

Separação de Misturas Gasosas por Fenômeno Termoacústico

Palavras-Chave: *separação de misturas gasosas; termoacústica; mudanças climáticas*

Autores:

GABRIEL LOPES SODERI, FEM, UNICAMP

Orientador Prof. Dr. FLÁVIO DE CAMPOS BANNWART, FEM, UNICAMP

INTRODUÇÃO

O principal desafio da espécie humana nos dias atuais se trata do momento de emergência climática no qual o planeta se encontra. Um dos problemas enfrentados é a busca de tecnologias de desenvolvimento sustentável economicamente viáveis de serem implementadas. Dentre as principais causas da emergência climática, podemos citar o acúmulo excessivo de gases do efeito estufa, os quais contribuem para o aquecimento do planeta, podendo desequilibrar o meio natural.

Considerando tais fatos, uma das possíveis formas de mitigar o problema é a pesquisa de novos métodos de captura dos gases do efeito estufa. Sendo assim, a utilização da área da termoacústica torna-se uma boa candidata para a busca de tais tecnologias. A ciência envolvida na termoacústica viabiliza projetos de motores e refrigeradores que, apesar de serem de baixo desempenho energético, possuem uma montagem relativamente simples quando comparados com modelos atuais existentes.

Dentre uma das diversas aplicações da termoacústica na virada milênio, foi descoberto

que é possível utilizar métodos termoacústicos a fim de se separar uma mistura gasosa dos gases nobres Hélio e Xenônio. Desse modo, comprovando que a separação de gases por meio de fenômeno termoacústico é possível, surge a possibilidade de se investigar este método de separação de gases para outros tipos de misturas gasosas.

Então por meio do software *DeltaEC*, criado por pesquisadores do ramo de termoacústica do Laboratório Nacional de Los Alamos, Estados Unidos, foi possível por meio desta pesquisa, realizar simulações de separação de duas misturas gasosas: gases oxigênio e nitrogênio; e gases metano e carbônico.

METODOLOGIA

A principal ferramenta utilizada nesta pesquisa foi o software *DeltaEC*. Por meio deste, é possível realizar simulações termoacústicas de geradores, refrigeradores e de separações de misturas gasosas, nosso principal objetivo na pesquisa. No entanto, o software não possuía originalmente os arquivos necessários para a separação das misturas propostas. No manual

fornecido pelos desenvolvedores do software, são fornecidas equações cujos os valores dos coeficientes de uma mistura gasosa qualquer são inseridos em um arquivo de texto. Essas equações tem como resultado valores de propriedades físicas da mistura gasosa ao se variar parâmetros como temperatura e pressão, necessárias para a simulação. Na Equação (1) temos um exemplo de equação, nela através da pressão e temperatura, é possível obter a condutividade térmica e a viscosidade dinâmica individual de cada gás.

$$\begin{aligned} \text{propriedade} = C_0 + C_1 \frac{p_m}{T + C_2 p_m} + C_3 T + C_4 T^2 \\ + C_5 T^{C_6} + C_7 p_m^2 T^{C_8} + p_m C_9. \end{aligned} \quad (1)$$

Assim, com todos os coeficientes necessários, foi possível criar um arquivo de texto, permitindo a inserção das misturas gasosas utilizadas, no software. Para a obtenção dos coeficientes, utilizamos tabelas que contém as propriedades dos gases e o software *NIST MINI-REFPROP*.

O software DeltaEC funciona através de integrações numéricas ao longo de segmentos de geometria definida pelo usuário. Dentre as opções de geometria a serem utilizadas, temos o segmento *Begin*, responsável por fornecer as condições iniciais da simulação, o segmento "*MIXCIRC*", responsável pela separação e os segmentos "*RPN*", responsáveis por calcular os equacionamentos propostos pelo usuário durante uma simulação.

```

0 BEGIN          Separacao N2 e O2
1.0000E+5 a Mean P Pa
450.00 b Freq Hz
300.00 c TBeg K
4000.0 d |p| Pa
0.0000 e Ph(p) deg
9.6980E-5 f |U| m^3/s
0.0000 g Ph(U) deg
-1.6000E-6 i Ndot mol/s
0.8000 j nL
Optional Parameters
o2n2.tpm Gas type

```

Figura 1: Captura de tela do segmento "Begin" do ambiente do software.

Por meio da utilização dos segmentos do DeltaEC, foi possível projetar a simulação para a separação de misturas gasosas. Para a simulação de separação de 1 mol de mistura de 20% de gás oxigênio e de 80% de gás nitrogênio, foi utilizado um tubo circular (segmento *MIXCIRC*) com 0.5 m de comprimento, $3.10^{-5} m^2$ de área transversal, e também possui poros circulares de raio $1.10^{-3} m$. Então, por meio do segmento "Begin", podemos determinar que no mesmo tubo é injetada a mistura a uma taxa de $1.60 \mu mol/s$ em uma das extremidades. A taxa de variação volumétrica dentro do tubo é de $9.698.10^{-5} m^3/s$. No mesmo tubo é mantida uma frequência acústica de $450 Hz$ e uma pressão acústica de $4000 Pa$. A temperatura se mantém em $300 K$.

A mistura com proporções novas é removida da outra extremidade e então, formando um sistema em cascata, é possível retirar essa nova mistura, e realizar um novo processo de separação. Assim, como demonstra o gráfico da Figura 2 foi possível se obter uma separação parcial dos gases oxigênio e nitrogênio. No entanto, este gráfico apresenta apenas um processo e não o resultado final após a aplicação do sistema em cascatas. E apesar de ter ocorrida a separação, a diferença de proporção de oxigênio e nitrogênio no ar é tão grande que o processo não chega a ser viável

quando comparado com métodos mais tradicionais, fazendo-se necessária a adição de estágios em cascata a fim de aumentar a pureza da separação.

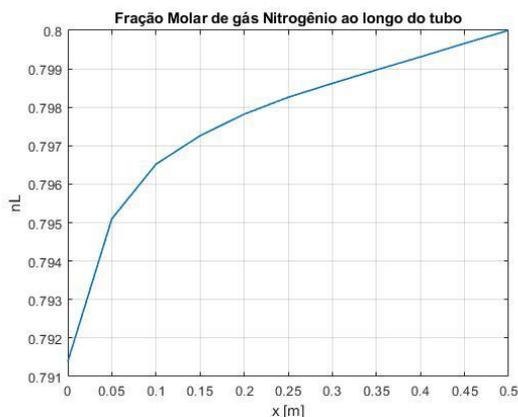


Figura 2: Gráfico contendo a fração molar de N_2 no tubo com mistura injetada em $x = 0.5$ m.

Já para a separação de 1 mol de mistura de 50% de gás carbônico e de 50% de gás metano, as mesmas condições iniciais da mistura anterior foram utilizadas, no entanto foi necessário alterar alguns parâmetros geométricos do segmento "MIXCIRC", pois os valores anteriores em conjunto com a utilização da mistura gasosa atual geravam um fluxo estrangulado no segmento. Para isso foram realizadas duas alterações: a área transversal foi aumentada de $3.10^{-5} m^2$ para $3.10^{-1} m^2$, e o raio dos poros circulares foi aumentado de $1.10^{-3} m$ para $1.10^{-1} m$. A condição inicial de fração molar do gás leve no segmento "Begin" também foi alterada, com o valor atual de 0,5, adequando a simulação para a nova mistura.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para a separação da mistura dos gases oxigênio e nitrogênio, obtivemos o seguinte gráfico, para o caso de um único estágio. A mistura é injetada em $x = 0.5$ m, e a fração molar obtida de N_2 ao final é $nL = 0.79139$. O resultado pode ser observado no gráfico da Figura (2).

Com a utilização de estágios em cascata, obtivemos um gráfico que relaciona a pureza da mistura com o número de estágios aplicados. O gráfico pode ser observado na figura a seguir.

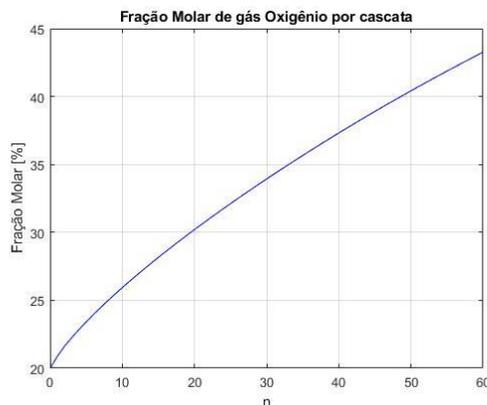


Figura 3: Gráfico contendo a fração molar de O_2 para cada estágio.

Também realizamos uma análise do fluxo energético ao longo do tubo, durante o processo de separação. O gasto energético aumenta conforme se aproxima da extremidade em que a mistura é injetada. O gráfico desta análise pode ser observado a seguir:

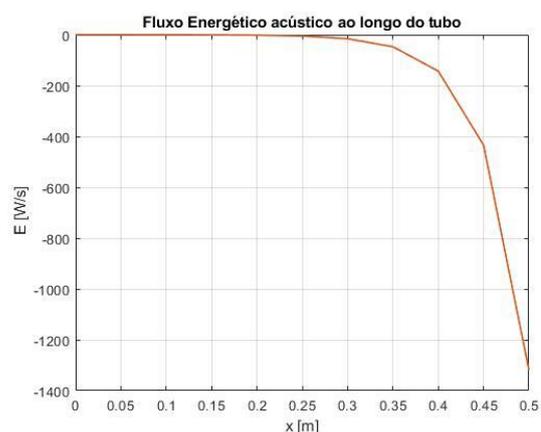


Figura 4: Gráfico contendo o fluxo energético acústico em W, ao longo do tubo.

Já para a separação da mistura dos gases metano e carbônico, os resultados para a separação obtiveram a sua variação na sexta casa decimal. Sendo que ao final do processo, em $x = 0$, a fração molar de metano foi de $nL =$

0.499991. A variação é tão pequena que o gráfico se comporta como uma reta linear.

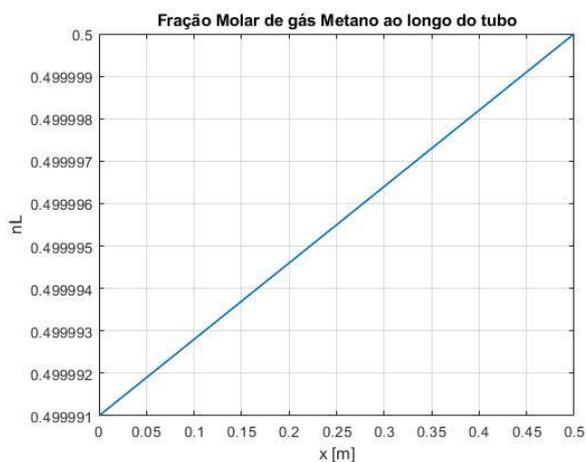


Figura 5: Gráfico contendo a fração molar de CH_4 no tubo com mistura injetada em $x = 0.5$ m.

Como a variação é muito pequena com relação à fração molar de entrada e de saída, a aplicação de estágios em cascata gerou não gerou diferenças significativas, de tal forma que a aplicação destes dados em um gráfico resultaria em um valor muito elevado de cascatas para fosse possível notar uma diferença significativa no processo. Então, realizando a mesma análise feita anteriormente para o fluxo energético ao longo do tubo.

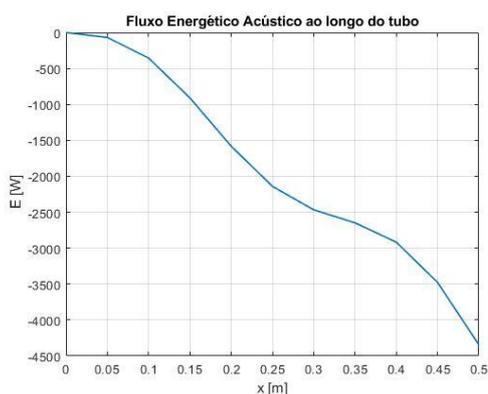


Figura 6: Gráfico contendo o fluxo energético acústico em W, ao longo do tubo.

CONCLUSÕES

Ao analisarmos o gráfico da Figura 2, observamos que ocorreu o fenômeno de

separação ao longo do tubo. No entanto, como a fração molar de nitrogênio na entrada (em $x = 0.5$ m) variou muito pouco com relação a saída, houve a necessidade de se estudar a implementação de estágios em cascata. Para cada simulação realizada, o seu resultado foi utilizado na simulação seguinte de forma a representar os estágios em cascata. No gráfico da Figura 3 observamos que a diferença da fração molar passa a ser maior que 10% apenas para uma quantidade de estágios maior que vinte. Mesmo com o método de cascatas, nota-se que a mudança percentual com a aplicação de cada cascata não é significativa a ponto de o método termoacústico para essa mistura com essas frações molares ser eficiente o bastante para substituir métodos tradicionais. De acordo com o gráfico da Figura 3, seria necessário um sistema com cerca de 60 cascatas para que ao final do processo a concentração de oxigênio na mistura seja de aproximadamente 43%. Na terceira cascata, foi necessário reduzir a frequência para 425Hz para evitar falhas na simulação. É possível aumentar ainda mais a fração molar de gás oxigênio ao final do processo com mais cascatas; no entanto, seria necessário mudar significativamente os parâmetros das próximas cascatas.

De forma similar às análises realizadas para a mistura anterior, podemos realizar as mesmas hipóteses e considerações para a mistura de CO_2 e CH_4 . Quando comparamos o gráfico da Figura 5 com o obtido anteriormente para a mistura de N_2 e O_2 (Figura 2), notamos que o processo presente é bem menos perceptível. Na mistura anterior, as

variações na fração molar entre duas extremidades do tubo eram perceptíveis na segunda casa decimal. Já na mistura presente, as variações são perceptíveis apenas na sexta casa decimal. Da mesma forma que anteriormente, haveria a necessidade de introduzir um sistema de estágios em cascata. No entanto, a tentativa de aplicação deste tipo de sistema se mostrou completamente ineficiente, pois a variação entre estágios se segue na quinta casa decimal da fração molar. Então, para que houvesse uma separação significativa, o número de estágios necessários seria ainda maior que na Figura 3. Portanto, considerando apenas a quantidade elevada necessária de estágios para haver uma separação significativa, a abordagem proposta demonstrou a sua inviabilidade prática, mas cumpriu a proposta da iniciação científica no sentido de revelar essa questão. Há alternativas, porém, que podem ser exploradas a partir desse estudo, como, por exemplo, investigar o efeito de um aumento de pressão estática em prol de um ganho de eficácia nessa separação. Enfim, a abordagem termoacústica é nova e oferece muito espaço para pesquisa.

BIBLIOGRAFIA

- D. A. Geller, G. W. Swift; **Thermoacoustic mixture separation with an axial temperature gradient**. J Acoust Soc Am 1 May 2009; 125 (5): 2937–2945
- F. Bannwart, G. Penelet, P. Lotton, J. Dalmont. **Measurements of the impedance matrix of a thermoacoustic core: Applications to the design of thermoacoustic engines**. Journal of the Acoustical Society of America, 2013, 133 (5), pp.2650-2660
- G. W. Swift, D. A. Geller, S. N. Backhaus; **High-purity thermoacoustic isotope enrichment**. J Acoust Soc Am 1 August 2014; 136 (2): 638–648
- G. W. Swift, P. S. Spoor; **Thermal diffusion and mixture separation in the acoustic boundary layer**. J Acoust Soc Am 1 October 1999; 106 (4): 1794–1800
- G. W. Swift; **Thermoacoustic engines**. J Acoust Soc Am 1 October 1988; 84 (4): 1145–1180.
- Moran M. J., Shapiro H. N., Boettner D. D. e Bailey M. B. (2014). **Princípios de Termodinâmica para Engenharia**, LTC Editora: 7a edição, Rio de Janeiro
- Rott, Nikolaus (1980). "Thermoacoustics". **Advances in Applied Mechanics Volume 20**. Advances in Applied Mechanics. Vol. 20. pp. 135–175
- Shaaban, Mahmoud. (2013). **Experimental investigations on a standing-wave thermoacoustic engine**.
- Swift, G.W. (2002) **Thermoacoustics: A Unifying Perspective for Some Engines and Refrigerators**. Acoustical Society of America, New York.
- Y. S. Touloukian, S. C. Saxena, and P. Hestermans. **Viscosity: Thermophysical Properties of Matter**, Volume 11. Plenum, 1975.
- Y. S. Touloukian, P. E. Liley, and S. C. Saxena. **Thermal Conductivity: Nonmetallic Liquids and Gases: Thermophysical Properties of Matter**, Volume 3. Plenum, 1970.
- Y. S. Touloukian, M. C. Nicolau, C. Y. Ho and R. V. Powel. **Thermal Diffusivity: Thermophysical Properties of Matter**, Volume 10. Plenum, 1973.
- R. B. Bird, W. E. Stewart e E. N. Lightfoot (2002), **Transport Phenomena**. Wiley, 2a Edição