



XXII CONGRESSO
BRASILEIRO DE
ENGENHARIA QUÍMICA
23 a 26 de Setembro de 2018
Hotel Maksoud Plaza
São Paulo - SP



XVII ENCONTRO BRASILEIRO
SOBRE O ENSINO DE
ENGENHARIA QUÍMICA
27 a 29 de Setembro de 2018
USP
São Paulo - SP

MODELAGEM SOBRE A FUSÃO DE ÁCIDO ESTEÁRICO COMO MATERIAL DE MUDANÇA DE FASE PARA ADSORÇÃO DE GÁS NATURAL

DE MARTINO, V. R.¹; COSTA, A. B.¹; LAZARI, J. P.¹; PANTOJA, C. E.¹; PAIVA, J. L.¹e SECKLER, M. M.¹

¹ Universidade de São Paulo, Escola Politécnica, Departamento de Engenharia Química
E-mail para contato: demartino.victor@usp.br

RESUMO – *O uso de gás natural como fonte de energia está em alta demanda, porém são necessárias tecnologias para sua armazenagem. A adsorção mostra-se com grandes vantagens, entretanto devido à liberação de energia durante esse processo, sua eficiência diminui. Uma maneira de resolver esse problema é a utilização de material de mudança de fase. O objetivo é o estudo teórico da taxa de fusão, logo, utilizou-se ácido esteárico envolto em uma esfera de cobre e realizou a simulação para temperaturas de 1, 5 e 10°C acima de sua temperatura de fusão. Com apenas cinco graus de aumento de diferença a redução de tempo para a fusão total foi de oito vezes.*

1. INTRODUÇÃO

Gás natural (GN) é um recurso não renovável ainda disponível em grande quantidade, subutilizado em seu potencial energético, ecologicamente mais atrativo em relação a outros combustíveis fósseis devido a sua queima ser mais limpa. Estima-se que o gás natural será o recurso de combustível fóssil de mais rápido crescimento, com consumo global aumentando 64% em trinta anos (GÜR, 2016). Logo, sistemas de armazenagem de gás natural são essenciais devido à flutuação da demanda de energia. Há duas formas habituais: gás natural comprimido (GNC), que requer pressões acima de 200 bar; e gás natural liquefeito (GNL), o qual precisa ser armazenado em temperaturas abaixo de 150 K. Outra tecnologia de armazenamento é o gás natural adsorvido (ANG), na qual o gás é armazenado na superfície de um material poroso a pressões moderadas, de apenas 30 a 40 bar.

Durante o processo de adsorção há a liberação de energia, reduzindo a capacidade de armazenamento. Uma das propostas para minimizar esse problema é acrescentar ao leito de adsorção substâncias que absorvam esta energia na forma de calor latente, os materiais de mudança de fase (do inglês, *phase change materials*, PCM) (ZALBA et al., 2003). Zakaria e George (2011) mostraram que, num leito inicialmente a 25 °C, a temperatura pode chegar até 80 °C. Ácidos carboxílicos podem ser empregados como PCM para esta aplicação, uma vez que apresentam características desejáveis como temperatura de fusão compatível, baixa variação de volume durante a fusão, alta capacidade calorífica, fusão congruente. O desempenho de PCM em aplicações de ANG ainda não é bem conhecido. Por isso, nesta pesquisa a taxa da fusão do PCM em uma esfera metálica será estudada teoricamente. Espera-



XXII CONGRESSO
BRASILEIRO DE
ENGENHARIA QUÍMICA
23 a 26 de Setembro de 2018
Hotel Maksoud Plaza
São Paulo - SP



XVII ENCONTRO BRASILEIRO
SOBRE O ENSINO DE
ENGENHARIA QUÍMICA
27 a 29 de Setembro de 2018
USP
São Paulo - SP

se que os achados desta pesquisa sejam úteis para fornecer subsídios ao projeto de dispositivos de PCM.

2. METODOLOGIA

A taxa de fusão de um PCM de ácido carboxílico foi estudada teoricamente (VITORINO *et al.*, 2013). Foi considerada uma cápsula esférica de cobre, $k_w = 401 \text{ W/m.K}$, $L = 2 \text{ mm}$ e $R_w = 10 \text{ mm}$, preenchida com ácido esteárico puro, com T_m de $69,3^\circ\text{C}$ e $L_{at} = 222,16 \text{ kJ/kg}$, $k = 0,173 \text{ W/m.K}$ e $\rho = 940,8 \text{ kg/m}^3$. Em torno da esfera, circula gás metano, $k_g = 0,0342 \text{ W/m.K}$, $C_{pg} = 2240 \text{ J/kg.K}$, $m_{ig} = 1,118 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$, $w_g = 0,172 \text{ kg/s}$, imerso num leito de carvão ativado, com $e_b = 0,33$ e $D = 0,15 \text{ m}$ (MALONEY, 2008).

As resistências ao transporte de calor na camada do PCM sólido, na parede do reservatório e no gás adsorvido são associadas em série e as seguintes hipóteses: o calor é descarregado simetricamente na direção radial; a interface líquido-sólido permanece com temperatura T_m (sub-resfriamento desprezível); o PCM líquido permanece na temperatura de fusão (superaquecimento insignificante); as temperaturas limite são definidas pela continuidade dos fluxos de calor na interface da parede interna do reservatório com o PCM sólido, e na interface da parede externa do reservatório com o gás adsorvido e, por último, as propriedades físicas do PCM são constantes. O balanço de energia sob a hipótese de condução de calor com simetria esférica e estado quase estacionário se reduz para:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \cong 0 \quad (1)$$

Ao resolver e aplicar as condições de contorno para a camada de PCM sólido:

$$r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \cong \frac{T_R - T_m}{(1/r_{SL}) - (1/R)} \quad (2)$$

De forma análoga, a solução aplicada à parede do reservatório é dada por:

$$r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \cong \frac{T_{RW} - T_R}{(1/R) - (1/R + L)} \quad (3)$$

E a continuidade do fluxo de calor implica em:

$$r_{SL}^2 \rho \lambda \frac{dr_{SL}}{dt} \cong k \frac{T_R - T_m}{(1/r_{SL}) - (1/R)} \cong k_w \frac{T_{RW} - T_R}{(1/R) - (1/R + L)} \cong h(T_{RW} - T_C) \quad (4)$$

Ao se adicionar as resistências equivalentes e isolar-se o tempo:

$$t = \frac{R^2 \rho \lambda}{k \Delta T} \frac{1}{2} \left[1 - \left(\frac{r_{SL}}{R} \right)^2 \right] - \frac{1}{3} \left[1 - \left(\frac{r_{SL}}{R} \right)^3 \right] \left[1 - \frac{k}{k_w} \left(\frac{L}{R + L} \right) - \frac{kR}{h(R + L)^2} \right] \quad (5)$$

Em variáveis adimensionais:

$$\frac{1}{2} \left[1 - (1 - \zeta)^{2/3} \right] - \frac{1}{3} \zeta (1 - f_{mix}) = \phi \tau \quad (6)$$

Sendo $\phi = C_p \Delta T / \lambda$ (número de Stefan), $\tau = -\alpha t / R^2$ (número de Fourier), $\zeta = 1 - (r_{sl}/R)^3$ (corresponde à fração de calor descarregado na solidificação) e $f_{mix} = \frac{k}{k_w} \left(\frac{L}{R+L} \right) +$

$\frac{kR}{h(R+L)^2}$ (fator de controle misto, que combina limitações na condução através da parede da cápsula e transferência de calor). O algoritmo do modelo é apresentado na figura 1. Especificadas as temperaturas iniciais do PCM e do invólucro, o algoritmo calcula a posição radial r_{sl} onde ocorre a mudança de fase ao longo do tempo.

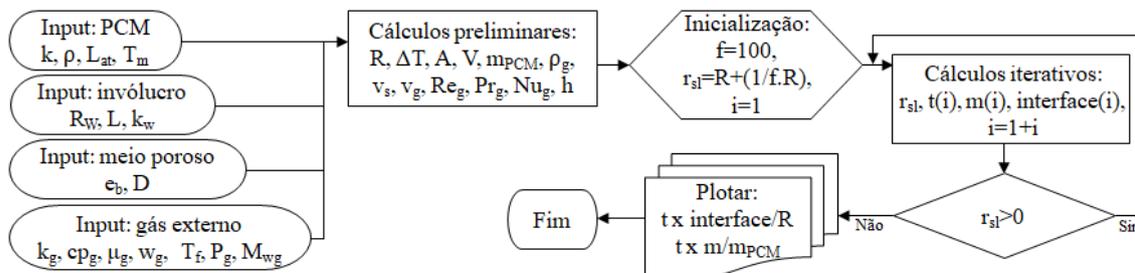


Figura 1 - Algoritmo da modelagem matemática sobre fusão de PCM.

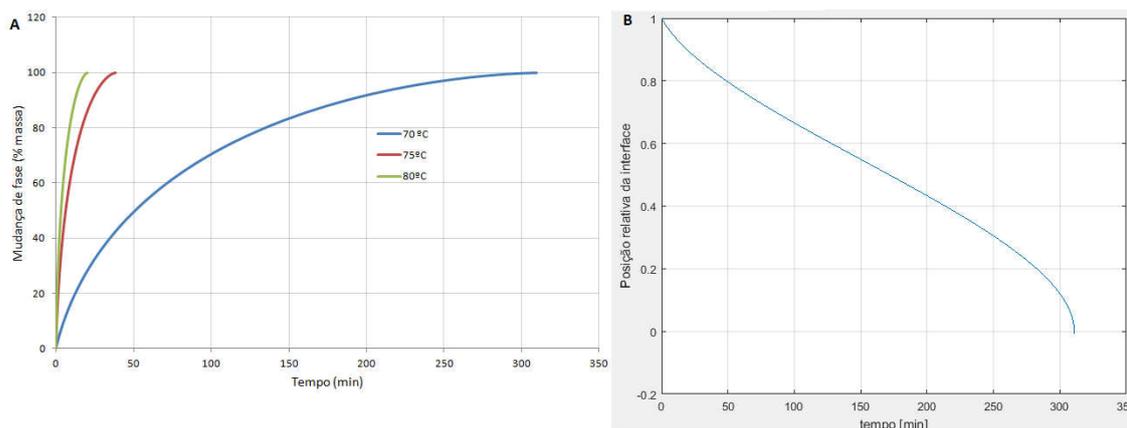


Figura 2 - Fração mássica de PCM fundido para meio adsorvente em 70, 75 e 80°C (A) e avanço da interface sólido-líquido para meio adsorvente a 70°C (B).

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Simulou-se uma esfera com 10 mm de raio, $P_g = 3,5$ atm e temperatura do meio adsorvente de 70 (muito próxima a temperatura de fusão do ácido), 75 e 80 °C. Pode-se notar pela figura 2A que a fusão inicial é rápida porque o sólido está mais próximo ao cobre e, na medida em que o líquido é formado, ocorre o aumento da resistência térmica do fundido, que reduz a taxa de fusão. Temos, também, que o tempo para a completa fusão é de 310, 38 e 20 min, com o aumento da temperatura. Logo, um aumento de temperatura de apenas 5 °C reduz em oito vezes do tempo de fusão. Para esta simulação, o sólido é fixo no centro da esfera, por isso o perfil da interface é o mostrado na figura 2B. Considerando o sólido livre, este poderia



XXII CONGRESSO
BRASILEIRO DE
ENGENHARIA QUÍMICA
23 a 26 de Setembro de 2018
Hotel Maksoud Plaza
São Paulo - SP



XVII ENCONTRO BRASILEIRO
SOBRE O ENSINO DE
ENGENHARIA QUÍMICA
27 a 29 de Setembro de 2018
USP
São Paulo - SP

entrar em contato com a parede de cobre, devido à diferença de densidades entre sólido e líquido, intensificando a troca térmica e assim aumentando a taxa de fusão.

4. CONCLUSÃO

O tempo de fusão de um PCM, ácido esteárico, inserido em um recipiente esférico em um leito de gás natural adsorvido foi estudado. Mostrou-se que a taxa de fusão do ácido diminui ao longo do tempo devido ao aumento da quantidade de ácido esteárico líquido. Foi mostrado também que a frente de fusão avança temporalmente de forma não linear.

5. NOMENCLATURA

T_c – temperatura do gás adsorvido, °C	ΔT – diferença entre T_m e T_c , °C
T_m – temperatura de fusão do PCM, °C	t – tempo, s
λ – calor latente do PCM, J/kg	L – espessura da parede da cápsula, m
ρ – densidade do PCM, kg/m ³	k – condutividade térmica do PCM, W/m °C
r_{sL} – distância radial da interface sólido-líquido, m	k_w – condutividade térmica da parede da cápsula, W/m °C
R – raio da parede interna da cápsula, m	R_w – raio da parede externa da cápsula, m
α – difusividade térmica do PCM, m ² /s	e_b – porosidade do leito
D – diâmetro interno do leito, m	P_g – pressão do leito, atm
k_g – condutividade térmica do gás, W/m °C	C_{pg} – calor específico do gás, J/kg.K
w_g – vazão mássica, kg/s	L_{at} – calor latente do PCM, J/kg
m_{ig} - viscosidade do gás, Pa.s	M_{wg} – peso molecular do gás

6. REFERÊNCIAS

GÜR, T. M. Comprehensive review of methane conversion in solid oxide fuel cells: Prospects for efficient electricity generation from natural gas. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 54, p. 1–64, 2016.

MALONEY, J. O. **Perry's Chemical Engineers' Handbook**. 8th editio ed. [s.l.] The McGraw-Hill Companies, 2008.

VITORINO, N.; ABRANTES, J. C. C.; FRADE, J. R. Solutions for Heat or Cold Discharge from Encapsulated Phase-Change Materials. **Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals**, v. 64, n. 6, p. 421–435, dez. 2013.

ZAKARIA, Z.; GEORGE, T. the Performance of Commercial Activated Carbon Absorbent for Adsorbed Natural Gas Storage. **International Journal of Research and Reviews in Applied Sciences**, v. 9, n. 2, p. 225–230, 2011.

ZALBA, B. et al. **Review on thermal energy storage with phase change: Materials, heat transfer analysis and applications**. [s.l: s.n.]. v. 23