

MODELO MATEMÁTICO DE UN REFRIGERADOR POR ADSORCIÓN DE METANOL EN CARBÓN ACTIVO

MATHEMATICAL MODEL OF AN ADSORPTION REFRIGERATOR OF METHANOL IN ACTIVE COAL

MODELO MATEMÁTICO DE UM FRIGORÍFICO PARA A ADSORÇÃO DE METANOL EM CARVÃO

FARID B. CORTÉS¹, FARID CHEJNE JANNA², JHON W. ZARTHA¹, CESAR ISAZA³

PALABRAS CLAVES:

Carbón activo, Metanol, Refrigeración por adsorción, Modelamiento matemático.

KEYWORDS:

Activated coal, Methanol, Adsorption refrigeration, Mathematical model.

PALAVRAS-CHAVE:

Carvão ativado, Adsorção, Metanol, Modelagem matemática.

RESUMEN

Un modelo matemático no estacionario fue utilizado para describir el proceso de adsorción y desorción de metanol en carbón activado funcional para el entendimiento de un refrigerador alternativo. Este modelo de carácter fenomenológico conformado por los balances de materia, energía y cantidad de movimiento en coordenadas cilíndricas se discretizó en el espacio por el método de volúmenes finitos, utilizando la aproximación de un esquema de diferencia central y upwind de primer orden para los términos difusivos y convectivos, respectivamente, bajo una plataforma FORTRAN 90. Los resultados obtenidos de la simulación fueron validados satisfactoriamente con información experimental obtenida de datos de pruebas de campo y con datos reportados en la literatura, presentando errores inferiores al 1.6% para la etapa de adsorción – evaporación de un ciclo de refrigeración. El modelo permite obtener los perfiles de temperatura, presión, densidad y velocidad del gas en dirección radial como también la temperatura del sólido y la cantidad adsorbida (o desorbida) de metanol en el lecho de carbón activado, durante las etapas de adsorción / evaporación y desorción / condensación.

Recibido para evaluación: 11/10/2010. Aprobado para publicación: 21/11/2010

1 Grupo de Política y Gestión Tecnológica, Facultad de Ingeniería, Universidad Pontificia Bolivariana, Circular 1 No. 70 - 01, Medellín (Colombia).

2 Grupo de Termodinámica Aplicada y Energías Alternativas, Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Minas, Carrera 80 No. 65 - 223, Medellín (Colombia).

3 Grupo de Energía y Termodinámica, Facultad de Ingeniería, Universidad Pontificia Bolivariana, Circular 1 No. 70 - 01, Medellín (Colombia).

Correspondencia: farid.cortes@correo.upb.edu.co Tel.: +57 (4) 4488388 ext. 9894

ABSTRACT

A non-stationary model of a sorption refrigerator using activated carbon/methanol pair is presented. It is a non-uniform pressure model conformed by the mass, energy and momentum balance equations in cylindrical coordinates, for the activated coal bed contained in the adsorber. The results obtained from the simulation were suitably validated by the experimental information obtained from field test data and from data reported in the literature, presenting errors below 1.6% for adsorption-evaporation cycle step. The model allows to get data of temperature, pressure, density and gas velocity profiles in radial direction, as well as the solid temperature and the quantity of adsorbed methanol in the activated carbon bed in adsorption/evaporation and desorption/condensation steps.

RESUMO

Um modelo não-estacionário matemático foi usado para descrever a adsorção e dessorção de metanol no entendimento de carvão ativado funcional de um cooler alternativo. Este modelo fenomenológico consiste na energia material e momento em coordenadas cilíndricas é discretizado no espaço pelo método de volumes finitos, utilizando a abordagem de um esquema de diferença central e upwind de primeira ordem para os termos difusivos e convecção, respectivamente, sob uma plataforma Fortran 90. Os resultados da simulação foram validados com sucesso com os dados experimentais obtidos a partir de dados de teste de campo e com os dados reportados na literatura, a introdução de erros de menos de 1,6% para adsorção de estágio - a evaporação de um ciclo de refrigeração. O modelo permite que os perfis de temperatura, pressão, densidade e velocidade do gás na direção radial, bem como a temperatura do sólido e a quantidade adsorvida (ou dessorvida) de metanol em carvão ativado durante as fases de adsorção / evaporação dessorção / condensação.

INTRODUCCIÓN

Los sistemas de refrigeración se desarrollaron a partir del siglo XVIII para la preparación y conservación de alimentos, como carnes, bebidas, confituras, entre otras. Además de su uso en procesos industriales y en el acondicionamiento de aire para lograr una temperatura agradable.

Para suplir las necesidades de refrigeración en zonas sin electrificación se propone una tecnología limpia basada en el aprovechamiento de la energía solar y en la utilización de sustancias que no generan impacto ambiental. Se trata de la refrigeración por adsorción de metanol en carbón activado, la cual es un tipo particular de refrigeración que presenta ciclos similares a los sistemas convencionales, siendo reemplazada la compresión por una etapa adicional de adsorción-desorción (adsorbedor), en donde se reemplazan las partes mecánicas (compresor) de los refrigeradores convencionales [1, 2].

Una gran cantidad de estudios acerca de modelos matemáticos de sistemas de refrigeración por adsor-

ción de metanol en carbón activo a presión constante en el lecho han sido reportados por, [3, 4, 5, 6, 7], . Sin embargo, estos modelos presentan errores de validación para la etapa de adsorción-evaporación entre el 20 y el 50%. Además que no cuentan con el balance de cantidad de movimiento.

En este artículo, un modelo matemático de presión no uniforme de base fenomenológica fue desarrollado, en el cual las ecuaciones de materia, energía, y cantidad de movimiento son planteadas en coordenadas cilíndricas. Los resultados obtenidos en el ciclo de adsorción fueron validados satisfactoriamente con datos reportados en la literatura [4] y obtenidos experimentalmente. Los errores obtenidos fueron inferiores al 1.6% en la etapa adsorción-evaporación del ciclo de refrigeración. El principal objetivo de este trabajo fue analizar, explicar y predecir la transferencia y transporte de calor, materia y transporte de movimiento en un sistema de refrigeración por adsorción de metanol en carbón activo. De tal forma que sirva como una herramienta para el diseño de este tipo de equipos.

MÉTODO

El generador está constituido por dos cilindros concéntricos. En el cilindro interior de radio ($r = a$) fluye el fluido refrigerante del generador al condensador para la etapa de desorción y del evaporador al generador en la etapa de adsorción [5], que para este caso en particular es el metanol. En el cilindro externo ($r = b$) se encuentra confinado el lecho de carbón activado. Por la superficie exterior del último cilindro se muestra un sistema de calentamiento eléctrico, requerido para la regeneración del material adsorbente (ver Figura 1).

Para modelar el sistema del generador se hicieron las siguientes suposiciones:

- El vapor está distribuido uniformemente a lo largo del generador.
- El adsorbato se comporta idealmente en la fase gaseosa.
- Toda partícula adsorbida permanece fija. No existe migración.
- El equilibrio térmico es asumido entre la fase adsorbida y el adsorbente (no hay resistencia a la transferencia de calor entre las dos fases) "ésta fase es llamada fase sólida".
- El adsorbente tiene un tamaño de partícula definido y uniforme para el lecho.

Balance de materia

El modelo matemático desarrollado para predecir el comportamiento de la adsorción de metanol en un lecho de carbón activado se realizó en dirección radial para

el cilindro interno (ver Figura 1). El balance de materia está constituido por tres términos: la acumulación de materia en los espacios porosos (fase gaseosa), más la acumulación de metanol en el sólido (material adsorbido o desorbido) y el término de transporte por convección en dirección radial [5].

$$\varepsilon \frac{\partial C_g}{\partial t} + (1 - \varepsilon) \rho_s \frac{\partial C_g^*}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} (C_g v r) = 0 \quad (1)$$

Como en el balance de materia se ve involucrada la cantidad de materia adsorbida o desorbida en cada instante "q" para la sorción, se debe involucrar la dinámica para la pareja adsorbato/adsorbente. Para esto se plantea una cinética de adsorción [8], gobernada por una fuerza impulsora lineal entre la cantidad adsorbida en el equilibrio, propuesta por [9] a temperatura, presión del sistema y cantidad de la fase adsorbida:

$$\frac{dq}{dt} = \left[(15D_0 / r^2) \exp(-E_a / RT) \right] (C_{geq}^* - q) \quad (2)$$

Los términos que aparecen en la ecuación (2) son llamados coeficientes de transferencia de masa, algunos parámetros tales como $15D_0 / r^2$, $-E_a / RT$ son obtenidos por validación experimental [8]. La relación existente a una temperatura y presión dada y entre la cantidad de gas adsorbido C_{geq}^* es la cantidad adsorbida en equilibrio y se obtiene por medio de la ecuación Dubinin-Asthakov (1971),

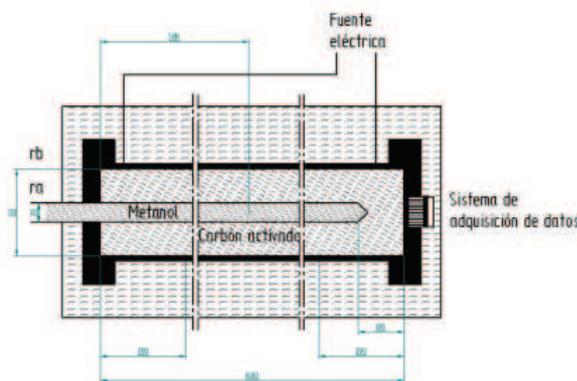
$$C_{geq}^* = C_{g \max}^* \exp \left[b_1 \left(\frac{T_c}{T_{sat}} - 1 \right)^a \right] \quad (3)$$

donde, $C_{g \max}$ es la cantidad máxima adsorbida por el carbón a unas condiciones de presión y temperatura del sistema, b_1 y a son parámetros dados por propiedades intrínsecas del carbón llamadas constantes estructurales del carbón activado junto con su pareja adsorbiva.

Balance de Energía

Los balances de energía resultantes para cada una de las fases son:

Figura 1. Diagrama del generador



Fase vapor

El balance de energía está conformado por la acumulación de energía en los espacios porosos presentes en el lecho empacado de carbón activado, el segundo término del lado izquierdo es el transporte convectivo de energía por flujo de metanol en dirección radial. En el lado derecho del balance se presenta el transporte de energía por conducción de la fase analizada en dirección radial, más la transferencia de calor existente entre las fases sólida y vapor, respectivamente [5]. Se completa el balance de energía sumando el término de expansión de la fase de vapor en el lado derecho de la ecuación, el cual en ningún trabajo de modelado de sistemas de refrigeración ha sido considerado.

$$\varepsilon \frac{\partial}{\partial t} (C_g u_g) + \frac{\partial}{\partial r} (C_g v_g r) = \frac{\varepsilon}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(K_g r \frac{\partial T_g}{\partial r} \right) + (1-\varepsilon) h a (T_c - T_g) + v \frac{\partial P}{\partial r} \quad (4)$$

Fase Sólida

El balance de energía para la fase sólida está conformado por el término de acumulación de energía presente en el carbón activado y en la fase condensada de metanol (material adsorbido). Los términos del lado derecho de la ecuación presentan el transporte de calor por conducción en dirección radial y la transferencia de calor entre las dos fases coexistentes dentro del lecho, respectivamente [5].

$$\rho_s \frac{\partial (u_c + q u_{ga})}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(K_2 r \frac{\partial T_c}{\partial r} \right) - h a (T_c - T_g) \quad (5)$$

Balance de Cantidad de movimiento

El transporte de gas al interior del lecho se origina por gradientes de presión [10] durante las etapas de adsorción y desorción. Por lo tanto este transporte convectivo puede ser descrito por la ley de Darcy.

$$v = - \frac{K_D}{\mu} \left(\frac{\partial P}{\partial r} \right) \quad (6)$$

Donde K_D es la constante de permeabilidad del lecho y está definida mediante una relación entre la porosidad y el diámetro medio de los poros.

RESULTADOS

El modelo matemático de adsorción y desorción de metanol en carbón activado se discretizó en el espacio por el método de volúmenes finitos [11], utilizando la aproximación de un esquema de diferencia central para representar la conducción térmica del gas y del sólido, y, para los términos convectivos másicos y energéticos se utilizó el esquema upwind de primer orden computando los valores para cada una de las caras del volumen de control analizado.

Al discretizar los balances de materia y energía en el espacio, se origina un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales. Este conjunto de ecuaciones diferenciales se solucionaron usando la subrutina "DIVPAG" del Fortran. Esta subrutina utiliza el método de Adams–Moulton o el método de Gear, para solucionar problemas de valores iniciales para ecuaciones diferenciales ordinarias. Para tener un sistema totalmente definido se hace uso de una serie de ecuaciones complementarias que cierran el sistema numéricamente (cálculo de propiedades físicas del material adsorbente y del adsorbato, isoterma de adsorción, entre otros).

Resultados

En la Figura 2 se observa la evolución en el tiempo de la densidad del gas. La densidad del gas en el lecho disminuye rápidamente debido a que la velocidad de adsorción es mucho mayor que el flujo de metanol que entra al lecho de carbón activado procedente del evaporador (Ver Figura 2). A medida que transcurre el tiempo, el carbón va perdiendo la capacidad de adsorción, por lo tanto la densidad del gas en el lecho va incrementando, hasta alcanzar el valor las condiciones del evaporador.

En la Figura 3 se presenta la evolución de la temperatura para la fase sólida dentro del lecho. La temperatura incrementa inicialmente, debido a que la velocidad de adsorción es mayor que la transferencia de calor o pérdidas de energía del sistema, pero a medida que transcurre el tiempo los mecanismos involucrados en el transporte y transferencia de energía en cada una de las fases van tomando un papel importante, dejando en un segundo plano a la velocidad de adsorción, debido a que el carbón activado va perdiendo la capacidad de adsorción.

En la Figura 4 se observa como varía la cantidad de metanol adsorbido en el carbón activado en función del tiempo. Se evidencia una mayor cantidad adsorbida de metanol en carbón activado a unas condiciones de temperatura y presión definidas para el nodo inicial (radio 11 mm) que para el nodo final (radio 29 mm), puesto que para la posición radial de 11 mm la temperatura es menor que en el resto del generador, además de ser el que entra en contacto directo con una mayor cantidad de metanol procedente del evaporador.

Según la Figura 5 la velocidad del gas dentro del lecho disminuye conforme avanza la posición radial, debido a la dependencia del perfil de presión dentro del lecho. La velocidad inicialmente se incrementa (súbitamente) debido a que el gradiente de presión es muy elevado (fuerza impulsora para el transporte de material), a medida que transcurre el tiempo dentro del proceso de adsorción los

gradientes de presión van disminuyendo. Por lo tanto el transporte o la velocidad dentro del lecho se ve limitada.

Validación

En la Figura 6 se comparan los datos teóricos obtenidos con el modelo matemático desarrollado para el proceso de adsorción y los datos experimentales reportados por [4].

Los datos requeridos por el simulador son reportados por [12], aunque la información es limitada. Por tal motivo existen diferencias entre los datos teóricos y experimentales. Sin embargo el modelo desarrollado en este artículo presenta errores inferiores al 1.6% y es mucho más preciso que los reportados en la literatura [3, 4, 6, 7, 12, 13]

Figura 2. Evolución de la densidad del gas en el tiempo.

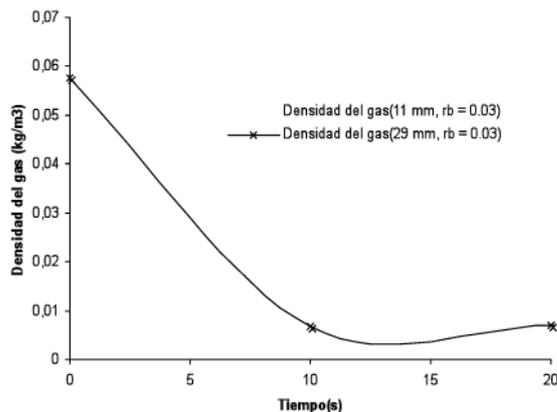


Figura 4. Evolución de la Cantidad de gas adsorbido.

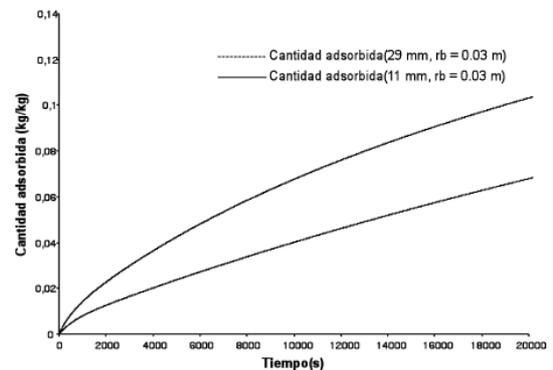


Figura 3. Evolución de la temperatura de carbón en el tiempo.

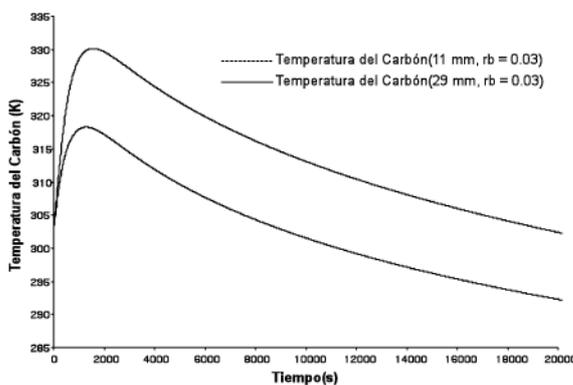


Figura 5. Evolución de la velocidad del gas en el tiempo.

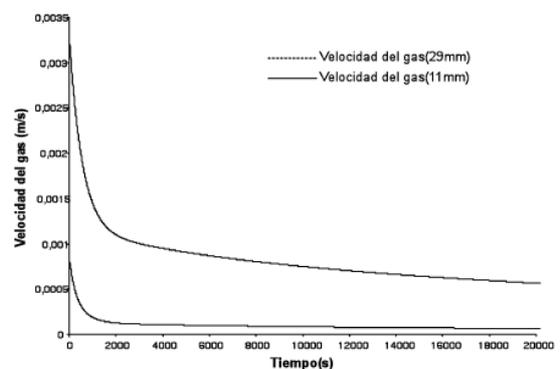
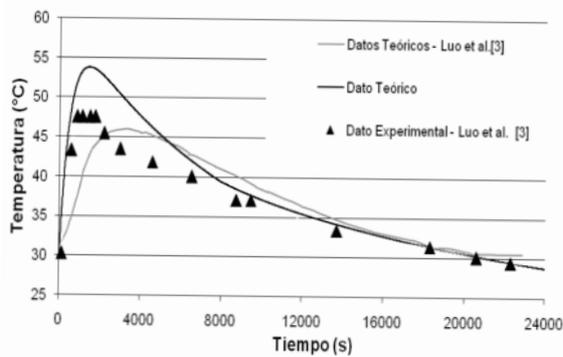


Figura 6. Validación de los datos teóricos y experimentales (Luo et al., 200).



CONCLUSIONES

Se ha desarrollado un modelo matemático no estacionario bifásico de carácter fenomenológico, en el cual se encuentran acopladas las ecuaciones de balance de materia, energía y cantidad de movimiento en coordenadas cilíndricas para el lecho de carbón activado contenido en el generador, que utiliza como pareja adsorptiva el par metanol/carbón activado.

Los resultados teóricos fueron validados con satisfacción mediante datos reportados por la literatura [4], obteniendo errores inferiores al 1.6%.

El modelo al ser de base fenomenológica permite analizar diferentes parejas adsorptivas, configuraciones y formas de operación bajo la misma estructura matemática y algorítmica, lo que imparte características de robustez y versatilidad.

REFERENCIAS

- [1] ANYANWU E. E. Review of solid adsorption solar refrigerator I: an overview of the refrigeration cycle. *Energy Convers. Manag.* 44, 301-312, 2003.
- [2] ANYANWU E. E. Review of solid adsorption solar refrigerator II: an overview of the principles and theory. *Energy Convers. Manag.* 45, 1279-1295, 2004.
- [3] LI M. et al. Development of no valve solar ice maker. *Appl. Therm. Eng.* 24, 865-872, 2004.
- [4] LUO L.; TONDEUR D. Transient thermal study of an adsorption refrigerator machine. *Adsorption.* 6, 93-104, 2000.

- [5] CORTÉS F.B. et al. Modelo matemático Del fenómeno de sorción de metanol en carbón activo. [Tesis de Maestría]. Universidad Nacional de Colombia, 2006.
- [6] WANG RZ. Adsorption refrigeration research in Shanghai Jiao Tong University. *Renew Sust Energy Rev* 5, 1-37, 2001.
- [7] DAI YJ, SUMATHY K. Heat and mass transfer in adsorbent of a solar adsorption cooling with glass tube insulation. *Energy* 28, 1511-1527, 2003.
- [8] SUKODA A, SUZUKI M. Fundamental study on solar-powered adsorption cooling. system. *J Chem Eng Jpn* 17, 52-57, 1984
- [9] DUBININ MM, ASTAKHOV VA. Development of the concepts of volume filling of micropores in the adsorption of gases and vapors by microporous adsorbents. *Russian Chemical Bulletin* 1, 5-11, 1971..
- [10] KASTA, W., Hohenthanner, C-R. Mass Transfer Within the Gas-Phase of Porous Media. *Int. J. Heat Mass Transf.* 43, 807-823, 2000.
- [11] VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics, The Finite Volume Method.* 1st edition. New York: Longman Scientific & Technical. 1995.
- [12] LEITE APF, DAGUENET M. Performance of a new solid adsorption ice maker with solar energy regeneration. *Energy Convers Manage.* 41, 1625-1647, 2000.
- [13] CORTES FB, GALLON DA, JURADO WJ. Modelado de un sistema de refrigeración por adsorción intermitente en carbon activo usando radiación solar como fuente de energía. [Trabajo de Grado]. Universidad Nacional de Colombia, Medellín. 2004.