

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA DESCARGA DINÂMICA DE GÁS EM UM RESERVATÓRIO DE GEOMETRIA TOROIDAL

Souza, Márcio Rodrigo de Araújo

Lima, João Alves de

Universidade Federal do Rio Grande do Norte – PPGEM/DEM/UFRN

Av. Senador Salgado Filho, sn. Lagoa Nova, Natal - RN, 59078-970

mrengmec@yahoo.com.br

jalima@dem.ufrn.br

Resumo. A aplicação de adsorventes no armazenamento de gás natural veicular tem sido pesquisada com frequência devido à sua capacidade de reduzir a pressão dentro dos reservatórios que armazenam esse combustível. Contudo, o uso desse material nos cilindros proporciona inconvenientes, como os efeitos térmicos durante o ciclo carga/descarga, que inibem sua aplicação no referido mercado. Por outro lado, os baixos níveis de pressão obtidos com a adsorção do gás, contribuem para projetos de reservatórios com geometria não cilíndrica, onde a capacidade de armazenamento pode ser aumentada e o espaço ocupado pelo cilindro tradicional melhor aproveitado. No presente trabalho os efeitos térmicos e o desempenho de um reservatório de geometria toroidal são simulados numericamente para o processo de descarga de gás, adotando-se galerias em torno de sua seção transversal para o escoamento de um fluido, de maneira a intensificar a transferência de calor por convecção na parede e, desta forma, reduzir os efeitos térmicos característicos do processo estudado. Esses resultados são comparados com os obtidos sem a proposição dos trocadores de calor no reservatório toroidal. As simulações possibilitam constatar a influência que os trocadores de calor exercem sobre a viabilidade dos adsorventes aplicados à reservatórios não cilíndricos.

Palavras chave: métodos numéricos, adsorção, gás natural, reservatório não convencional.

1. Introdução

Diante do aumento da aplicação do gás natural (GN) no setor de abastecimento automotivo, algumas alternativas têm sido frequentemente consideradas para favorecer o armazenamento desse combustível de maneira a incentivar sua adequação no referido mercado. Além da tradicional compressão do gás natural nos robustos reservatórios cilíndricos, a adsorção, que tem sido aplicada em diversos processos na indústria, sendo inicialmente utilizada na área de abastecimento automotivo, unicamente para o transporte desse gás, atualmente é alvo de inúmeros estudos que buscam sua viabilidade a bordo de veículos populares (Mota *et al.*, 1997; Biloe *et al.*, 2001b). Segundo Lozano *et al.* (2002), as duas grandes vantagens do processo de adsorção para armazenamento do gás natural são, em primeiro lugar, de caráter econômico para quem o fornece. Durante o carregamento de um reservatório com adsorvente, há uma diminuição de até 82 % da pressão que seria necessária ao enchimento desse reservatório somente pela compressão do gás. Isso significa que um compressor que comprime o gás natural a 26 MPa, no processo convencional (compressão), poderá ser substituído por outro que comprima o gás, no máximo, a 4 MPa (adsorção). A segunda vantagem associada ao armazenamento por adsorção está, ainda, ligada aos moderados valores de pressão proporcionados pelo processo citado. Com a diminuição da pressão na parede do reservatório há, portanto, a possibilidade de se propor novas geometrias para o reservatório atualmente cilíndrico, visando melhor adequação desse vaso de pressão no interior do veículo. Entretanto, na prática, a implantação de um sistema de adsorção para armazenamento de gás natural implica em alguns inconvenientes, como o “calor de adsorção”, oriundo das reações inerentes à aderência e desprendimento das moléculas de metano (que constituem aproximadamente 94 % do GN) no meio poroso, dificultando seu escoamento para dentro e para fora do reservatório nos respectivos processos de carga e descarga do gás.

Uma alternativa proposta, a partir dos estudos já realizados (Chang e Talu, 1996; Mota *et al.*, 1997; Vasiliev *et al.*, 2000; Biloe *et al.*, 2001b), para amenizar as variações de temperatura no meio poroso durante o ciclo citado foi adequar, ao reservatório, um dispositivo que produza convecção forçada em torno de sua parede, de maneira a aumentar a transferência de calor do meio poroso para o meio externo. Porém, devido à rapidez com que ocorre o processo de carga, tal dispositivo não apresenta efeitos tão satisfatórios quanto no processo de descarga (Souza e Lima, 2005), uma vez que esse último é naturalmente bem mais lento que o enchimento do reservatório (Chang e Talu, 1996).

Tendo em vista o contexto apresentado, o presente trabalho se propõe a investigar, por meio de simulação numérica, o comportamento dinâmico do processo de descarga em um reservatório não convencional, cuja proposta geométrica é inspirada na adaptação da forma clássica de vaso de pressão toroidal (Higdon *et al.*, 1985). Por meio das simulações numéricas, é analisada a influência dos dispositivos para troca de calor em seu desempenho, bem como os resultados produzidos também por simulação para a situação onde os trocadores de calor são desconsiderados. Tais análises ressaltam a relação entre o material que constitui o toróide e o fluido que circula pelas galerias do trocador de calor. A realização desta etapa representa um avanço na pesquisa referente ao melhoramento de novas tecnologias para viabilizar o uso do gás natural como combustível alternativo.

2. Modelagem Matemática

O reservatório ilustrado na Fig. 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 (Fig. 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 utilizado em automóveis populares (33 litros). 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. Dessa forma, o reservatório ocupa um espaço bem menor do que o cilindro convencional.

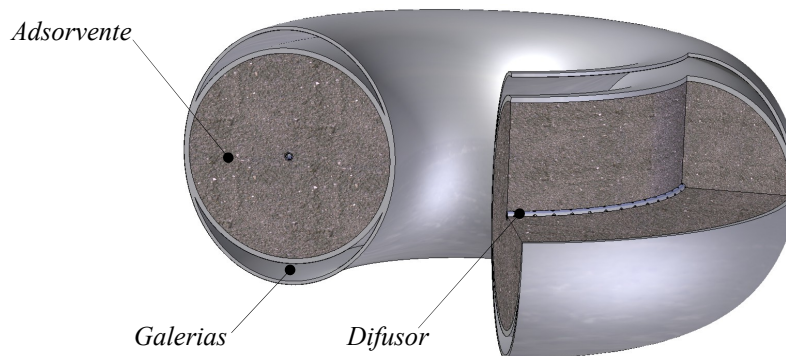


Figura 1. Ilustração, em corte, do reservatório de geometria toroidal

Os modelos matemáticos do reservatório cilíndrico (Biloe *et al.*, 2001b) e do toroidal são praticamente idênticos. Entretanto, na presente situação, aborda-se o modelo em duas dimensões (r e θ), devido às galerias de troca de calor, uma vez que as mesmas não envolvem todo o contorno da seção transversal, fazendo surgir gradientes de temperaturas ao longo da direção angular (Fig. 2). Tal disposição proporciona uma intensificação da troca de calor em um ângulo de aproximadamente 63° , uma vez que considerou-se $1/4$ do domínio computacional, embora a existência do difusor, faça com que o escoamento do gás seja preferencialmente radial.

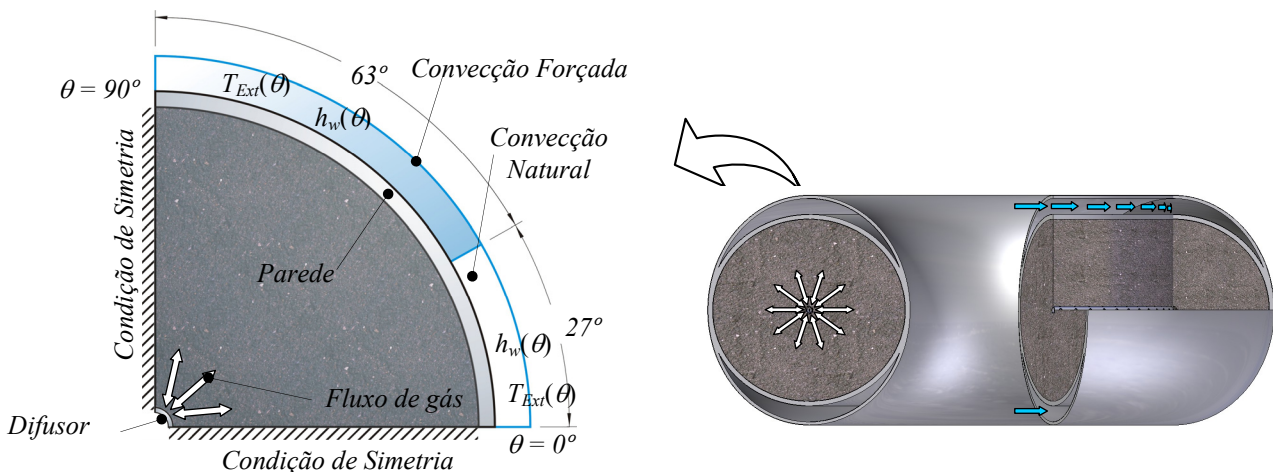


Figura 2. Domínio de análise do modelo proposto com as indicações das temperaturas do trocador de calor. Ao lado o esquema das direções de escoamento de gás (setas brancas) e do fluido para troca de calor (setas azuis)

Considerando-se ainda as seguintes hipóteses simplificadoras:

- 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);
- 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 (Biloe *et al.*, 2001b);

- O metano assume o comportamento de um gás ideal devido a seu coeficiente de compressibilidade (Z) ser próximo de 97 % (Biloe *et al.*, 2002);
- 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);
- 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);
- A convecção natural dentro do reservatório é desprezada (Mota *et al.*, 1995).

O modelo matemático do processo de descarga sob adsorção é normalmente constituído dos balanços de massa e de energia no sistema investigado.

2.1. Balanços de Massa e Energia no Sistema de Adsorção

O balanço de massa realizado no meio poroso produz:

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

onde:

$$\rho_g = \frac{M_g P}{RT} ; \quad q = W_0 \rho_a \exp \left[- \left(\frac{RT \ln \left(\frac{P_s}{P} \right)}{E_0 \beta} \right)^n \right] \quad (2, 3)$$

$$u_{gr} = - \frac{k}{\mu} \frac{\partial P}{\partial r} ; \quad u_{g\theta} = - \frac{k}{\mu r} \frac{\partial P}{\partial \theta} \quad (4, 5)$$

As parcelas do termo transiente da Eq. (1), correspondem, respectivamente, às taxas de acumulação da fase gasosa livre e de gás na fase adsorvida. Os termos de variação espacial representam os fluxos advectivos do gás nas direções radial e angular. A porosidade acessível ao gás (ε_t) é função da quantidade adsorvida (q), sendo expressa em Biloe *et al.*, (2002). A Eq. (2) representa a massa específica do gás não adsorvido (ρ_g), dada em kg/m^3 , e a quantidade de metano dessorvido (q), dada em kg/kg , é representada pela Eq. (3) (isoterma de Dubinin-Astakhov); ambas relacionando pressão (P) e temperatura (T). As Eq. (4) e (5) representam as componentes radial e angular da velocidade (\vec{u}_g), expressas pela relação de Darcy (Mota *et al.*, 1997).

Por sua vez o balanço de energia no meio poroso produz:

$$\frac{\partial}{\partial t} [(\rho_s C_{ps} + q \rho_a C_{pa}) T] + \rho_s \frac{\Delta h}{M_g} \frac{\partial q}{\partial t} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda r \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\lambda \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) = 0 \quad (6)$$

Os parâmetros que constituem a Eq. (6) 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 as respectivas capacidades de calor do adsorvente e do gás na forma adsorvida, dados em $(J/kg.K)$ e o calor isostérico de adsorção (Δh), dado em J/kg .

As propriedades referentes às referidas equações são definidas experimentalmente por Biloe *et al.* (2001b) ou por meio da literatura, sendo listadas na Tab. 1. Na Tab. 2 estão elencados os valores atribuídos às variáveis que constituem os balanços de massa e energia. O adsorvente adotado como referência para a simulação proposta no presente trabalho consiste em um compósito onde é misturado 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.* (2001a), tendo como grande vantagem de aplicação o alto valor da condutividade térmica (λ) que, tradicionalmente, é muito baixo, prejudicando a troca de calor no meio poroso.

Tabela 1. Propriedades dos parâmetros da isoterma de Dubinin-Astakhov.
Referências: 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

Tabela 2. Propriedades dos parâmetros que constituem as equações de conservação da massa e de energia.
Referências: Biloe *et al.*, 2001b, Mota *et al.*, 1997* e Ozawa *et al.*, 1976**.

Adsorvente					
Propriedades	Massa específica: ρ_s (kg/m ³)	Capacidade calorífica: C_{ps} (J/kg.K)	Condutividade térmica: λ (W/m.K)	Permeabilidade: k (m ²)	
Valor	450	1241,25	7,3	1×10^{-14}	
Gás adsorvido					
Propriedades	Massa específica: ρ_a (kg/m ³)	Capacidade calorífica: 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	$1,25 \times 10^{-5}*$	$1,604 \times 10^{-2}*$
Cilindro					
Propriedades	Massa específica: ρ_w (kg/m ³)		Capacidade calorífica: C_{pw} (J/kg.K)		
Valor	8238		468		

2.2. Condições Iniciais e de Contorno

Antes do início da descarga ($t = 0$), são dados como condições iniciais das equações gerais (Eq. 1 e 6), a pressão máxima como sendo de carga (P_{Carga}), em MPa, dado que o reservatório está completamente cheio e a temperatura ambiente (T_{Ext}) em K, dado o equilíbrio térmico antes do início do esvaziamento do reservatório, de forma que:

$$P(r, \theta, 0) = P_{carga} ; \quad T(r, \theta, 0) = T_{Ext} \quad (8, 9)$$

onde T_{Ext} e P_{carga} são a temperatura inicial do sistema (298,15 K) e a pressão no interior do reservatório antes da abertura da válvula, respectivamente.

Por sua vez, as condições de contorno para as respectivas equações da conservação da massa e da energia são descritas nas interfaces difusor, r_0 , e parede, r_1 , respectivamente, conforme ilustrado na Fig. 3. Devido à simetria característica da seção transversal do toróide, as simulações propostas podem ser desenvolvidas em apenas $\frac{1}{4}$ do domínio como sugerido na ilustração da Fig. 2. Assim, há ainda a necessidade de aplicação de condições de contorno de simetria em $\theta = 0^\circ$ e em $\theta = 90^\circ$ (ver Fig. 2). Logo, tem-se:

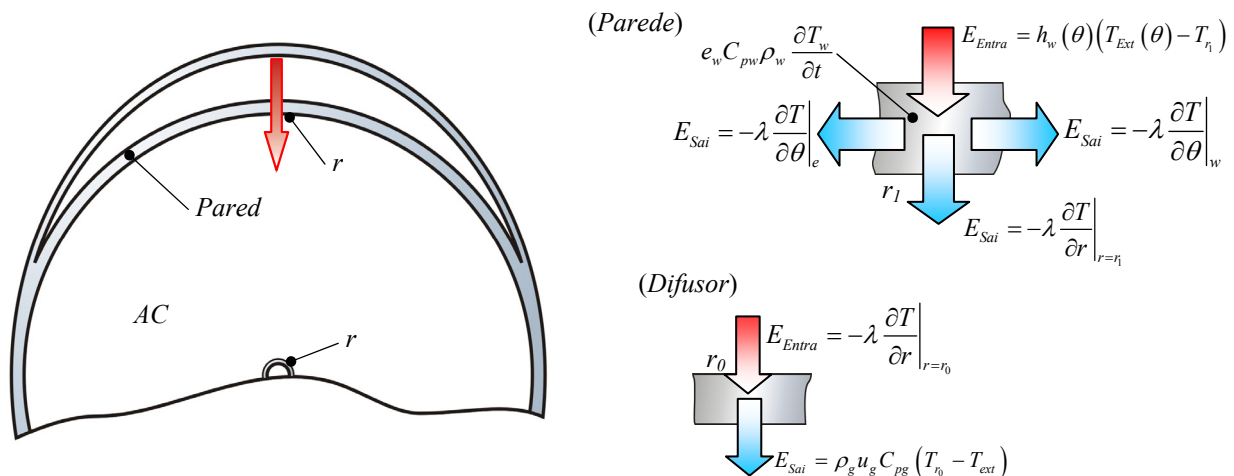


Figura 3. Seção transversal do reservatório toroidal, com os balanços de energia na parede e no difusor.

- Equação da conservação da massa (difusor e parede):

$$P(r_0, \theta, t) = P_{Difusor} ; \quad \frac{\partial P}{\partial r}(r_1, \theta, t) = 0 \quad (9, 10)$$

onde $P_{Difusor}$ é a pressão no difusor de gás, obtida por meio de um ciclo iterativo como será visto na seção 2.3. Nesse processo, a pressão no difusor tem seu valor decrementado até que se obtenha a pressão atmosférica (0,101 MPa). A partir desse instante, a vazão de descarga sofre uma redução brusca como visto nos gráficos que segue.

- Equação da conservação da massa (simetria em $\theta = 0^\circ$ e 90°):

$$\frac{\partial P}{\partial \theta}(r, 0^\circ, t) = 0 ; \quad \frac{\partial P}{\partial \theta}(r, 90^\circ, t) = 0 \quad (11, 12)$$

- Equação da energia (difusor):

$$\rho_g \mu_g C_{pg} (T_{Ext} - T_{r_0}) = -\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=r_0} \quad (13)$$

- Equação da energia (simetria em $\theta = 0^\circ$ e 90°):

$$\frac{\partial T}{\partial \theta}(r, 0^\circ, t) = 0 ; \quad \frac{\partial T}{\partial \theta}(r, 90^\circ, t) = 0 \quad (14, 15)$$

- Equação da energia (parede do cilindro):

$$e_w C_{pw} \rho_w \frac{\partial T}{\partial t} = h_w(\theta) [T_{r_1} - T_{Ext}(\theta)] + \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=r_1} - \lambda \frac{\partial T}{\partial \theta} \Big|_e - \lambda \frac{\partial T}{\partial \theta} \Big|_w ; \quad 0^\circ < \theta < 90^\circ \quad (16)$$

$$e_w C_{pw} \rho_w \frac{\partial T}{\partial t} = h_w(\theta) [T_{r_1} - T_{Ext}(\theta)] + \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=r_1} - \lambda \frac{\partial T}{\partial \theta} \Big|_w ; \quad \theta = 0^\circ \quad (17)$$

$$e_w C_{pw} \rho_w \frac{\partial T}{\partial t} = h_w(\theta) [T_{r_1} - T_{Ext}(\theta)] + \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=r_1} - \lambda \frac{\partial T}{\partial \theta} \Big|_e ; \quad \theta = 90^\circ \quad (18)$$

Os balanços de energia aplicados à interface “parede” do domínio computacional são formulados considerando-se o fluxo de energia que é transferido do meio externo para o meio poroso dentro do reservatório, cuja temperatura diminui devido aos efeitos térmicos da dessorção. Os parâmetros das condições de contorno referentes à equação da energia, e_w e ρ_w representam a espessura e a massa específica da parede do reservatório. O termo $h_w(\theta)$ corresponde ao coeficiente de transferência de calor por convecção sobre a parede do reservatório, o qual valor varia em função do trecho do reservatório envolvido pelos trocadores de calor (Fig. 2). Para o trecho do perímetro envolvido pelas galerias adotou-se $h_w = 206 \text{ W/m}^2\text{K}$, devido ao fluxo forçado de água nessas galerias concomitante ao processo de descarga do gás. No trecho não envolvido pelo trocador de calor, considerou-se convecção natural (ar), com $h_w = 5 \text{ W/m}^2\text{K}$.

2.3. Metodologia de Solução

Para que os resultados simulados pelo modelo abordado no presente trabalho sejam satisfatórios e confiáveis, é necessário que esse modelo seja validado com os resultados disponíveis na literatura de referência (Biloe *et al.*, 2001b). Dessa forma, as equações sugeridas por Biloe *et al.* (2001b), que governam o fenômeno de dessorção em um domínio unidimensional, são estendidas para uma situação bidimensional (r, θ), discretizadas e transformadas em equações algébricas por meio da metodologia dos volumes finitos (Patankar, 1980) de maneira que as curvas de temperatura (Fig. 4a), pressão (Fig. 4b), vazão volumétrica (Fig. 4c) e desempenho (Fig. 4d) sejam obtidas com uma aproximação aceitável dos resultados adotados como referência.

Devido às não linearidades características das equações que constituem o modelo numérico e da variação do parâmetro $P_{Difusor}$ (a pressão do difusor, a qual é uma condição de contorno que deve ser determinada dinamicamente), a metodologia empregada na solução desse modelo para a simulação do processo de descarga (ou de carga) é constituída por dois laços iterativos, onde, no laço mais externo, os campos de temperatura e pressão calculados, a partir de uma estimativa inicial, são comparados à essas variáveis em níveis de iteração anteriores até que o erro relativo entre os campos de temperatura e pressão dos níveis “atual” e “anterior” esteja de acordo com a tolerância especificada. Uma vez convergido o laço mais externo, tem-se o cálculo da pressão no difusor que é realizado por método de dicotomia (Biloe *et al.*, 2001b; Souza 2005), onde a vazão mássica que sai do meio poroso (à montante do difusor) é comparada à vazão mássica que sai da válvula do reservatório (à jusante do difusor) dentro da tolerância considerada. Com a convergência do laço mais interno o programa avança no tempo até um período especificado ou até que o regime permanente seja alcançado.

3. Resultados

O processo de descarga está diretamente ligado ao consumo do gás natural pelo automóvel no decorrer de seus vários níveis de desempenho. Dessa forma, diferente da vazão fixa, imposta pelo regulador de vazão do posto de abastecimento, considerada no processo de carga (Souza, 2005), o fluxo com que o reservatório é esvaziado varia conforme a necessidade requerida pelo sistema de alimentação do motor. Diante disso, se propõe no presente trabalho uma associação entre valores significativos de vazão (7 L/min, 13 L/min e 19 L/min) e algumas das diferentes fases de desempenho de um veículo, tais como marcha lenta, velocidade de tráfego e de cruzeiro, respectivamente. Para cada valor de vazão têm-se campos de pressão e temperatura resultantes da desorção para o período avaliado, bem como a comparação entre as duas configurações usadas para as galerias do trocador de calor atrelado ao reservatório toroidal, como visto no final da seção 2.2: convecção forçada com água representando maiores coeficientes de transferência de calor por convecção na parede do reservatório e convecção natural representando a ausência do trocador de calor.

Os primeiros resultados obtidos são referentes à validação do modelo numérico como mencionado na seção 2.3. Na Fig. 4 estão ilustrados os perfis obtidos com os mesmos dados de entrada utilizados por Biloe *et al.*, (2001b).

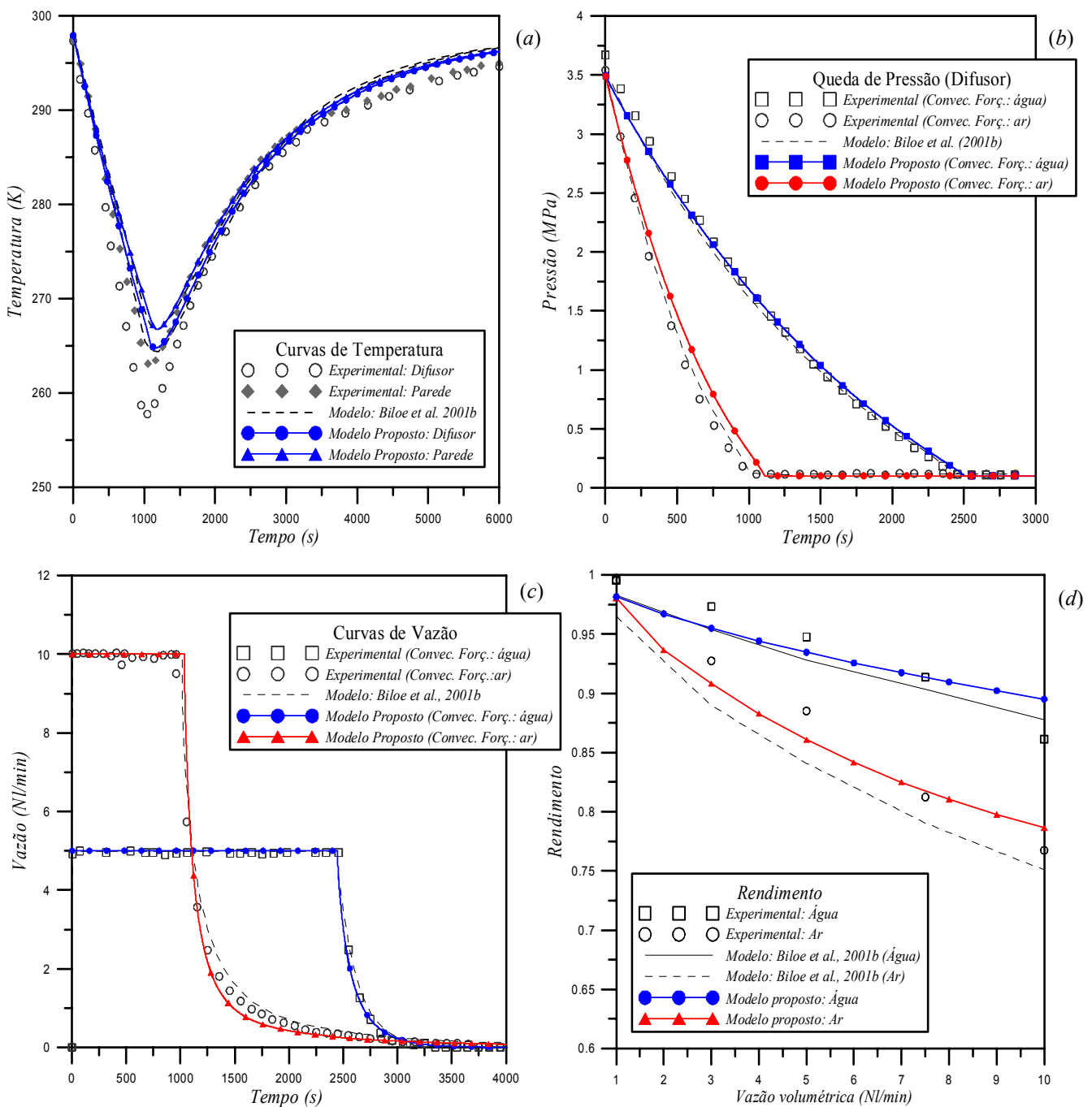


Figura 4. Comparação dos perfis de (a) temperatura, (b) pressão, (c) vazão volumétrica e (d) rendimento entre os resultados obtidos pelo presente trabalho e por Biloe *et al.*, (2001b).

Para a análise dos resultados referentes à descarga do reservatório toroidal, sob convecção forçada, os campos de temperatura para cada vazão de descarga são ilustrados em três instantes que melhor representam o resfriamento do meio poroso (a atuação dos trocadores de calor), e em um instante após a pressão no difusor atingir o valor da pressão atmosférica (0,101 MPa). Por outro lado, o campo de pressão é mostrado apenas nesse último instante, mostrando que o reservatório ainda está sob pressão, mesmo quando o valor atmosférico é verificado na válvula. Para o modelo cuja descarga é realizada com convecção natural não há necessidade de se mostrar os campos de pressão e temperatura em diagramas bidimensionais (r, θ) uma vez que o valor de h_w é o mesmo em torno de toda a seção transversal.

Na simulação de descarga com vazão de 7 L/min, verificam-se, após 1 hora, temperaturas no difusor por volta de 297,4 K. Na parede envolvida pelo trocador de calor obtém-se 297,8 K, tal qual ilustrado na Fig. 5a. O resfriamento máximo nesse instante é de 0,73 K (difusor). Após 15 horas de descarga, a máxima variação de temperatura verificada (Fig. 5b) foi de aproximadamente 0,92 K. A temperatura obtida no difusor para o referido instante é de 297,2 K, enquanto que na parede do reservatório registrou-se o valor de 297,7 K para a região envolvida pelo trocador de calor.

A pressão no difusor atinge o valor atmosférico em aproximadamente 15 horas e 42 minutos (942 minutos). Nesse instante registram-se as menores variações de temperatura no difusor e na parede com os respectivos valores de 297,2 K e 297,7 K respectivamente. Após 16 horas (960 min), os efeitos térmicos da dessorção já são consideravelmente reduzidos, como visto na figura 5c. Para esse momento, a variação de temperatura no difusor se dá por volta de 0,58 K, para a qual a temperatura no difusor aumenta para 297,5 K e na interface “parede” no trecho submetido à circulação de água, para 297,8 K. Para o trecho do perímetro não envolvido pelas galerias dos trocadores de calor, a temperatura obtida fica em torno de 297,8 K. Na figura 5d, é perceptível a variação de pressão ao longo de r . Mesmo 18 minutos depois da pressão no difusor ter se igualado à pressão atmosférica, os resultados da simulação indicam, para esse instante, uma pressão de aproximadamente 0,123 MPa na interface “parede”.

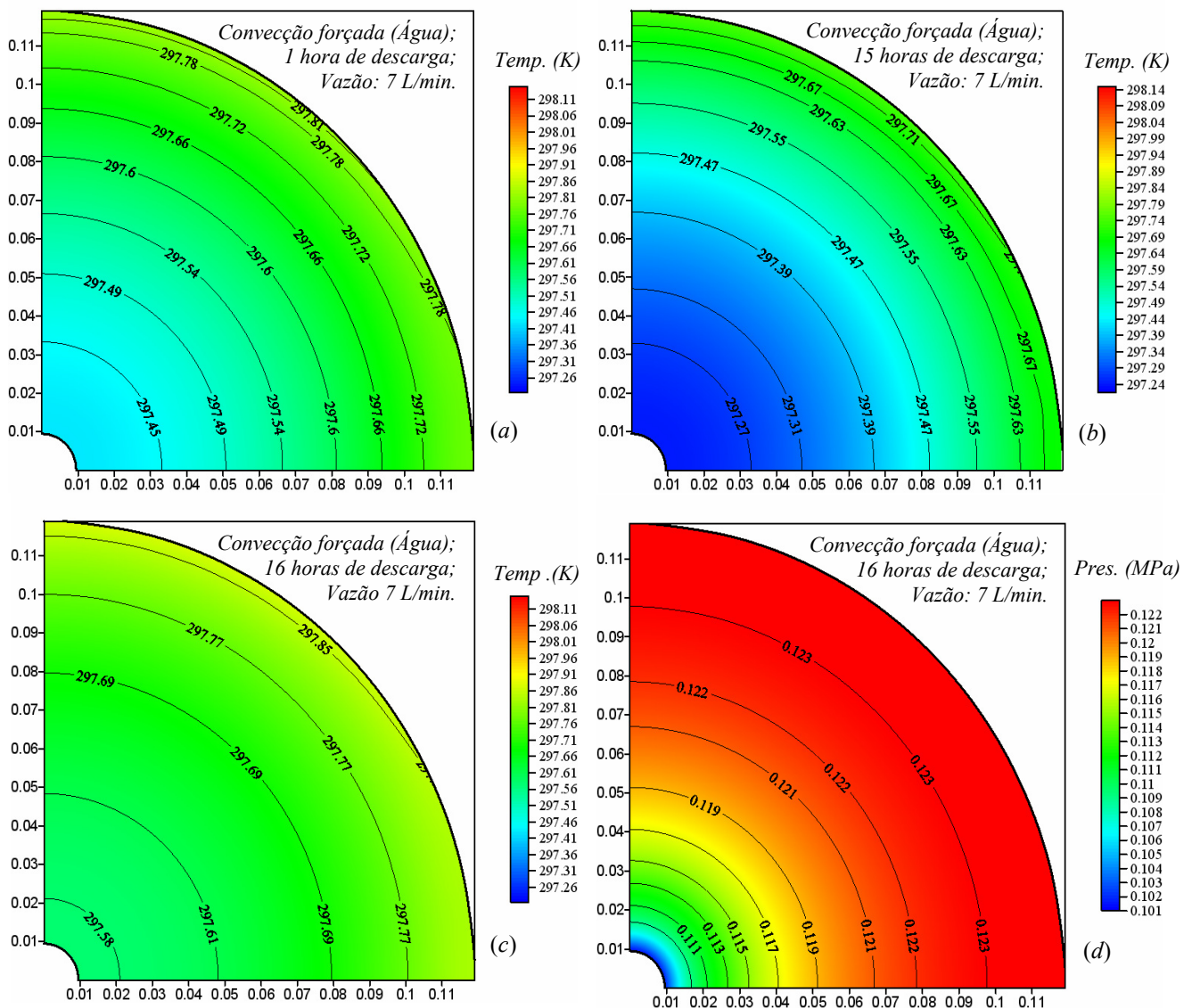


Figura 5. Diagramas de temperatura para uma vazão de descarga de 7 L/min. Descarga após (a) 1 h, (b) 15 h, (c) 16 h. (d) Diagrama de pressão alguns minutos depois da pressão na válvula se igualar à pressão atmosférica.

Para a descarga de 13 L/min com circulação de água nos trocadores de calor, vê-se, na Fig. 6a, que 1 hora após o início da descarga as temperaturas no difusor e na parede ($\theta = 90^\circ$) são, respectivamente 296,7 K e 297,5 K. Em $\theta = 0^\circ$ obteve-se 297,4 K devido a essa região não sofrer influência dos trocadores de calor. Na Fig. 6b se verifica o campo de temperatura para 8 horas (480 min) de descarga. Nesse período se percebe uma queda de temperatura de aproximadamente 1,72 K. Associadas a essas variações estão as menores temperaturas registradas no difusor (296,4 K) e na parede do reservatório (297,4 K).

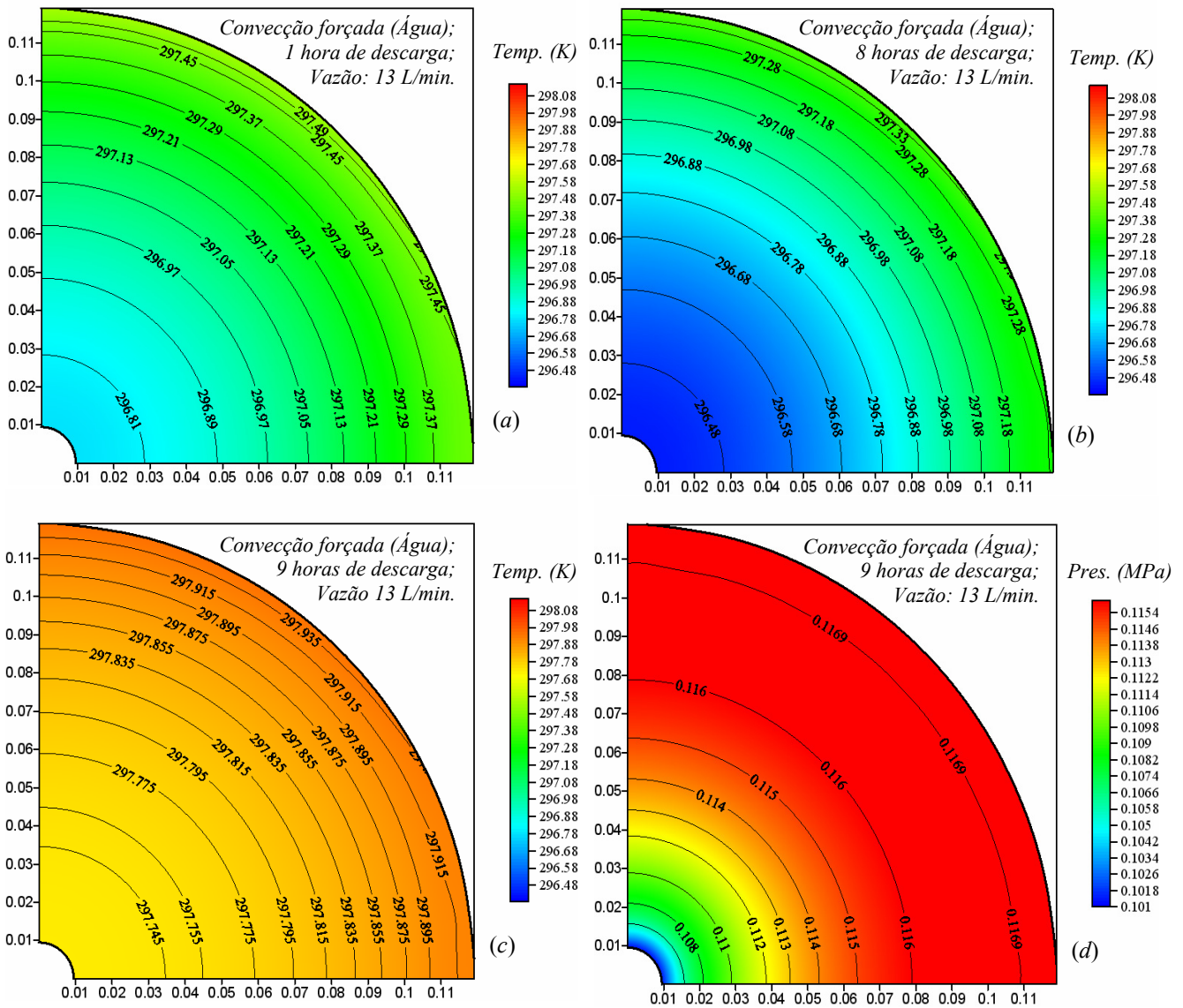


Figura 6. Diagramas de temperatura para uma vazão de descarga de 13 L/min. Descarga após (a) 1 h, (b) 8 h e (c) 9 h. (d) Diagrama de pressão alguns minutos depois da pressão na válvula se igualar à pressão atmosférica.

Depois de 9 horas (540 min) de descarga (Fig. 6c), a queda de temperatura diminui de intensidade em função da diminuição dos efeitos térmicos conseqüentes do consumo de gás, que também começa a ser reduzido. Para esse momento, obtém-se como queda de temperatura na interface “difusor” 0,42 K. A temperatura obtida no difusor é de aproximadamente 297,7 K. No mesmo instante obtém-se 297,9 K na interface “parede” para a superfície envolvida pelos trocadores de calor e 297,91 K para o trecho submetido somente à convecção natural.

A ultima configuração de descarga simulada para convecção forçada é a de vazão constante de 19 L/min. Como nos processos anteriores, são mostrados na Fig. 7 o comportamento do campo de temperatura para instantes relevantes do processo de descarga. Além disso, na figura 7d é ilustrado o campo de pressão para 23 minutos depois da diminuição da vazão na válvula do reservatório. Os mesmos aspectos físicos referentes à descarga relatados com as vazões anteriores estão presentes para essa vazão, porém, como pode ser observado através de comparações entre as figuras, com mais intensidade nessa última situação.

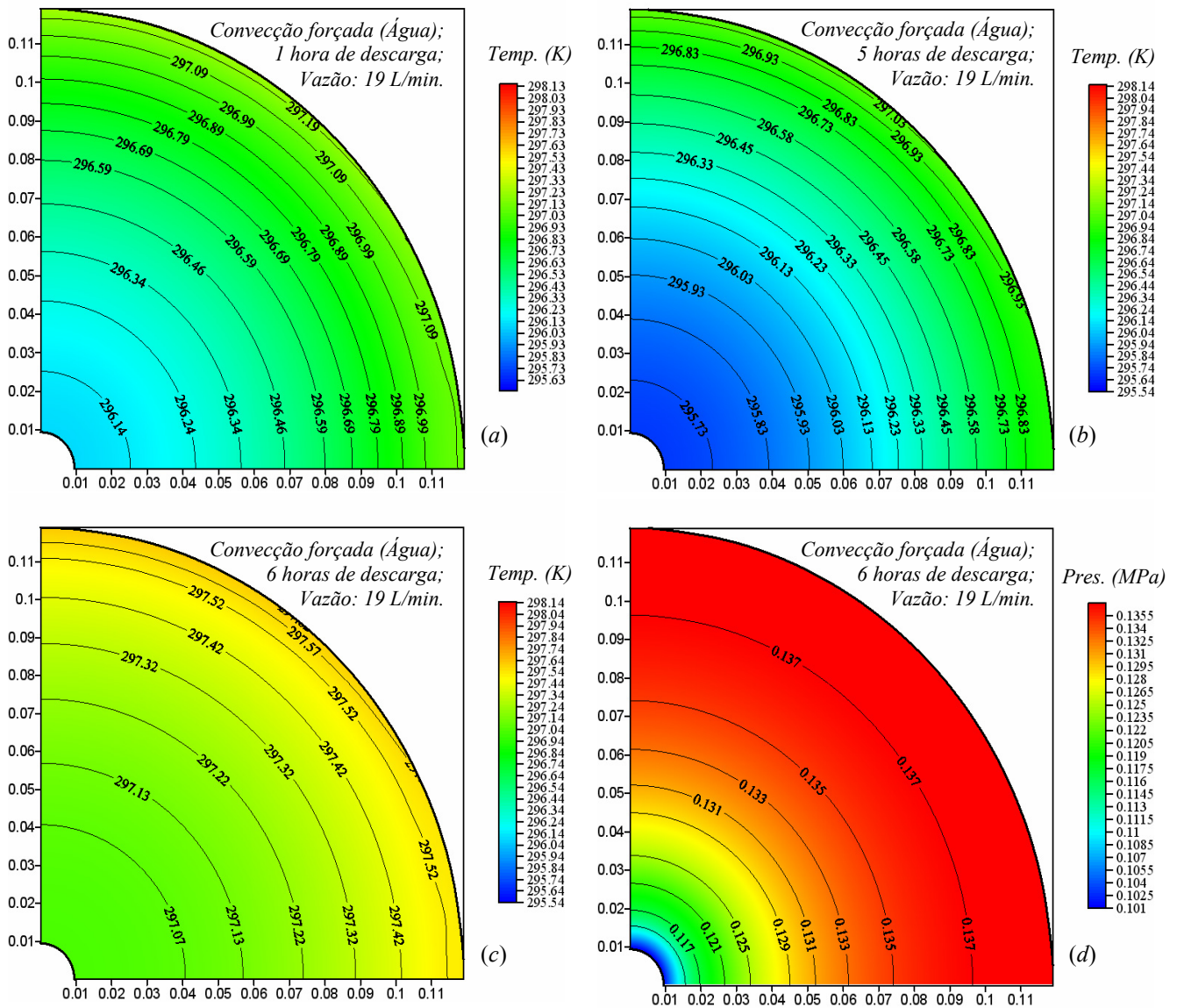


Figura 7. Diagramas de temperatura para uma vazão de descarga de 19 L/min. Descarga após (a) 1 h, (b) 5 h e (c) 6 h. (d) Diagrama de pressão alguns minutos depois da pressão na válvula se igualar à pressão atmosférica.

Dentre todas as simulações apresentadas ao longo desta seção é perceptível que para o modelo cuja vazão volumétrica de descarga é menos intensa (7 L/min), obtêm-se variações de temperatura mais amenas, em relação ao modelo que apresenta descarga mais rápida (19 L/min). Isso se reflete na disponibilidade com que o gás deixa o reservatório, conseqüentemente, também em seu desempenho como será visto mais adiante. Maiores vazões de descarga desencadeiam maiores efeitos térmicos (resfriamento do meio poroso), necessitando-se de tempos ligeiramente mais longos para o equilíbrio térmico, mesmo com os trocadores de calor atuando quase que em todo perímetro da seção transversal do reservatório.

Para que se perceba a relevância dos trocadores de calor envolvendo o reservatório proposto, ilustra-se na Fig. 8a o processo de descarga sob convecção natural, ou seja, sem os trocadores de calor. Uma vez que não há variação da temperatura ou outro parâmetro em relação à direção angular, os resultados dessas simulações são ilustrados em forma de curvas. Comparando-se as quedas de temperatura para a descarga com convecção natural e forçada, verifica-se que, para a menor vazão considerada (7 L/min), a maior variação de temperatura obtida é de 12,8 K sem os trocadores de calor, enquanto que, considerando-se a convecção forçada, indicou-se anteriormente o valor de 0,94 K. Isso representa uma redução de 92,6 % na variação de temperatura para as situações extremas.

Para a vazão de 13 L/min, a redução na queda de temperatura, comparando-se a descarga do gás sob convecção forçada (Fig. 6c) em relação à convecção natural (Fig. 8a), é de aproximadamente 92 %, e a maior variação de temperatura registrada com convecção natural é de 22,29 K. Ao se descarregar o toróide a uma vazão de 19 L/min, verifica-se para o modelo com convecção natural uma variação máxima de temperatura de 28,98 K. Comparando essa queda de temperatura com a obtida com a mesma vazão, porém com circulação de água nos trocadores de calor, têm-se uma diferença de 2,62 K, representando uma redução de quase 91 % do resfriamento do leito.

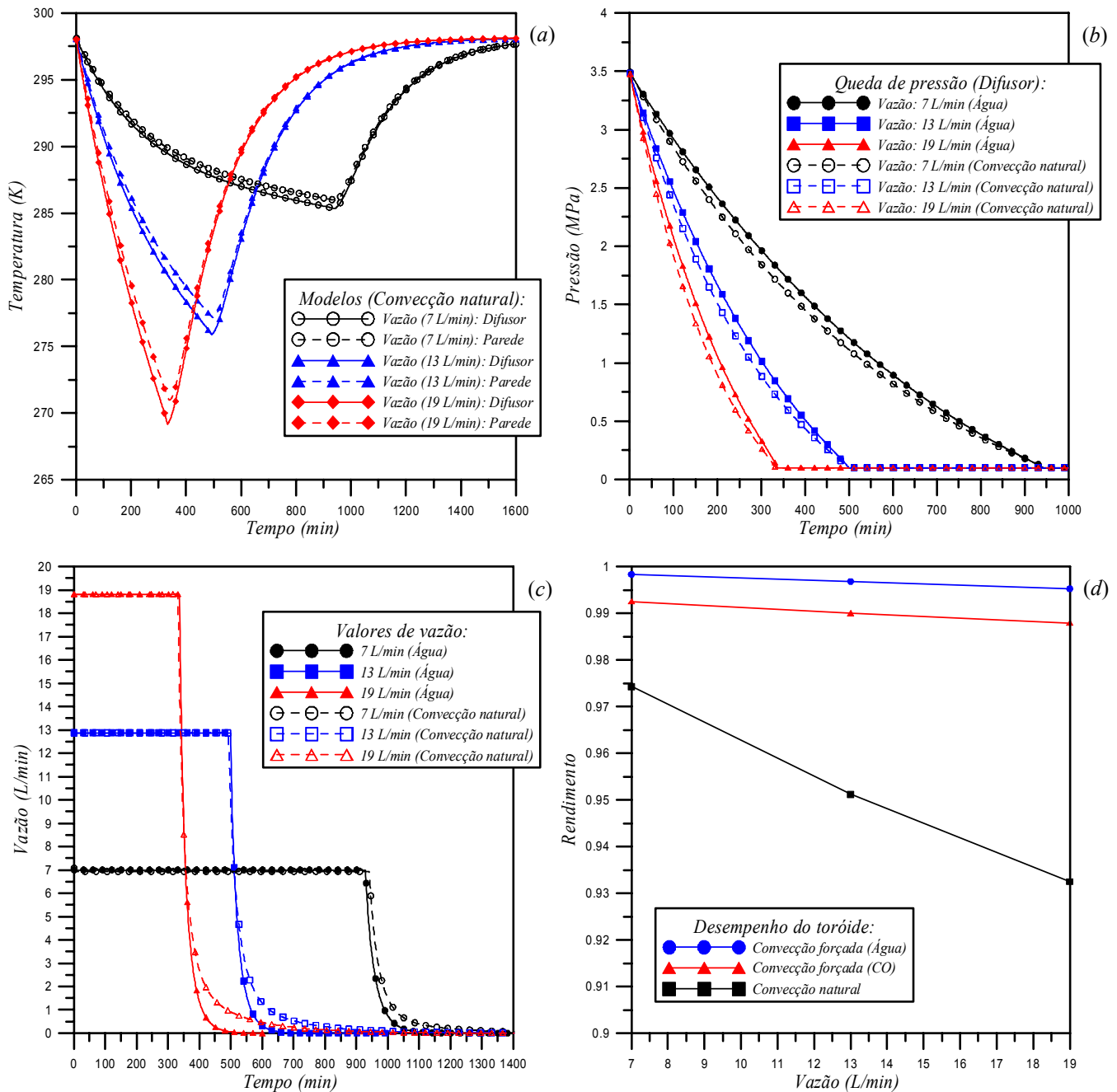


Figura 8. Perfis de temperatura, pressão, vazão e rendimento obtidos para o modelo de descarga do reservatório toroidal (a) sem trocador de calor e (b), (c) e (d) para os modelos com trocador de calor.

Das Figs. 8b e 8c, percebe-se, por meio das discrepâncias entre as curvas, a influência da convecção forçada para o comportamento da vazão, principalmente após a pressão na válvula do reservatório atingir o valor atmosférico (Fig. 8b). Embora os gráficos apresentados até o momento sejam um indicador do desempenho do reservatório de geometria toroidal, devido às diferentes variações de temperatura diante da vazão volumétrica adotada para a descarga, as curvas ilustradas na Fig. 8d representam, de fato, o desempenho de cada configuração proposta, de maneira que suas curvas convergem para as considerações discutidas até agora.

Por fim, é ainda verificado nas curvas de desempenho que, para valores substanciais de vazão de descarga, principalmente quando associados à não utilização das galerias, rendimentos considerados insatisfatórios para a viabilização de um sistema de armazenamento de gás por adsorção são obtidos, uma vez que o percentual de perda para a maior vazão proposta é de 6,76 % (convecção natural), que, somada ao percentual perdido durante o enchimento do reservatório (30,4 %), representa 37,16 % do gás utilizado para o consumo no motor. Para o escoamento de água, ou outros fluidos (monóxido de carbono - CO), sobre a parede do reservatório durante sua descarga, verifica-se quase que uma estabilidade do percentual de rendimento, mesmo para solicitações variadas (entre 7 e 19 L/min).

5. Conclusões

Considerando as análises realizadas para as configurações propostas com e sem trocador de calor associado ao reservatório no instante da descarga, se verificou um excelente desempenho para a circulação de água, onde foram constatados rendimentos maiores que 98 % para altas solicitações de vazão do motor (19 L/min). Assim, a desconsideração desse dispositivo pode chegar a inviabilizar uma possível aplicação de sistemas de adsorção para o setor veicular, haja vista os baixos rendimentos obtidos para tal configuração de descarga. 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 o uso de um sistema de adsorção no setor de abastecimento automotivo popular. A utilização de reservatórios cuja forma geométrica propicia a “retomada” do porta-malas do automóvel é mais atrativa ao mercado automotivo, uma vez que, dependendo do modelo proposto, é possível empregar-se reservatórios que ocupem menores espaços dentro do veículo e ao mesmo tempo ofereçam maior capacidade de armazenamento que os cilindros tradicionais. 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 se 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 da adsorção e dessorção.

6. Referências

- Biloe, S., Goetz, V. and Mauran, S., 2001a, “Characterization of Adsorbent Composite Blocks for Methane Storage”, *Carbon*, Vol. 39, p. 1653-1662.
- Biloe, S., Goetz, V. and Mauran, S., 2001b, “Dynamic Discharge and Performance of a New Adsorbent for Natural Gas Storage”, *Environmental and Energy Engineering*, Vol. 47, pp. 2819-2830.
- Biloe, S., Goetz, V. and Mauran, S., 2002, “Optimal Design of an Activated Carbon for an Adsorbed Natural Gas Storage System”, *Carbon*, Vol. 40, pp. 1295-1308. (b)
- Chang, K. J. and Talu, O., 1996, “Behavior and Performance of Adsorptive Natural Gas Storage Cylinders During Discharge”, *Applied Thermal Engineering*, Vol. 16, pp. 359-374.
- Higdon, A., Ohlsen, E. H., Stiles, W. B. and Weese, J. A., 1985, “Mechanics of Materials”, 2a ed., New York, Wiley and Sons, 502 p.
- Lozano-Castelló, D., Alcañiz-Monge, J., Casa-Lilo, M. A., Cazorla-Amorós, D. and Linares-Solano, A., 2002, “Advances in the Study of Methane Storage in Porous Carbonaceous Materials”, *Fuel*, Vol. 81, pp. 1777-1803.
- Mota, J. P. B., Saatdjian, E. and Tonder, D., 1995, “A Simulation Model of a High-Capacity Methane Adsorptive Storage System”, *Adsorption*, Vol. 1, pp. 17- 27.
- Mota, J. P. B., Saatdjian, E. and Tonder, D., 1997, “Dynamics of Natural Gas Adsorption Storage System Employing Activated Carbon”, *Carbon*, Vol. 35, pp. 1259-1270.
- Ozawa, S., Kusumi, S. and Ogino, Y., 1976, “Physical Adsorption of Gases at High Pressure IV. A Improvement of the Dubinin-Astakhov Equation”, *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 56, pp. 83-91.
- Patankar, S. V., 1980, “Numerical Heat Transfer and Fluid Flow”, Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Sciences, 1st ed. Philadelphia, Taylor & Francis, 197 p.
- Vasiliev, L. L., Kanonchik, L. E., Mishkinis, D. A. and Rabetsky, M. I., 2000, “Adsorbed Natural Gas Storage and Transportation Vessels”, *International Journal of Thermal Science*, Vol. 39, pp. 1047-1055.
- Souza, M. R. A., 2005, “Simulação Computacional dos Efeitos da Adsorção Durante os Ciclos de Carga e Descarga de Gás em Reservatórios Não-Convencionais”, Dissertação de Mestrado, 189 p., Universidade Federal do Rio Grande do Norte, UFRN, Natal, Brasil.
- Souza, M. R. A. And Lima, J. A., 2005, “Simulação Numérica da Influência da Convecção forçada no Processo de Descarga de Sistemas de GNA”, 3º Congresso de P & D em Petróleo e Gás Natural, Salvador, Bahia, Brasil, Vol. 1, p. 139.

COMPUTATIONAL SIMULATION OF THE DYNAMIC GAS DISCHARGE IN A RESERVOIR OF DOUGHNUT GEOMETRY

Souza, Márcio Rodrigo de Araújo

Lima, João Alves de

Universidade Federal do Rio Grande do Norte – PPGEM/DEM/UFRN

Av. Senador Salgado Filho, sn. Lagoa Nova, Natal - RN, 59078-970

mrengmec@yahoo.com.br

jalima@dem.ufrn.br

***Abstract.** Application of materials with adsorbent properties for natural gas storage has been studied with frequency due to inherent capacity of porous media to decrease pressure inside the reservoirs that store this fuel. To this pressure drop is always associated the possibility of use of reservoirs made of lighter materials, such as aluminum or composites. However, the use of adsorbents in the system of refueling of an automobile causes serious inconveniences, such as thermal effects during the charge/discharge cycle and loss of capacity due to the filling of the reservoir with the porous media. Based on these observations, previous studies indicate that the storage by adsorption in cylindrical reservoirs is not viable for popular consumption. However, the low levels of pressure attained with the gas adsorption points towards the project of reservoirs with non-cylindrical geometry, where the storage capacity can be increased and the space occupied by the traditional cylinder better employed, thus overcoming the inconveniences of the storage by adsorption. Therefore, in the present work the thermal effect and the performance of a reservoir of doughnut geometry are simulated numerically for the gas discharge process, by adopting galleries around its transversal section for fluid flow, in order to intensify the convective heat transfer in the wall, and then, minimizing the thermal effects due to the adsorption process. The results obtained through simulation with and without the heat exchanger (galleries) are compared, in order to evidence the influence that the heat exchanger exerts on the viability of the adsorption systems, including the non-cylindrical reservoirs.*

Keywords: numerical methods, finite volume method, adsorption, natural gas, non-cylindrical reservoirs