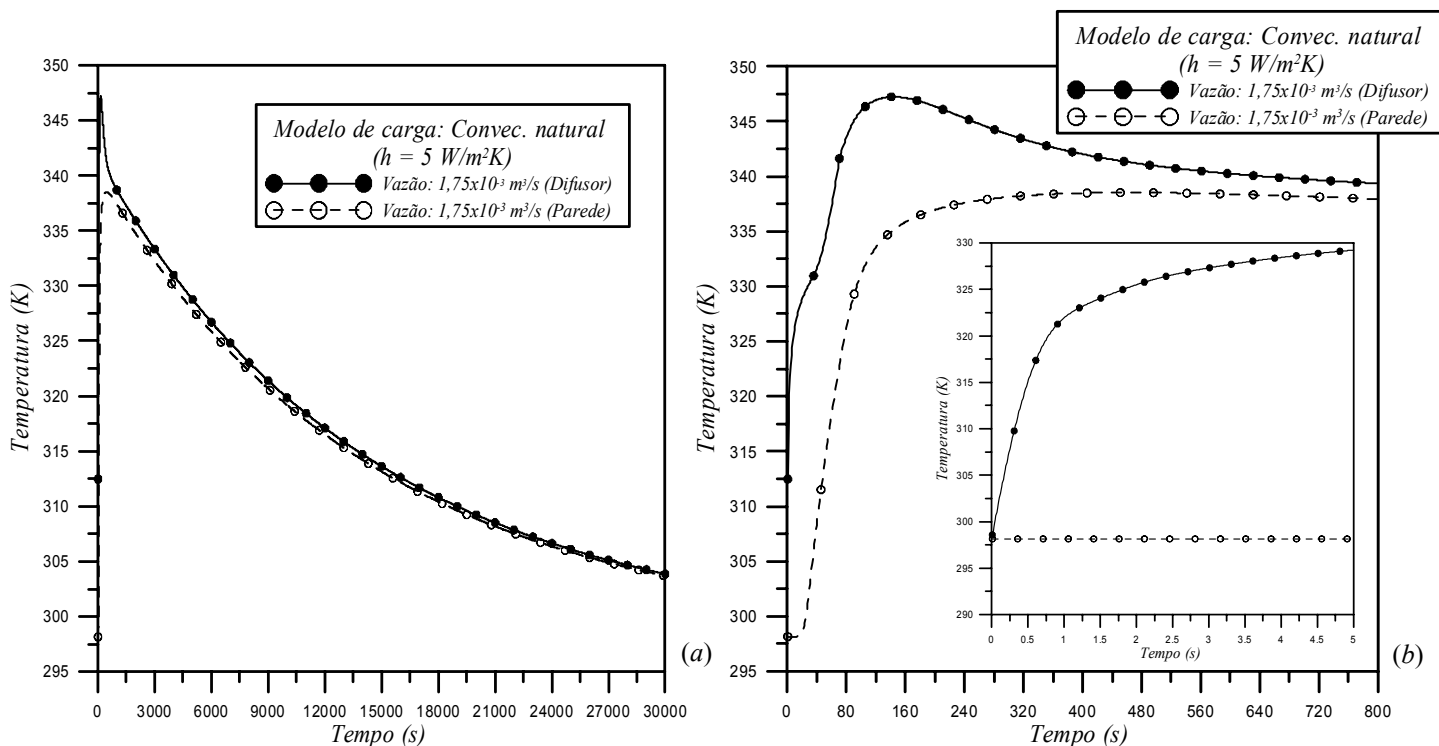


Figura 4. Distribuição de temperatura para o modelo submetido à convecção natural com vazão de carga de $1,75 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$ (a). À direita, ampliação do início do processo para melhor visualização (b)

Observa-se nesse modelo que a maior variação de temperatura registrada durante toda a carga do reservatório é de 49,09 K 144 segundos após seu início. Esse aumento de temperatura foi verificado na interface “difusor”, onde a temperatura para esse instante é de 347,2 K. Na interface “parede” obteve-se 338,5 K após 460

segundos de carga ($\sim 7,6 \text{ min}$). Diante desses dados, constata-se um aumento de $14,74 \text{ K}$ em relação ao modelo resfriado com água ratificando a importância dos trocadores de calor para o processo discutido.

Os perfis de pressão e vazão para as interfaces “difusor” e “parede”, considerando as três configurações propostas são ilustradas na Figura 5.

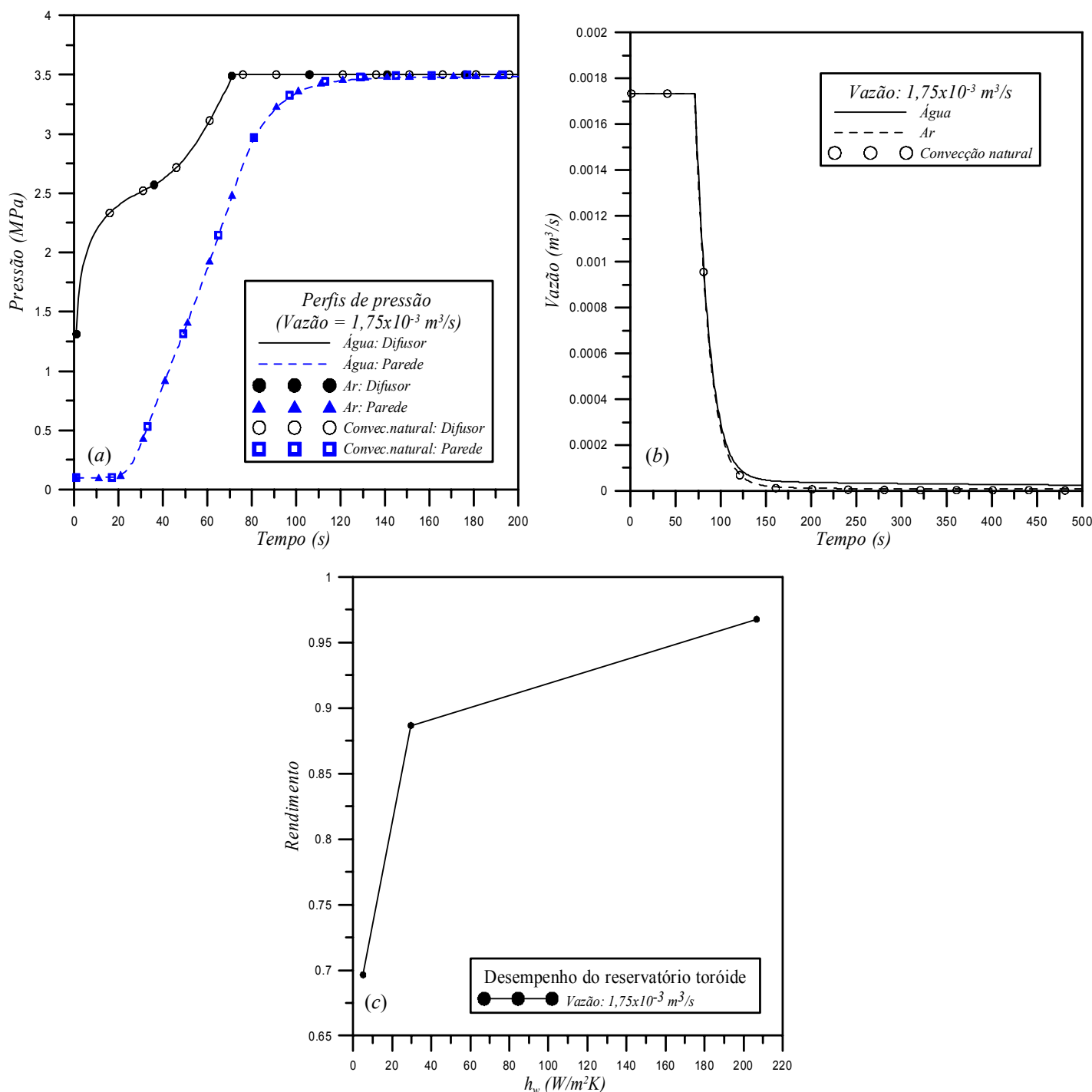


Figura 5. Perfis de elevação de pressão (a) e vazão (b) para as três configurações propostas $1,75 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$. Em (c), o desempenho do processo de carga para as configurações e vazão propostas

Analisando a figura 5a, verifica-se após alguns segundos (~ 20), um ponto de inflexão, onde a partir desse, a pressão passa a aumentar dentro do reservatório com valores mais moderados, independente da configuração aplicada e com vazão de carga proposta. Nas curvas em azul (Figura 5a), para a mesma faixa de tempo a interface correspondente à parede do reservatório apresentando pressão atmosférica. Isso se deve ao atrito imposto pelo meio poroso além dos efeitos térmicos, intensos já nos primeiros segundos, que dificulta a

homogeneização do gás em todo o reservatório. A partir do instante em que o gás atinge a parede do reservatório, o perfil de pressão é traçado de forma linear. Na Figura 5c é possível verificar o desempenho do processo de carga no toróide para cada configuração proposta. Onde, para água nas galerias dos trocadores de calor ($h_w = 206,01 \text{ W/m}^2\text{K}$) verifica 96,7 % devido ao alto valor de h_w . A aplicação de ar nos trocadores de calor proporciona 88,6 % de desempenho evidenciando certa perda de capacidade do reservatório com a adoção do referido fluido de trabalho durante a carga de gás. Por fim, com o negligenciamento da convecção forçada, o desempenho obtido é de 69,6 %.

5. CONCLUSÕES

Considerando as análises realizadas com e sem trocador de calor durante o instante de carga, é notável um excelente desempenho para a circulação de água concomitante ao referido processo. Nessa configuração constatou-se rendimentos maiores que 96 % para a vazão de carga adotada ($1,75 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$) de maneira que a desconsideração desse “dispositivo” inviabiliza a possível implantação de sistemas de adsorção para o setor veicular, haja visto o baixo desempenho obtidos para tal configuração. A utilização de um reservatório para armazenamento de gás natural na forma toroidal, ou qualquer outra forma não convencional, é sem dúvida a aplicação mais viável para sistemas de adsorção no mercado de abastecimento automotivo, visto que tal geometria propicia a “retomada” do porta-malas do automóvel, já que dependendo do modelo proposto, é possível se ter reservatórios que ocupem menores espaços dentro do veículo oferecendo mais capacidade de armazenamento que os tradicionais cilindros. Esse argumento fundamenta a necessidade de associar adsorção com armazenamento de gás natural veicular, pois somente com esse processo de armazenamento se tem a oportunidade de aliar baixas pressões (necessário para pensar em outras formas geométricas) a uma quantidade viável de gás armazenado. Contudo, é importante que se tenha associado à pesquisa de novas formas geométricas, a busca da redução dos incômodos efeitos característicos de adsorção e dessorção de gás.

6. REFERÊNCIAS

- BILOE, S.; GOETZ, V.; MAURAN, S. Dynamic Discharge and Performance of a New Adsorbent for Natural Gas Storage. **Environmental and Energy Engineering**, Vol. 47, p. 2819 – 2830, Dec. 2001b.
- BILOE, S.; GOETZ, V.; MAURAN, S. Optimal Design of an Activated Carbon for an Adsorbed Natural Gas Storage System. **Carbon**, Vol. 40, p. 1295 – 1308, 2002.
- CHANG, K. J.; TALU, O. Behavior and Performance of Adsorptive Natural Gas Storage Cylinders During Discharge. **Applied Thermal Engineering**, Vol. 16, p. 359 – 374, 1996.
- LOZANO-CASTELLÓ, D.; ALCANIZ-MONGE, J.; CASA-LILO, M. A.; CAZORLA-AMORÓS, D.; LINARES-SOLANO, A. Advances in the Study of Methane Storage in Porous Carbonaceous Materials. **Fuel**, Vol. 81, p. 1777 – 1803, Jun. 2002.
- MOTA, J. P. Barbosa; SAATDJIAN, E.; TONDER, D. Dynamics of Natural Gas Adsorption Storage System Employing Activated Carbon. **Carbon**, Vol. 35, p. 1259 – 1270, Mar. 1997.
- OZAWA, Sentaro; KUSUMI, Seiichiro; OGINO, Yoshisada. Physical Adsorption of Gases at High Pressure IV. A Improvement of the Dubinin-Astakhov Equation. **Journal of Colloid and Interface Science**, Vol. 56, p. 83 – 91, Jul. 1976.
- PATANKAR, Suhas V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. 1st ed. Philadelphia: Taylor & Francis, 1980. 197 p. (Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Sciences).
- SOUZA, Márcio Rodrigo de Araújo; LIMA, João Alves de. **Simulação Computacional da Descarga Dinâmica de Gás em um Reservatório de Geometria Toroidal**. In: 11º Brazilian Congresso f Thermal Sciences and Engireening – XI ENCIT, 2006a, Curitiba – Brasil. Vol. 1, p. 189
- SOUZA, Márcio Rodrigo de Araújo; LIMA, João Alves de. **Simulação Computacional da Influência da Convecção Forçada em Reservatórios Comerciais Durante o Processo de Carga de Gás Natural**. In: IV Congresso Nacional de Engenharia Mecânica – IV CONEM, 2006b, Recife - Brasil. Vol 1, p.
- SOUZA, Márcio Rodrigo de Araújo; LIMA, João Alves de. **Simulação Numérica da Influência da Convecção Forçada no Processo de Descarga de Sistemas de GNA**. In: 3º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás, 2005, Salvador – Brasil. Vol 1, p. 139
- SOUZA, Márcio R. A. **Simulação Computacional dos Efeitos da Adsorção Durante os Ciclos de Carga e Descarga de Gás em Reservatórios Não-Convencionais**. 2005. 189 p. Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2005.
- STOECKLI, F.; GUILLOT, A.; HUGI-CLEARY, D. Pore Size Distribution of Active Carbons Assessed by Different Techniques. **Carbon**, Vol. 38, p. 929 – 941, Feb. 2000
- VASILIEV, L. L.; KANONCHIK, L. E.; MISHKINIS, D. A.; RABETSKY, M. I. Adsorbed Natural Gas Storage and Transportation Vessels. **International Journal of Thermal Science**, Vol. 39, p. 1047 – 1055, Jul. 2000.