

## COMPARAÇÃO DE MODELOS MATEMÁTICOS DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR EM REATORES DE SISTEMAS DE REFRIGERAÇÃO POR QUIMIOSORÇÃO

**Gelon Freitas Leite<sup>1</sup>, M.Sc. Carlos Javier Noriega Sanchez<sup>2</sup>, Maurício Darabas Ronçani<sup>3</sup>, Prof. Dr. Rogério Gomes de Oliveira<sup>4</sup>**

<sup>1</sup> Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC)/Campus Araranguá/Engenharia de Energia/  
gelon@hotmail.com

<sup>2</sup> UFSC / Centro Tecnológico/ Engenharia Mecânica/ noriegacarlosjavier@hotmail.com

<sup>3</sup> UFSC/Campus Araranguá/Engenharia de Energia/ mauriciodarabas@hotmail.com

<sup>4</sup> UFSC/Campus Araranguá/Engenharia de Energia/ rogerio.oliveira@ararangua.ufsc.br

**Resumo:** Dois tipos de modelos matemáticos para o reator de um chiller por adsorção química foram comparados para verificar a conveniência de se utilizar o modelo simplificado como uma primeira aproximação para determinar o máximo diâmetro do leito adsorativo. O modelo simplificado considerou o reator como tendo as características de transferência de calor de um tubo aletado, com um adsorvente composto inserido entre as aletas, e com temperatura uniforme. O segundo tipo de modelo considerou os gradientes de temperatura axiais e radiais do leito adsorativo. Ambos os modelos matemáticos foram simulados em ambiente MatLab, e consideravam que o fluido de transferência de calor poderia escoar no centro radial ou na periferia do leito adsorativo. Com o modelo simplificado, determinou-se quais as dimensões máximas do leito adsorativo para que fluxo de calor entre o leito adsorativo e o fluido térmico seja suficiente para a realização dos processos de adsorção e dessorção no tempo especificado. As variáveis independentes manipuladas nas simulações foram a região do escoamento do fluido térmico, o tipo de aletas, o tempo de ciclo e o valor do coeficiente de contato entre a parede do tubo e o adsorvente. De modo geral, o escoamento na região periférica do leito e o uso de aletas axiais propiciaram maiores potências de refrigeração. Por outro lado, o escoamento na região periférica do leito resultou em menores coeficientes de desempenho em comparação ao escoamento na região central do leito, mantendo-se iguais as demais condições de operação. Os resultados obtidos com o modelo simplificado para o reator de aletas radiais foram comparados com os resultados obtidos com segundo tipo de modelo, o qual apresentou resultados em média, 32,2% menores para escoamento na região periférica do leito e 53,6% menores para escoamentos na região central, de forma que o modelo simplificado serve como uma primeira aproximação para se determinar a máxima espessura do leito adsorativo.

**Palavras-Chave:** Adsorção, Climatização, Reator, Refrigeração, Transferência de calor

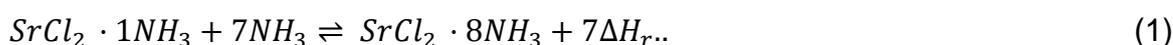
### 1 INTRODUÇÃO

Sistemas de refrigeração por adsorção são compostos basicamente por um ou mais reatores, por um evaporador e por um condensador. Nesse ciclo de refrigeração por adsorção, o vapor refrigerante não é comprimido mecanicamente, mas termicamente por um material adsorvente.

Comparando os sistemas de refrigeração por adsorção com os de refrigeração por compressão mecânica, podemos ressaltar o potencial dos sistemas de adsorção em economizar energia quando alimentados por fontes térmicas residuais de baixas temperaturas ou com energia solar (VIEIRA, 2009).

Neste trabalho, modelou-se o reator de um sistema de refrigeração por adsorção, considerando o reator tem as mesmas características de transferência de calor de um

tubo aletado e que a temperatura no interior do leito pode ser considerada uniforme e igual a temperatura de equilíbrio no processo de sorção. O modelo serviu para fazer uma estimativa inicial da máxima espessura do leito adsorativo, para que o sistema pudesse operar adequadamente, em um tempo pré-determinado. Os valores de potência de refrigeração e coeficiente de desempenho do modelo simplificado foram comparados aos valores obtidos com um modelo mais detalhado, que considerava o gradiente de temperatura na direção radial e axial. Ambos os modelos consideraram o leito adsorativo como uma mistura de grafite expandido e  $SrCl_2$  e  $NH_3$  como refrigerante. O processo de adsorção e dessorção ocorreram conforme a seguinte equação:

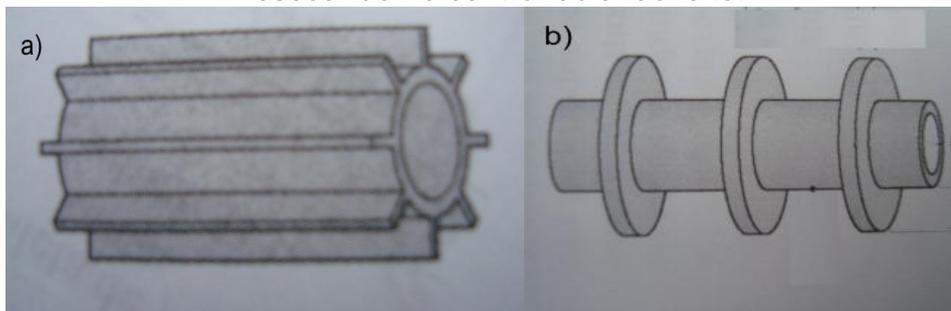


## 2 MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO REATOR

### 2.1 Configuração interna do reator

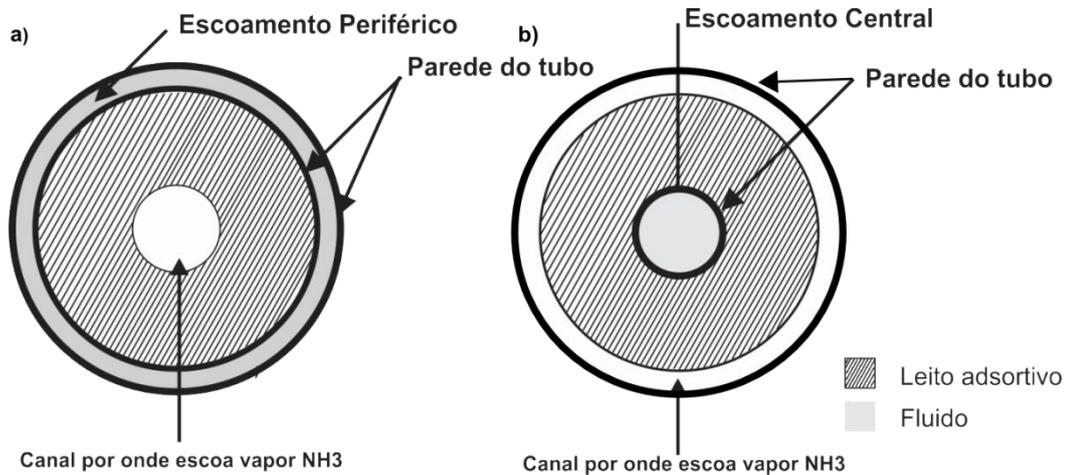
O reator que foi considerado como feito de tubos concêntricos, com aletas envolvendo o adsorvente para melhorar a condução de calor, uniformizando a temperatura no adsorvente. As aletas poderiam ser inseridas axialmente ao tubo, ou radialmente, conforme ilustrado na Fig. 1.

**Figura 01.** a) Aletas axiais. b) Aletas radiais. Configuração com fluido térmico escoando no centro radial do leito.



Considerou-se que o fluido de transferência de calor poderia escoar no centro radial do leito adsorativo, ou em uma região anular ao redor desse leito, conforme pode ser observado na Fig. 2. Independentemente da configuração de reator estudada, o raio interno do leito adsorativo foi igual a 10 mm quando o escoamento de fluido foi na região central do leito, e 5 mm quando o escoamento de fluido ocorreu na região periférica. Na configuração com aletas radiais, considerou-se que havia 75 aletas, enquanto que na configuração com aletas axiais, havia 8 aletas.

**Figura 02.** a) Escoamento periférico ao leito adsortivo. b) Escoamento no interior do leito adsortivo. As aletas não estão apresentadas.



## 2.2 Modelo matemático de transferência de calor simplificado

A taxa de transferência de calor no modelo simplificado foi obtida através da seguinte equação:  $q'' = \frac{T_r}{R_{conv} + R_{cond} + R_{conj} + R_{cond2}}$ , onde  $T_r$  é a diferença de temperatura de entre o leito adsortivo e o fluido,  $R_{conv}$  é a resistência convectiva entre o fluido e a parede do reator,  $R_{cond}$  é resistência de condução dentro do tubo da parede do reator,  $R_{conj}$  é a resistência do conjunto de aletas e  $R_{cond2}$  é a resistência de condução no interior do leito adsortivo. As equações para o cálculo das resistências térmicas foram obtidas em Kakaç & Liu (2002), Shah & Sekulic (2003) e Incropera, 2008.

A capacidade de refrigeração do sistema ( $Q_r$ ) foi calculada pela seguinte equação:  $Q_r = \frac{m_{sa}}{M_{sa}} * D_{nh3} * [h_{vp} - c_{nh3}(T_c - T_{ev})] * fc * M_{nh3}$ , onde  $m$  é a massa,  $M$  é a massa molar,  $D_{NH3}$  é a variação entre o número de moles de amônia inicial e final na etapa de adsorção,  $h_{vp}$  é a entalpia de vaporização da amônia,  $c$  é o calor específico, o subscrito  $nh3$  corresponde a amônia, o subscrito  $sa$  corresponde ao sal,  $T_c$  é temperatura de condensação e  $T_{ev}$  é a temperatura de evaporação e  $fc$  é um fator de conversão, considerado como 0.8.

O calor total consumido pelos componentes do sistema  $Q_{aleta}$ ,  $Q_{g.expandido}$ ,  $Q_{tubo}$ ,  $Q_{sal}$ ,  $Q_{nh3}$ ,  $Q_{min}$ , foram calculados pelo seguinte grupo de equações:

$$Q_{aleta} = m_a * c_a * T_v; \quad Q_{g.expandido} = m_g * c_g * T_v; \quad Q_{tubo} = m_t * c_t * T_v;$$

$$Q_{sal} = m_{sa} * c_{sa} * T_v; \quad Q_{nh3} = m_{nh3} * c_{nh3} * T_v; \quad Q_{mim} = \frac{m_{sa}}{M_{sa}} * \Delta H_r * D_{nh3} * fc, \text{ onde } \Delta H_r$$

é entalpia de reação,  $T_v$  é a diferença entre temperatura inicial e final do leito adsortivo na

etapa de dessorção e os subscritos **a**, **g**, **t**, correspondem, respectivamente ao conjunto de aletas, ao grafite expandido e à parede do reator.

O calor consumido pelo sistema ( $Q_g$ ) é a soma do calor consumido pelos seus componentes.

A mínima potência de fornecimento de calor necessária para o funcionamento do sistema ( $P_o$ ) é dada pela razão entre o total  $Q_g$  e o tempo de ciclo ( $D_t$ ) sendo descrita pela seguinte equação:  $P_o = \frac{Q_g}{D_t}$ .

### 2.2.1 Hipóteses simplificativas do modelo

A temperatura foi considerada constante em todo o leito adsorativo, e o fluido térmico da etapa de adsorção foi considerado água, enquanto que na etapa de dessorção foi óleo de motor.

### 2.3 Modelo matemático de transferência de calor com gradiente de temperatura

A difusão de calor do leito do reator é descrito pela seguinte equação:

$\hat{C}_L \frac{\partial T_L}{\partial t} = \lambda_L \frac{\partial^2 T_L}{\partial r^2} + \frac{\lambda_L}{r} \frac{\partial T_L}{\partial r} + \lambda_L \frac{\partial^2 T_L}{\partial z^2} + 7N_s \Delta H_r \frac{\partial x}{\partial t}$ , onde é a  $\hat{C}_L$  capacidade térmica volumétrica do leito de adsorvente,  $T_L$  é a temperatura do leito adsorvente,  $\lambda_L$  é a condutividade térmica efetiva do leito adsorvente,  $N_s$  é a densidade molar do sal,  $r$  é o raio do leito adsorativo e  $x$  é a conversão local da reação.

A velocidade da reação foi calculada com as seguintes equações, respectivamente, nos períodos de adsorção e dessorção:

$\frac{\partial x}{\partial t} = k_{Ad} \exp\left(\frac{E_{Ad}}{RT_L}\right) (1-x)^{W_{Ad}} \left(\frac{P_c - P_{eq}}{P_{eq}}\right)$ ;  $\frac{\partial x}{\partial t} = k_{Ds} \exp\left(\frac{E_{Ds}}{RT_L}\right) (x)^{W_{Ds}} \left(\frac{P_{eq} - P_c}{P_{eq}}\right)$ , onde  $k$  é a constante de Arrhenius,  $E$  é a energia de ativação e  $W$  é um fator de ajuste e os subscritos **Ad** e **Ds** estão respectivamente relacionados com as reações de adsorção e dessorção. O valor destes parâmetros foram obtidos na literatura (HUANG, 2004).  $P_c$  é a pressão imposta pelo evaporador ou pelo condensador, dependendo do período de ciclo,  $P_{eq}$  é a pressão de equilíbrio para a reação entre o sal e o refrigerante e  $R$  é a constante dos gases ideais.

No sentido radial da aleta, o gradiente de temperatura foi obtido com a seguinte equação:  $\hat{C}_{Fent} \frac{\partial T_{Fent}}{\partial t} = \lambda_{Fent} \frac{\partial^2 T_{Fent}}{\partial r^2} + \frac{\lambda_{Fent}}{r} \frac{\partial T_{Fent}}{\partial r} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{(T_{Fent} - T_L)}{R_{ct}}$ , onde  $\varepsilon$  é a espessura da aleta,  $T_{Fent}$  é a temperatura da aleta,  $\lambda_{Fent}$  é a condutividade térmica efetiva da aleta e  $R_{ct}$  é a resistência de contato entre o leito e a aleta.

O gradiente de temperatura na direção radial do fluido de transferência de calor foi considerado desprezível, e o gradiente de temperatura na direção axial foi obtido com a seguinte equação:  $\hat{C}_{Fl}(\frac{\partial T_{Fl}}{\partial t} + V \frac{\partial T_{Fl}}{\partial z}) = \frac{\pi D_W h_{cv}}{A_t} (T_p - T_{Fl})$ , onde  $V$  é a velocidade do fluido,  $D_W$  é o diâmetro da parede do tubo,  $h_{cv}$  é o coeficiente de transferência de calor por convecção,  $A_t$  é a área de fluxo transversal,  $T_{Fl}$  é a temperatura do fluido e  $T_p$  é a temperatura da parede do tubo.

A capacidade de refrigeração do sistema ( $Q_r$ ) foi calculada pela seguinte equação:  $Q_r = \sum_{i=0}^{\Delta t/2} 7M_{nh3} V o N_s [h_{vl} - c_{nh3}(T_c - T_{ev})] \frac{\partial x_i}{\partial t}$ , onde  $V o$  é o volume do leito adsorvivo e  $\Delta t/2$  é o tempo da etapa de adsorção ou de dessorção.

O calor consumido pelo sistema durante o período de dessorção do ciclo ( $Q_D$ ) é:  $Q_D = \dot{m}_{Fl} \sum_{i=0}^{\Delta t/2} [(T_{ent.i} - T_{saida.i})]$ , onde  $T_{ent}$  é a temperatura do fluido de transferência de calor na entrada do reator,  $T_{saida}$  é a temperatura do fluido de transferência de calor na saída do reator e  $\dot{m}_{Fl}$  é o vazão mássica do fluido de transferência de calor.

## 2.4 Equações utilizadas nos dois modelos matemáticos.

### 2.4.1 Coeficientes de desempenho

O COP é expresso como a razão entre a capacidade de refrigeração da máquina  $Q_e$  e o calor consumido pela máquina durante o período de regeneração do ciclo  $Q_R$ , pode ser descrito pela equação:  $COP = \frac{Q_r}{Q_D}$ , a densidade de potência de refrigeração ( $DPR$ ) e a potência específica de refrigeração ( $PER$ ) estão relacionados com a capacidade de refrigeração do sistema através da seguinte equações:  $DPR = \frac{Q_e}{V o_{reator} \Delta t/2}$ ;  $PER = \frac{Q_e}{m_{Ads} \Delta t/2}$ , onde  $m_{Ads}$  é a massa de adsorvente no reator.

### 2.5 Método utilizado na discretização.

O método das diferenças finitas foi utilizado para discretizar as equações diferenciais de transferência de calor. Este método consiste na aproximação da equação diferencial ordinária por uma equação algébrica<sup>8</sup>.

### 2.6 Condições de simulação

As variáveis independentes alteradas para a comparação do desempenho do reator nas diferentes configuração, através do uso do modelo simplificado estão

<sup>8</sup><http://dem->

[server.dem.uminho.pt/UCs/MEC/Transf\\_Calor\\_A/Reservado\\_Transf\\_Calor\\_A/Textos/MN%20em%20transf%20calor.pdf](http://server.dem.uminho.pt/UCs/MEC/Transf_Calor_A/Reservado_Transf_Calor_A/Textos/MN%20em%20transf%20calor.pdf)

apresentadas na Tabela 1. A temperatura do fluido térmico na etapa de dessorção era igual a 145 °C, na etapa de adsorção foi de 30 °C, e o tempo de ciclo foi de 45 minutos.

**Tabela 03** – Dados para comparação entre aletas radiais e axiais.

<b>Experimento</b>	<b>Geometria</b>	<b>Escoamento</b>
1	Axial	Central
2	Radial	Central
3	Axial	Periférico
4	Radial	Periférico

A tabela 2 mostra o valor das variáveis independentes utilizadas na comparação entre o modelo simplificado e o modelo com gradientes de temperatura. A vazão de fluido térmico foi mantida constante e igual a 87,5 lpm, e as temperaturas do fluido térmico foram as mesmas utilizadas no modelo simplificado.

**Tabela 04** – Dados para comparação entre o modelo simplificado e o completo.

<b>Experimento</b>	<b>Escoamento</b>	<b>Raio externo do leito [mm]</b>	<b>Tempo [min]</b>	<b>Hc [Wm<sup>-2</sup>K<sup>-1</sup>]</b>
5	Externo	17,2	30	100
6	Externo	25,9	60	100
7	Externo	30,4	60	1000
8	Interno	19,4	30	100
9	Interno	22,8	60	100
10	Interno	24,4	60	1000

### 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Tabela 3 mostra que a utilização do escoamento externo ao invés do escoamento interno aumentou na média, a DRP de 64,5 kW/m<sup>3</sup> para 72 kW/m<sup>3</sup> e a PER de 129 W/kg para 146,5 W/kg; porém, causando uma redução no COP de 0,43 para 0,41.

**Tabela 05** – Resultados para comparação entre aletas radiais e axiais.

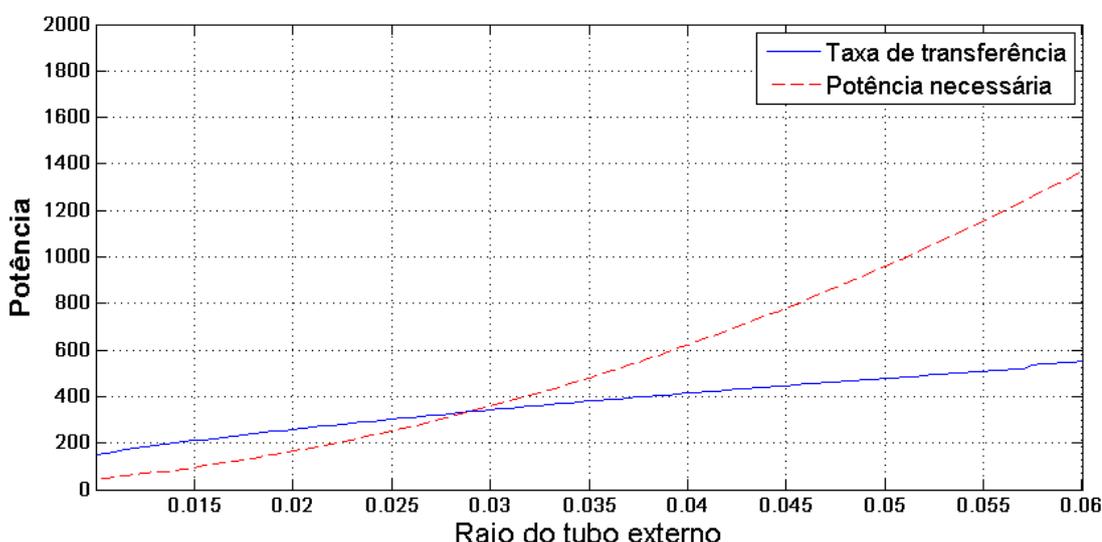
<b>Experimento</b>	<b>DRP [kW/m<sup>3</sup>]</b>	<b>PRE [W/kg]</b>	<b>Raio de encontro [m]</b>	<b>Potência [W]</b>	<b>COP</b>
1	65	131	0,031	300	0,43
2	64	127	0,033	330	0,43
3	76	155	0,029	350	0,41
4	69	138	0,031	350	0,41

Considerando a geometria das aletas, observou-se que a utilização de 8 aletas axiais ao invés de 75 aletas radiais aumentou na média, o DRP de 66,5 kW/m<sup>3</sup> para 70,5 kW/m<sup>3</sup> e a PER de 132,5 W/kg para 143,0 W/kg, sem influenciar o COP.

A partir dos resultados foi possível observar que a geometria com 8 aletas axiais e o escoamento anular aumentou a potência de refrigeração, enquanto que diminuiu o COP.

A finalidade do modelo simplificado é estimar qual valor de raio onde a taxa de transferência de calor no reator e a potência de aquecimento necessária se igualam, pois este valor o máximo possível para um tempo de ciclo pré-estabelecido. A Figura 03 demonstra que nas condições do experimento 3, o máximo valor do raio externo do leito é de 29 mm.

**Figura 03** – Gráfico da taxa de transferência de calor e potência necessária em função do raio externo.



Na Tabela 04 são apresentados os valores de potência específica de refrigeração, densidade de potência de refrigeração e coeficiente de desempenho obtidos com os dois modelos estudados.

**Tabela 06** – Comparação entre o modelo simplificado e o modelo completo.

Experimento	Modelo	PER	DPR	COP	Diferença (%)
5	Simplificado	193,7	96,8	0,43	45,3
	Completo	105,8	52,9	0,40	
6	Simplificado	94,4	47,2	0,43	28,8
	Completo	67,3	33,6	0,40	
7	Simplificado	93,7	46,8	0,43	22,7
	Completo	72,4	36,2	0,40	
8	Simplificado	193,7	96,8	0,43	67,9
	Completo	62,0	31,0	0,40	
9	Simplificado	94,8	47,4	0,43	47,0
	Completo	50,3	25,1	0,40	

<b>10</b>	Simplificado	94,2	47,1	0.43	45,8
	Completo	51,0	25,5	0.40	

Constatou-se que o modelo simplificado sempre forneceu valores maiores que aqueles fornecido pelo modelo com gradientes de temperatura, de forma que o modelo simplificado pode ser utilizado para indicar o máximo valor do raio que deve ser utilizado em um estudo mais detalhado com o modelo que considera os gradientes de temperatura. Por exemplo, na condição experimental 5, o modelo simplificado indicava que para atingir uma PRE de cerca de 194 W/kg em um ciclo de 30 minutos, o tamanho máximo do raio externo do leito deveria ser de 17,2 mm. No entanto, o segundo modelo indicou que com este raio, a PRE seria de cerca de 106 W/kg, e um raio menor deveria ser considerado para que esta PRE fosse atingida. Como o segundo modelo considera gradientes de temperatura, tanto radiais, como axiais, o tempo de simulação de uma sequência de ciclos é relativamente longo devido ao tamanho da malha numérica, e dependendo das dimensões do reator, é necessário mais de 1 h para simular um ciclo. Portanto, a vantagem de utilizar o modelo simplificado para obter uma primeira aproximação de raio é que ele evita o esforço computacional de simular desnecessariamente reatores com raios maiores que aqueles indicados pelo modelo simplificado.

#### 4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os resultados das simulações mostraram que o uso de 8 aletas axiais e do escoamento de fluido térmico na região periférica do leito aumentou a potência de refrigeração específica e a densidade de potência de refrigeração do sistema, de forma que esta configuração é indicada para a construção de reatores com menor volume. Todavia, o escoamento de fluido térmico na região central do leito aumentou o COP. A comparação entre o modelo simplificado e o modelo com gradientes de temperatura demonstrou que o modelo simplificado pode ser usado para a fase inicial de desenvolvimento de um projeto do reator, servindo para estimar o máximo raio do leito adsorvente, para que o sistema opere adequadamente sob certas condições.

#### REFERÊNCIAS

HUANG, H.J. et al. Modeling of gas-solid chemisorption in chemical heat pumps. **Separation and purification technology**, v. 34, p. 191-200, 2004.

INCROPERA, F.P.; BERGMAN, T.L.; DEWITT, D.P. **Fundamentos de transferência de calor e de massa**. 6. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2008.

KAKAÇ, S.; LIU, H. **Heat Exchangers, selection, rating and Thermal design**. Boca Raton: CRS Press, 2002.

SHAH, R.; SEKULIC, D. **Fundamentals of Heat Exchanger Desing**. New Jersey: Wiley & Sons, 2003.

VIEIRA, H. M. **Estudo teórico e experimental de coletor adsortivo**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Centro de Tecnologia, UFPB, Paraíba, 2009, 96p.