



**MODELO MATEMÁTICO PARA ESTUDO DE PROCESSOS
REATIVOS DE PARTÍCULAS DE CARVÃO E BIOMASSA**

FÁBIO ALFAIA DA CUNHA

**TESE DE DOUTORADO EM CIÊNCIAS MECÂNICAS
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

**FACULDADE DE TECNOLOGIA
UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA**

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECANICA**

**MODELO MATEMÁTICO PARA ESTUDO DE PROCESSOS
REATIVOS DE PARTÍCULAS DE CARVÃO E BIOMASSA**

FÁBIO ALFAIA DA CUNHA

ORIENTADOR: CARLOS ALBERTO GURGEL VERAS

TESE DE DOUTORADO EM CIÊNCIAS MECÂNICAS

PUBLICAÇÃO: ENM.TD-08 A/10

BRASÍLIA/DF, 2010

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade de
Brasília. Acervo 984704.

Cunha, Fábio Alfaia da.
C972m Modelo matemático para estudo de processos reativos
de partículas de carvão e biomassa / Fábio Alfaia
da Cunha. -- 2010.
 xviii, 194 f. : il. ; 30 cm.

 Tese (doutorado) - Universidade de Brasília, Faculdade
de Tecnologia, Departamento de Engenharia Mecânica,
2010.
 Inclui bibliografia.
 Orientação: Carlos Alberto Gurgel Veras.

 1. Mecânica dos fluidos - Modelos matemáticos. 2.
Combustão combinada de carvão e gases. 3. Energia
da biomassa. I. Veras, Carlos Alberto Gurgel. II.
Título.

CDU 532

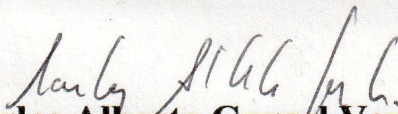
UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECANICA

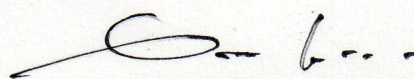
**MODELO MATEMÁTICO PARA ESTUDO DE PROCESSOS
REATIVOS DE PARTÍCULAS DE CARVÃO E BIOMASSA**

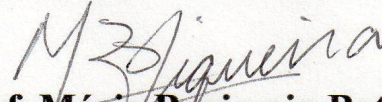
FÁBIO ALFAIA DA CUNHA

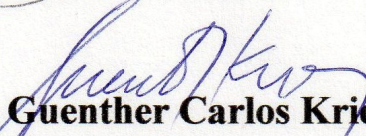
**TESE SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA
MECÂNICA DA FACULDADE DE TECNOLOGIA DA
UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM
CIÊNCIAS MECÂNICAS**

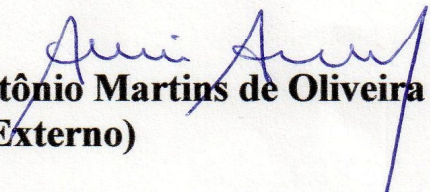
APROVADA POR:


Prof. Carlos Alberto Gurgel Veras, Dr. (ENM-UnB)
(Orientador)


Prof. Antonio Cesar Pinho Brasil Junior, Dr. (ENM-UnB)
(Examinador Interno)


Prof. Mário Benjamin Batpista Siqueira, Dr. (ENM-UnB)
(Examinador Interno)


Prof. Guenther Carlos Krieger Filho, Dr.-Ing. (USP)
(Examinador Externo)


Prof. Amir Antônio Martins de Oliveira Jr., PhD (UFSC)
(Examinador Externo)

BRASÍLIA/DF, 2010

DEDICATÓRIA

Aos meus pais, Raimundo e Odileuza, e as minhas irmãs, Débora e Suzana.

Aos meus filhos, Paola e Pedro, e a minha esposa Luciane.

AGRADECIMENTOS

A Deus, por ter me dado à possibilidade de conclusão desse trabalho.

Ao meu orientador, Carlos Alberto Gurgel Veras pela confiança, pela sugestão do tema da tese, pelo apoio no seu desenvolvimento e pelas precisas correções e enriquecimento do vocabulário no texto final do trabalho.

Agradeço aos professores e funcionários do programa de pós-graduação em ciências mecânicas, em especial ao Prof. Antonio Pinho Brasil Jr. que sempre me ajudou através de conversas bastante instrutivas.

A todos os meus amigos da Universidade de Brasília, em especial ao Nuno Jorge pela boa conversa e pela ajuda nos mais diversos assuntos.

A CAPES pela concessão da bolsa de doutorado, indispensável à realização desse trabalho.

Aos meus pais, Raimundo e Odileuza, e as minhas irmãs, Débora e Suzana, pelo amor e apoio em todos os momentos.

Finalmente, um agradecimento especial à minha esposa Luciane Cunha pelo amor, incentivo e ajuda incondicional.

Não existem métodos fáceis para resolver problemas difíceis.

René Descartes

RESUMO

Combustão e gaseificação de sólidos (carvão mineral e biomassa) representam uma considerável parte na geração de eletricidade no mundo, com destaque para a China e EUA, as duas maiores economias entre todos os países. Estrategicamente, pesquisa e desenvolvimento de tecnologias associadas à captura e ao armazenamento de carbono estão sendo conduzidas por importantes grupos, com destaque para o Laboratório Nacional de Tecnologia da Energia do Departamento de Energia dos EUA objetivando o emprego mais limpo deste insumo energético. No Brasil, os esforços objetivam, principalmente, intensificar o uso do carvão nacional cujas características o diferenciam daqueles comumente usados em plantas de potência no exterior. Nos combustores e reatores de gaseificação, os principais processos termoquímicos, de transferência de calor e de massa observados em partículas de carvão ocorrem similarmente em biomassa particulada. Predições numéricas destes processos intrínsecos da transformação de carvão mineral e biomassa são indispensáveis no projeto de plantas de potência mais limpas e eficientes. Em linhas gerais, esta tese aborda este problema. Especificamente, o trabalho apresenta um modelo matemático apropriado para simular os principais processos termoquímicos que ocorrem na combustão e gaseificação de partícula sólida, em regime de baixo número de Reynolds. As equações de conservação de massa, energia e momentum (geometria bidimensional), transiente, são resolvidas numericamente por um método aprimorado de volumes finitos baseado em elementos finitos. Neste trabalho, importantes modificações, algumas inéditas, foram sugeridas e praticadas no método numérico para melhorar e acelerar a convergência do mesmo. Apesar da natureza multifásica do problema, o domínio computacional foi resolvido diretamente, por meio de formulação baseada no conceito de porosidade do meio. Como consequência, condição de contorno na superfície que separa as fases (sólida e gasosa) não se fez necessária. A fase condensada foi modelada com auxílio de uma estrutura bimodal que permite equacionar alterações na estrutura do sólido pelos processos de pirólise, combustão e gaseificação. O modelo proposto foi então extensivamente validado e aplicado no estudo da secagem, pirólise e combustão de partícula de turfa e biomassa. As predições numéricas mostraram excelente concordância com resultados experimentais e teóricos publicados na literatura especializado no assunto. O modelo proposto, com elevado grau de ineditismo, tornou-se uma ferramenta importante para o estudo teórico da queima e gaseificação de combustíveis sólidos pulverizados.

ABSTRACT

Combustion and gasification of solids fuels (coal and biomass) represent an important share of the world's electricity production, especially in China and USA, the largest economies of all the countries. Intensive research is being conducted to develop carbon capture and storage (CCS) technologies for existing and future coal power plants, such as that of the *Department of Energy, National Energy Technology Laboratory (DOE/NETL)* from the United States. This would allow cleaner use of such feed-stock for many years to come. Research efforts, also in Brazil, would help increase the use of the national coal whose characteristics, compared to that commonly used worldwide in coal fired power plants, place another technological challenge. In boilers and gasifiers, the major thermochemical, heat and mass transfer processes that occur in coal particles are, to some extent, similar to that of particulate biomass consider for energy conversion. Numerical predictions of these processes would help designing even cleaner and more efficient coal/biomass-based power plants. This thesis presents a comprehensive mathematical model to simulate combustion and gasification of solid fuel particle in low Reynolds number regime. The conservation equations for mass energy and momentum (two dimensional geometry), unsteady, are solved numerically by an enhanced Control Volume Finite Element Method. A series of modifications to improve and accelerate convergence of the CVFE method were proposed and implemented in the present thesis. Despite the multiphase nature of the problem, the computational domain was solved directly by means of a porosity formulation. Following that, there was no need of gas/solid boundary conditions. The condensed phase was modeled by means of a bimodal porous structure for pyrolysis and combustion/gasification processes. After model validation, the code was applied for single particle drying, pyrolysis and combustion studies of biomass and peat. Numerical predictions showed good agreement with experimental and published data of the peat and biomass combustion literature. The proposed model, all together, can be considered a novel advanced means of studying solid fuel combustion and gasification processes.

SUMÁRIO

1 – INTRODUÇÃO	1
2 – COMBUSTÃO DE PARTÍCULAS CARBÔNICAS	10
2.1 – <i>PERFIS DE CONCENTRAÇÃO DE ESPÉCIES E DE TEMPERATURA NA CAMADA LIMITE.....</i>	10
2.2 – <i>PERFIS DE TEMPERATURA NO INTERIOR DE UMA PARTÍCULA EM COMBUSTÃO.....</i>	12
2.3 – <i>MODELOS DE ESTRUTURA POROSA E CONCENTRAÇÃO DE ESPÉCIES EM UM SÓLIDO EM COMBUSTÃO.....</i>	13
2.3 – <i>MODELOS MATEMÁTICOS DE CONVERSÃO DE MASSA.....</i>	15
2.3.1 – Secagem	15
2.3.2 – Pirólise	17
2.3.3 – Oxidação e Gaseificação do Coque	22
2.5 – <i>CARACTERÍSTICAS DOS COMBUSTÍVEIS SÓLIDOS.....</i>	26
3 – FORMULAÇÕES MATEMÁTICAS.....	30
3.1 – <i>HIPÓTESES DO MODELO MATEMÁTICO.....</i>	30
3.2 – <i>MODELAGEM DO MEIO POROSO.....</i>	33
3.2.1 – Média Volumétrica	33
3.3 – <i>EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO MÉDIAS NO VOLUME.....</i>	34
3.3.1 – Equações Médias de Conservação de Quantidade de Movimento e Conservação da Massa.	34
3.3.2 – Equação Média de Conservação da Energia Para as Fases Sólida e Gasosa. ...	36
3.3.3 – Equação Média de Conservação de Espécies	39
3.4 – <i>MECANISMOS DE REAÇÃO QUÍMICA</i>	40
3.4.1 – Mecanismos de Reações Homogêneas	41
3.4.2 – Mecanismos de Reações heterogêneas	44
3.5 – <i>MODELOS DE SECAGEM E PIRÓLISE.....</i>	47
3.6 – <i>MODELO MATEMÁTICO DE EVOLUÇÃO DA ESTRUTURA POROSA.....</i>	48
3.6.1 – Caracterização da Estrutura Porosa do Sólido.....	48
3.6.2 – <i>Definição do volume efetivamente ocupado pelo material sólido.....</i>	53
3.6.3 – Cálculo da massa específica intrínseca dos componentes do meio sólido.	54
3.6.4 – Evolução da massa específica intrínseca do sólido	56
3.6.5 – Cálculo da macro-porosidade e micro-porosidade da partícula.....	58
3.6.6 – Modelo de evolução da estrutura porosa considerando que a massa da partícula contém umidade.	61
3.6.7 – Modelo de evolução da estrutura porosa considerando que a massa da partícula contém cinza.	63
3.7 – <i>PROPRIEDADES DE TRANSPORTE E TERMOFÍSICAS</i>	65
3.7.1 – Propriedades de Transporte e Termofísicas da Fase Gasosa	65
3.7.2 – Propriedades do Meio Poroso e Termofísicas da Fase Sólida	70
4 – DESENVOLVIMENTO DO MODELO NUMÉRICO.....	75

MÉTODOS NUMÉRICOS	75
4.1 – <i>DIVISÃO DE OPERADORES</i>	79
4.2 – <i>FORMA GERAL DAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO</i>	81
4.3 – <i>DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL</i>	83
4.4 – <i>FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO</i>	85
4.4.1 – <i>Função de Interpolação Linear</i>	85
4.4.2 – <i>Função de Interpolação FLO (Flow Oriented interpolation)</i>	86
4.4.3 – <i>Função de Interpolação Mista (Proposta)</i>	89
4.4.4 – <i>Interpolação das Propriedades Termofísicas</i>	91
4.5 – <i>INTEGRAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO</i>	96
4.5.1 – <i>Integração Temporal e Espacial da Equação de Conservação de Um Escalar</i> .	98
4.5.2 – <i>Integração do Termo de Fluxo Combinado de Convecção-Difusão</i>	103
4.5.3 – <i>Integração dos Termos de Fonte</i>	107
4.6 – <i>ACOPLAMENTO PRESSÃO -VELOCIDADE</i>	110
4.6.1 – <i>Equação de Interpolação de Momentum</i>	112
4.6.2 – <i>Solução da Equação da Conservação da Massa</i>	114
4.7 – <i>CONDIÇÕES DE CONTORNO</i>	117
4.8 – <i>ALGORITMO DE SOLUÇÃO DO ACOPLAMENTO P – V: PRESSÃO-VELOCIDADE</i>	119
4.9 – <i>ALGORITMO DE SOLUÇÃO DO ACOPLAMENTO $T_g - T_s$: ENERGIA FASE GÁS – ENERGIA FASE SÓLIDA</i>	123
4.10 – <i>ALGORITMO DE SOLUÇÃO PARA AVANÇO DA SOLUÇÃO NO TEMPO</i> ...	124
5 – VALIDAÇÃO E APLICAÇÃO DO MODELO PROPOSTO	126
5.1 – <i>VALIDAÇÃO DO MODELO – escoamento não Reativo</i>	126
5.2 – <i>VERIFICAÇÃO DA PROPOSTA DE CÁLCULO DO TERMO DE FONTE VOLUMÉTRICO</i>	130
5.3 – <i>AVALIAÇÃO DO NÚMERO DE PECKET BASEADO NO COMPRIMENTO MÉDIO DO ELEMENTO</i>	135
5.4 – <i>VERIFICAÇÃO DA FUNÇÃO DE INTERPOLAÇÃO DE MOMENTUM</i>	143
5.5 – <i>CASO DE VALIDAÇÃO PARA FORMULAÇÃO AXISSIMÉTRICA</i>	152
5.6 – <i>CASO DE VALIDAÇÃO PARA O ESCOAMENTO TRANSIENTE</i>	153
5.7 – <i>CASO DE VALIDAÇÃO PARA O ESCOAMENTO ATRAVÉS DE UM MEIO POROSO</i>	154
5.8 – <i>CASO DE VALIDAÇÃO PARA COMBUSTÃO HOMOGÊNEA</i>	155
5.9 – <i>APLICAÇÃO DO MODELO PARA SECAGEM E PIRÓLISE</i>	161
5.10 – <i>CASO DE VALIDAÇÃO DE COMBUSTÃO</i>	167
6 – CONCLUSÕES E SUGESTÕES	184
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	186

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 - Modelos de Pirólise.....	21
Tabela 2.2 - Mecanismos Globais e Semi-Globais e leis de taxa correspondentes.....	25
Tabela 2.3 - Mecanismos de controle e expressões de taxa para cada faixa de temperatura para o modelo semi-global de triplo passo.	26
Tabela 2.4 - Análise elementar da madeira (valor médio, % em massa, base seca e isenta de cinza, Ragland e Aerts, 1991).	27
Tabela 2.5 - Análise imediata de madeira seca e de carvão vegetal (% base úmida, Ushima, 1999).	28
Tabela 2.6 - Características de diferentes <i>ranks</i> de carvão (Tillm, 1991).	28
Tabela 2.7 - Propriedades físicas e químicas de carvão e biomassa (Dermirbas, 2004).	29
Tabela 3.1 - Representação usual dos hidrocarbonetos leves e alcatrão.	41
Tabela 3.2 – Mecanismos globais para as reações homogêneas.	43
Tabela 3.3 – Constantes para as reações apresentadas na tabela 3.2.....	43
Tabela 3.4 – Taxa líquida de reação de espécies para as reações R1-R5 em $\text{kg m}^{-3}\text{s}^{-1}$	44
Tabela 3.5 – Calor de combustão, em J kmol^{-1} , para as reações R1-R5.....	44
Tabela 3.6 - Mecanismos Globais de Reação Heterogênea.....	45
Tabela 3.7 - Taxas das reações heterogêneas para carvão ($\text{kmol m}^{-2}\text{s}^{-1}$).....	46
Tabela 3.8- Taxas das reações heterogêneas para madeira ($\text{kmol m}^{-2}\text{s}^{-1}$).	46
Tabela 3.9 – Taxa líquida de reação para as reações heterogêneas ($\text{kg m}^{-3}\text{s}^{-1}$).	46
Tabela 3.10 - Calor de reação para as reações C-O ₂ , C-CO ₂ e C-H ₂ O.	47
Tabela 3.11 - Modelo de secagem.	47
Tabela 3.12 - Modelos de pirólise e constantes de taxa.	48
Tabela 3.13 - Parâmetros para o modelo de taxa cinética única (Born & Ragland, 1998).	48
Tabela 3.14 - Parâmetros para o modelo de superposição (Beldereok, 2007).	48
Tabela 3.15 - Coeficientes da equação (3.30) (Merrick, 1993b).	55
Tabela 3.16 - Constantes das equações de Ω_{μ} e Ω_D	69
Tabela 4.1 - Formas da equação de conservação de ϕ	82
Tabela 4.2 - Algoritmos de acoplamento pressão-velocidade.....	121
Tabela 4.3 - Algoritmo de solução do acoplamento T _g -T _s	124
Tabela 5.1 - Velocidade máxima e mínima nas linhas de centro da cavidade quadrada... ..	133
Tabela 5.2 - Comprimento da recirculação para Re=20 e Re=40.	134
Tabela 5.3 - Velocidade máxima e mínima na linha de centro da cavidade - Re=400.	142
Tabela 5.4 - Velocidade máxima e mínima na linha de centro da cavidade - Re=1000. ..	142
Tabela 5.5 - Comprimento da recirculação para Re=20 e Re=40.	143
Tabela 5.6 - Velocidade máxima e mínima na linha de centro da cavidade - Re=1000. ..	145
Tabela 5.7 - Comprimento da recirculação para Re=20 e Re=40.	151
Tabela 5.8 - Condições de entrada de ar e combustível.	156
Tabela 5.9 - Condições Iniciais e de Contorno.....	156
Tabela 5.10 - Propriedades da biomassa.	161
Tabela 5.11– Condições de contorno, CC, e condições iniciais, CI.....	163
Tabela 5.12– condições de contorno, CC, e condições iniciais, CI, do caso de combustão.	170

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Desenho esquemático das principais fases da combustão de uma partícula de carvão ou de biomassa.	2
Figura 2.1- Modelos de perfis de concentração envolta de uma partícula em combustão. .	11
Figura 2.2 - Distribuição de temperatura dentro de uma partícula durante aquecimento para vários Bi_T , para uma partícula de temperatura T_0 no tempo $t = 0$, repentinamente exposta a uma temperatura T_∞ (adaptado de Thunmans, 2004).	13
Figura 2.3 - Zonas de controle para a oxidação heterogênea de coque.	23
Figura 2.4 – (a) Estrutura de fibra de madeira dura (b) estrutura de fibra de madeira macia (Thunman, 2004).	27
Figura 3.1 - Matriz porosa bimodal idealizada e definição das frações de volume X_v e X_c	49
Figura 3.2 - Variação da razão de área superficial com a conversão de material.	51
Figura 3.3 - Alteração de X_v e X_c devido altas taxas de aquecimento.	54
Figura 3.4 - Conversão de coque com o tempo para casos simplificados, os maiores valores de massa específica estão associados ao tom mais escuro (Adaptado de Thunman, 2002).	57
Figura 4.1 - Ilustração esquemática do domínio Ω , de sua superfície $\partial\Omega$ e do vetor \mathbf{n} , apontado para fora de Ω e normal ao contorno $\partial\Omega$	82
Figura 4.2 - Elemento triangular e volume de controle obtido pelo método das medianas.	84
Figura 4.3 - Armazenamento das propriedades: (a) nos volumes e (b) nos elementos.	91
Figura 4.4 - Linhas de corrente, discretização do espaço próximo e linha de corrente aproximada. $L_{m,i}$: comprimento médio proposto. $L_{x,i}$: comprimento tradicionalmente utilizado no CVFEM.	93
Figura 4.5 - Elemento triangular.	93
Figura 4.6 - Definição do comprimento $2L_m$ e reposicionamento dos subtriângulos 1 e 2.	94
Figura 4.7 - Elemento triangular.	96
Figura 4.8 - Destaque das áreas A_n e A_p no espaço.	98
Figura 4.9 - Elemento triangular e notação utilizada na formulação.	98
Figura 4.10 - Subvolumes de controle associados aos cálculos dos fluxos.	103
Figura 4.11 - Algoritmo de solução proposto.	125
Figura 5.1 - (a) Malha semelhante à utilizada na simulação do caso da cavidade quadrada e (b) campo de velocidades calculado.	126
Figura 5.2 - (a) Curvas de convergência e (b) Efeito da variação do número de iterações internas sobre o tempo de CPU.	127
Figura 5.3 - Curvas de convergência: (a) 5 iterações internas e $\alpha_{sr}=0,5$ e (b) 5 iterações internas e $\alpha_{sr}=0,95$	128
Figura 5.4 - Curvas de convergência: (a) 10 iterações internas e $\alpha_{sr}=0,5$ e (b) 10 iterações internas e $\alpha_{sr}=0,95$	128
Figura 5.5 - (a) Malha similar a que foi utilizada na simulação (22x37 volumes) (b) Malha próxima ao cilindro.	129
Figura 5.6 - (a) Curva de convergência e (b) campo de velocidades.	130
Figura 5.7 - Definição de linhas para apresentação de resultados.	131
Figura 5.8 - Curvas de convergência para o caso da cavidade quadrada.	132

Figura 5.9 - Linhas de corrente para o escoamento induzido no interior da cavidade quadrada para $Re=1000$	133
Figura 5.10 - Curvas de convergência para o caso teste (Malha 88x138).	134
Figura 5.11 - Linhas de corrente do escoamento, caso do cilindro, $Re=20$	134
Figura 5.12 - (a) Ilustração do problema de convecção-difusão e (b) malha de elementos.	136
Figura 5.13 - Perfil de ϕ e $ \phi_a - \phi_n $ com relação a x em $y=0$, $Peclet=40$, malha 9x9 volumes.	137
Figura 5.14 - Perfil de ϕ e $ \phi_a - \phi_n $ com relação a x em $y=0$, $Peclet=80$, malha 9x9 volumes.	137
Figura 5.15 - Perfil de ϕ e $ \phi_a - \phi_n $ com relação a x em $y=0$, $Peclet=160$, malha 21x21 volumes.	137
Figura 5.16 - Ilustração do problema de difusão-convecção.	138
Figura 5.17 - Campo de ϕ : (a) $Pe \rightarrow \infty$, $\theta=30$ e escoamento desalinhado com os nós da malha e (b) $Pe \rightarrow \infty$, $\theta=45$ e escoamento alinhado com os nós da malha.	138
Figura 5.18 - (a) Variação de ϕ na linha de resultados. (b) variação de $ \phi_a - \phi_n $ na linha de resultados. $Pe \rightarrow \infty$, $\theta=30$ e escoamento desalinhado com os nós da malha.	139
Figura 5.19 - (a) Variação de ϕ na linha de resultados. (b) variação de $ \phi_a - \phi_n $ na linha de resultados. $Pe \rightarrow \infty$, $\theta=45$ e escoamento alinhado com os nós da malha.	139
Figura 5.20 - Campo de ϕ para $\theta=45$, L_m , e escoamento alinhado com os nós da malha: (a) $Peclet=500$, (b) $Peclet=1000$ e (c) $Peclet=5000$	140
Figura 5.21 - (a) variação de ϕ na linha de resultados. (b) variação de $ \phi_a - \phi_n $ na linha de resultados. $Peclet=500$, $\theta=45$ e escoamento alinhado com os nós da malha.	140
Figura 5.22 - (a) variação de ϕ na linha de resultados. (b) variação de $ \phi_a - \phi_n $ na linha de resultados. $Peclet=1000$, $\theta=45$ e escoamento alinhado com os nós da malha.	141
Figura 5.23 - (a) variação de ϕ na linha de resultados. (b) variação de $ \phi_a - \phi_n $ na linha de resultados. $Peclet=5000$, $\theta=45$ e escoamento alinhado com os nós da malha.	141
Figura 5.24 - Resultados para componente U em $x=0,5$ e $y=[0,1]$, malha 32x32 elementos: (a) $Re=400$ (b) $Re=1000$	146
Figura 5.25 - Perfis de U e V na linha de centro horizontal e vertical da cavidade quadrada, respectivamente.	147
Figura 5.26 - Geometria e condições de contorno.	148
Figura 5.27 - Perfis para U_x e U_y em $x=7$ e 15 para o escoamento através de uma expansão em forma de degrau em três malhas uniformes, em $Re=800$	149
Figura 5.28 - Linhas de corrente do campo de escoamento, $Re=800$	150
Figura 5.29 - Localizações axiais para os cálculos numéricos de velocidade.	152
Figura 5.30 - Perfis de velocidades obtidos na simulação (linhas contínuas). Os símbolos representam dados experimentais de Durst (1985), para Reynolds de 372.	153
Figura 5.31 - malha do caso escoamento e torno de um cilindro infinito.	153
Figura 5.32 - Velocidade transversal em um ponto atrás do cilindro para $Re=100$	154
Figura 5.33 - (a) Malha utilizada e (b) detalhe da malha próxima ao cilindro.	155
Figura 5.34 - (a) Módulo do campo de velocidades. (b) Campo de vetores de velocidade e campo de pressão sobreposta.	155
Figura 5.35 - Esquema combustor cilindro vertical.	156
Figura 5.36 - Perfis de velocidade e temperatura para as posições indicadas.	158
Figura 5.37 - Perfis de fração molar de CH_4 e O_2 para as posições indicadas.	159
Figura 5.38 - Perfis de fração molar de H_2O e CO_2 para as posições indicadas.	160
Figura 5.39 - Malha utilizada nas simulações.	162

Figura 5.40 – Porosidade inicial utilizada nas simulações.....	162
Figura 5.41 – Identificação dos contornos do domínio de cálculo.....	163
Figura 5.42 - Conversão de massa, conteúdo de umidade de 6%, biomassa cilíndrica com $\varnothing=9,5\text{mm}$ e razão altura/ diâmetro de 4, temperatura do reator de 1273K.	164
Figura 5.43 - Perfis de temperatura, conteúdo de umidade de 6%, biomassa cilíndrica com $\varnothing=9,5\text{mm}$ e razão altura/ diâmetro de 4, temperatura do reator de 1273K.	164
Figura 5.44 - Conversão de massa, conteúdo de umidade de 40%, biomassa cilíndrica com $\varnothing=9,5\text{mm}$ e razão altura/ diâmetro de 4, temperatura do reator de 1273K.	165
Figura 5.45 - Perfis de temperatura, conteúdo de umidade de 40%, biomassa cilíndrica com $\varnothing=9,5\text{mm}$ e razão altura/ diâmetro de 4, temperatura do reator de 1273K.	165
Figura 5.46 – Variação da porosidade com a conversão de material sólido, para conteúdo de umidade de 40%, $\varnothing=9,5\text{mm}$ e razão altura/ diâmetro de 4.....	166
Figura 5.47 – Campo de velocidade para a conversão de 50%.	167
Figura 5.48 – Campo de temperatura para conversão de 50%.	167
Figura 5.49 - Formas da partícula consideradas nas simulações.....	168
Figura 5.50 - Diferentes formas da partícula de turfa, 180 μm -200 μm (Letho, 2007).	169
Figura 5.51 – Malha utilizada nas simulações.....	169
Figura 5.52 – Porosidade inicial utilizada nas simulações.....	170
Figura 5.53 – Identificação dos contornos do domínio de cálculo.....	170
Figura 5.54 - Curva de conversão de massa de turfa, diâmetro de 180 μm	171
Figura 5.55 - Curva de reatividade do processo de conversão de massa, para “cilindro 2d”, considerando e desconsiderando o equilíbrio térmico.....	172
Figura 5.56 - Curva de temperatura em função do tempo, para o “cilindro 2d”.	172
Figura 5.57 – Variação da porosidade com a conversão de material sólido para a partícula esférica com 7% de cinza.....	174
Figura 5.58 – Variação da porosidade com a conversão de material sólido, X_{conv} , para a partícula de forma “cilindro 2d” com 7% de cinza.....	175
Figura 5.59 – Variação da porosidade com a conversão de material sólido, X_{conv} , para a partícula de forma “cilindro 4d” com 7% de cinza.....	176
Figura 5.60 – Variação da temperatura com a conversão de material sólido, X_{conv} , para a partícula esférica com 7% de cinza.....	177
Figura 5.61 – Variação da temperatura com a conversão de material sólido, X_{conv} , para a partícula de forma “cilindro 2d” com 7% de cinza.....	178
Figura 5.62 – Variação da temperatura com a conversão de material sólido, X_{conv} , para a partícula de forma “cilindro 2d” com 7% de cinza.....	179
Figura 5.63 – Variação da porosidade com a conversão de material sólido, $X_{\text{conv}}=[0,9;0,99]$, para a partícula de forma “cilindro 2d” com 7% de cinza.....	180
Figura 5.64 – Variação da porosidade com a conversão de material sólido, $X_{\text{conv}}=[0,9;0,99]$, para a partícula de forma “cilindro 2d” isenta de cinza.....	181
Figura 5.65 – Perfil de temperatura em função do tempo para o “cilindro 2d” com 7% de cinza.....	182
Figura 5.66 - Perfil de temperatura em função do tempo para uma partícula contendo ou não cinza. Forma “cilindro 2d”.....	183

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Área (m^2) Fator pré-exponencial (Várias Unidades)
A_{tri}	Área do elemento triangular (m^2)
A_{ret}	Área retangular (m^2)
A_n	Área normal (m^2)
A_p	Área plana (m^2)
A_{sup}	Área superficial (m^2)
Bi_T	Número de Biot térmico (-)
Bi_M	Número de Biot mássico (-)
$c_{p,g}$	Calor específico do gás ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
$c_{p,s}$	Calor específico do sólido ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
$c_{p,SV}$	Calor específico do sólido virgem ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
$\bar{c}_{p,k}$	Calor específico molar da espécie k ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
C_k	Concentração da espécie k ($kmol\ m^{-3}$)
C_F	Coefficiente de Forchheimer (-)
d	Diâmetro (m)
d_p	Diâmetro do poro (m)
d_m	Diâmetro do macro-poro (m)
d_μ	Diâmetro do micro-poro (m)
D_{im}	Coefficiente de difusão no seio da fase gasosa (m^2s^{-1})
$D_{K,i}$	Coefficiente de difusão Knudsen (m^2s^{-1})
D_{ij}	Difusividade binária da espécie i na espécie j (m^2s^{-1})
$D_{i,eff}$	Coefficiente de difusão efetivo (m^2s^{-1})
E	Energia de ativação da reação ($J\ kmol^{-1}$)
E_0	Energia de ativação média ($J\ kmol^{-1}$)
f_i	Frações de celulose, hemicelulose ou lignina (-)
g	Aceleração da gravidade ($m\ s^{-2}$)
h_M	Coefficiente convectivo de transferência de massa ($m\ s^{-1}$)
h_C	Coefficiente convectivo de transferência de calor ($W\ m^{-2}K^{-1}$)
h	Coefficiente de troca de calor entre a fase sólida e a gasosa ($W\ m^{-2}K^{-1}$)
	Entalpia de específica ($kJ\ kg^{-1}$)
\bar{h}_i	Entalpia molar de uma espécie i ($kJ\ kmol^{-1}$)
H_i	Calor de reação, i =secagem, ou i =pirólise, ou i =oxidação de carbono ($J\ kg^{-1}$)
i	Vetor unitário na direção x ou z
J	Fluxo combinado de difusão e convecção (-)
J_D	Fluxo de difusão (-)
J_C	Fluxo de convecção (-)

\mathbf{J}_k	Fluxo de difusão da espécie k (kg m ⁻² s ⁻¹)
\mathbf{j}	Vetor unitário na direção y ou r
k	Constante de taxa de reação (Várias unidades)
k_k	Condutividade térmica de um componente puro k (Wm ⁻¹ K ⁻¹)
k_g	Condutividade térmica da mistura de gases (Wm ⁻¹ K ⁻¹)
k_s	Condutividade térmica do material sólido (Wm ⁻¹ K ⁻¹)
k_{sv}	Condutividade térmica do material sólido virgem (Wm ⁻¹ K ⁻¹)
k_{RC}	Condutividade térmica do resíduo carbônico (Wm ⁻¹ K ⁻¹)
k_{rad}	Condutividade radiativa (Wm ⁻¹ K ⁻¹)
k_B	Condutividade da Biomassa (Wm ⁻¹ K ⁻¹)
K	Permeabilidade absoluta (Darcy ou m ²)
L	Forma geral de uma equação diferencial (-) Comprimento (m)
$L_{v,0}$	Comprimento equivalente de poros sobrepostos por unidade de volume (m m ⁻³)
$L_{m,i}$	Comprimento médio de um elemento triangular (m)
$L_{x,i}$	Comprimento da projeção do elemento triangular sobre o eixo x (m)
$L_{y,i}$	Comprimento da projeção do elemento triangular sobre o eixo y (m)
Le_k	Número de Lewis para a espécie k (-)
M	Massa (kg)
MC	Conteúdo de umidade (-)
m	Massa (kg) Verdadeira ordem de reação
m_j	Massa. j=p => da partícula, j=V => de material volátil e j=C => de material carbônico (kg)
\mathbf{n}	Vetor normal (-)
n	Ordem da reação (-)
N_{svc}	Número de subvolumes de controle (-)
N_{RT}	Número de reações heterogêneas (-)
N_{RM}	Número de reações homogêneas (-)
N_{sp}	Número de espécies (-)
Nu	Número de Nusselts (-)
N_i^j	Função de forma do elemento. j=L=> linear, j=F=> FLO, j=m=> mista (-)
N_{vol}	Número total de volumes de controle (-)
p	Pressão termodinâmica ou hidráulica (Pa)
P_i	Pressão parcial do componente i (Pa)
Pe	Número de Peclet (-)
Q_{rad}	Potência radiativa (W)
r	Raio (m) Coordenada espacial (-) Taxa de reação (Várias unidades)
r_p	Raio da partícula (m)

R	Resíduo numérico (Eq. 1.4)
	Raio (m)
Re	Número de Reynolds (-)
R_u	Constante universal dos gases ($8315 \text{ kmol}^{-1} \text{ K}^{-1}$)
S	Área superficial específica ($\text{m}^2 \text{ m}^{-3}$)
S_g	Área superficial específica por unidade de massa ($\text{m}^2 \text{ kg}^{-1}$)
S_v	Área superficial volumétrica ($\text{m}^2 \text{ m}^{-3}$)
S_ϕ	Termo de fonte do escalar ϕ (-)
S_p	Componente do termo de fonte S_ϕ (-)
S_C	Componente do termo de fonte S_ϕ (-)
Sh	Número de Sherwood (-)
T_g	Temperatura do gás (K)
T_s	Temperatura do sólido (K)
T_{rad}	Temperatura de referencia para cálculo de troca de calor por radiação (K)
T^*	Temperatura reduzida utilizada no cálculo da integral de colisão (-)
t	Tempo (s)
\mathbf{u}	Vetor velocidade (m s^{-1})
u	Componente de velocidade x ou z (m s^{-1})
u_{av}	Velocidade média sobre o elemento triangular (m s^{-1})
U_{Pe}	Velocidade média que caracteriza a convecção no elemento triangular (m s^{-1})
Y	Fração de massa (-)
v	Componente de velocidade y ou r (m s^{-1})
W	Função peso (-)
$W_{g,k}$	Peso molecular da espécie gasosa k (kg kmol^{-1})
$W_{s,k}$	Peso atômico do elemento sólido k (kg kmol^{-1})
\overline{W}_g	Peso molecular da mistura de gases (kg kmol^{-1})
\overline{W}_s	Peso atômico médio do sólido (kg kmol^{-1})
V	Volume (m^3)
V_i	Volume associado ao nó i (m^3)
V_g	Volume de gás no meio poroso (m^3)
V_m	Volume de macro-poros (m^3)
V_μ	Volume de micro-poros (m^3)
V_T	Volume total do meio sólido, incluindo o volume de gás (m^3)
V_v	Volume de vazios do meio poroso (m^3)
V_T^S	Volume total de material sólido (m^3)
V_v^S	Volume de material sólido volátil (m^3)
V_C^S	Volume de material sólido carbônico (m^3)
x	Coordenada espacial (-)
X_k	Fração molar da espécie k (-)

	Conversão do material k (-)
	Fração de volume, $k=V$ para material volátil ou $k=C$ para carbono (-)
	Coordenadas dos vértices do elemento triangular, $k = 1,2,3$ (-)
Y_k	Fração de massa do componente k (-)
	Coordenadas dos vértices do elemento triangular, $k = 1,2,3$ (-)
y	Coordenada espacial (-)
z	Coordenada espacial (-)

Símbolos Gregos

α_p	Fator de ponderação relacionado à função de interpolação mista (-)
α_{sr}	Fator de sub-relaxação (-)
α	Coefficiente estequiométrico (-)
β	Parâmetro da taxa de reação
	Coefficiente estequiométrico (-)
Δt	Passo de tempo (s)
Δs	Comprimento associado à área normal (m)
δV_k^i	Subvolume de controle do elemento k (m ³)
ε	Porosidade do meio sólido (-)
	Resíduo de cálculo (-)
ε_0	Porosidade inicial (-)
ε_{rad}	Emissividade radiativa (-)
ε_m	Macro-porosidade (-)
ε_μ	Micro-porosidade (-)
ε_u	Porosidade diminuída da fração de volume ocupada pela água (-)
$\varepsilon_{erro,\phi}$	Resíduo de cálculo de ϕ (-)
ϕ	Escalar genérico (-)
Γ_ϕ	Coefficiente difusivo de ϕ (-)
$\bar{\gamma}_i$	Propriedade média no volume de controle i (-)
γ_k^i	Propriedade do elemento k (-)
γ	Coefficiente estequiométrico (-)
η	Fator de ponderação baseado em massa seca (-)
μ_g	Viscosidade dinâmica da mistura de gases (kg m ⁻¹ s ⁻¹)
μ_k	Viscosidade de um componente puro k (kg m ⁻¹ s ⁻¹)
μ_e	Viscosidade efetiva para o meio poroso do modelo de Brinkman (kg m ⁻¹ s ⁻¹)
Θ_{kj}	Parâmetro das equações (2.20) e (2.21)
θ	Perfil de tempo (-)
ρ	Massa específica (kg m ⁻³)
ρ_s^I	Massa específica intrínseca do sólido (kg m ⁻³)
ρ_v^I	Massa específica intrínseca de material sólido volátil (kg m ⁻³)
ρ_c^I	Massa específica intrínseca de material sólido carbônico (kg m ⁻³)

$\rho_s^{A,0}$	Massa específica aparente inicial do sólido (kg m^{-3})
σ_k	Diâmetro de colisão (Å)
σ	Constante de Stefan-Boltzmann ($\text{W m}^{-2}\text{K}^{-4}$)
	Desvio padrão (-)
τ	Tortuosidade (-)
Ω_μ	Integral de colisão para gases apolares para a viscosidade (-)
Ω_D	Integral de colisão para gases apolares para a difusividade (-)
Ω	Domínio (-)
$\dot{\omega}_{g,k}$	Taxa líquida de produção da espécie k devido reações homogêneas ($\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$)
$\dot{\omega}_{s,k}$	Taxa líquida de produção da espécie k devido reações heterogêneas ($\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$)
ψ	Parâmetro estrutural do modelo de área reativa (-)
$\partial\Omega_\phi$	Contorno do domínio associado à condição de Dirichlet (-)
$\partial\Omega_n$	Contorno do domínio associado à condição de Neumann (-)

Subíndices

0	Instante inicial
p	Partícula
	Poros
i	Referente à direção x
j	Referente à direção y
g	Gás
s	Sólido
V	Voláteis
C	Carbono
∞	Infinito
O_2	Oxigênio
x	Referente à direção x
y	Referente à direção y

1 – INTRODUÇÃO

A biomassa foi provavelmente a primeira fonte de energia térmica utilizada em larga escala pela humanidade. Antes de 1850 a madeira era o combustível mundial primário. Então, iniciou-se uma transição gradual no emprego de fonte primária da energia com redução da madeira e crescente predomínio do carvão mineral, seguido do petróleo e, mais recentemente, do gás natural. Confirmando-se as previsões de esgotamento das grandes reservas de petróleo e gás natural, o carvão pode, mais uma vez, tornar-se a fonte principal de combustível fóssil (Tillm, 1991) no mundo. O emprego, em larga escala, do carvão, provavelmente estará associado a técnicas de captura e armazenagem de carbono, enquanto o emprego de energias renováveis não se tornar majoritário em escala global. Fontes de energia renováveis, tais como eólica, biomassa, fotovoltaica e geotérmica podem se tornar predominantes no futuro (Ragland & Borman, 1998) sem, contudo, eliminar o emprego de combustíveis fósseis.

Inúmeras tecnologias estão sendo aprimoradas para se evitar uma crise energética de larga escala. Neste contexto, as reservas de carvão, que poderiam atender os próximos 200 anos de consumo de energia do globo, aos níveis atuais. Tais reservas são uma alternativa importante para um futuro mais imediato, a espera da consolidação de outras tecnologias com significativa participação de fontes renováveis.

Segundo Heikkinem (2005), a queima conjugada de carvão e biomassa é a opção de curto prazo mais econômica para se reduzir emissões de gases do efeito estufa, nas plantas geração de energia elétrica em operação. Adicionalmente, a queima conjugada de biomassa com carvão permite reduzir as emissões de NO_x e SO_x das plantas de potência que empregam carvão pulverizado. Outros efeitos positivos da queima conjugada são também discutidos por Dermirbas (2004) como; possibilidade de redução nos custos do combustível, menores níveis de produção de resíduos e redução de contaminantes do solo e da água, dependendo da composição química da biomassa usada.

De acordo com Eaton et al. (1999) o aprimoramento tecnológico da queima de combustíveis fósseis, no passado, foi de natureza fortemente empírica, baseado principalmente em anos de experiência acumulada nas operações de fornalhas de termelétrica a carvão e dados obtidos de instalações de teste de menor escala. Estes dados e um entendimento mais aprofundado dos fenômenos de interesse, porém, são, com frequência, dispendiosos economicamente de se obter e as conclusões podem ser de difícil

extrapolação para sistemas de grande porte por causa da natureza complexa do escoamento reativo no interior dos reatores.

A Figura 1.1 destaca os principais processos que ocorrem no interior da partícula bem como na camada de gás que envolve a mesma, após algum tempo de residência no combustor. Tais processos seriam também observados num reator de gaseificação, a despeito da menor quantidade global de oxigênio disponível.

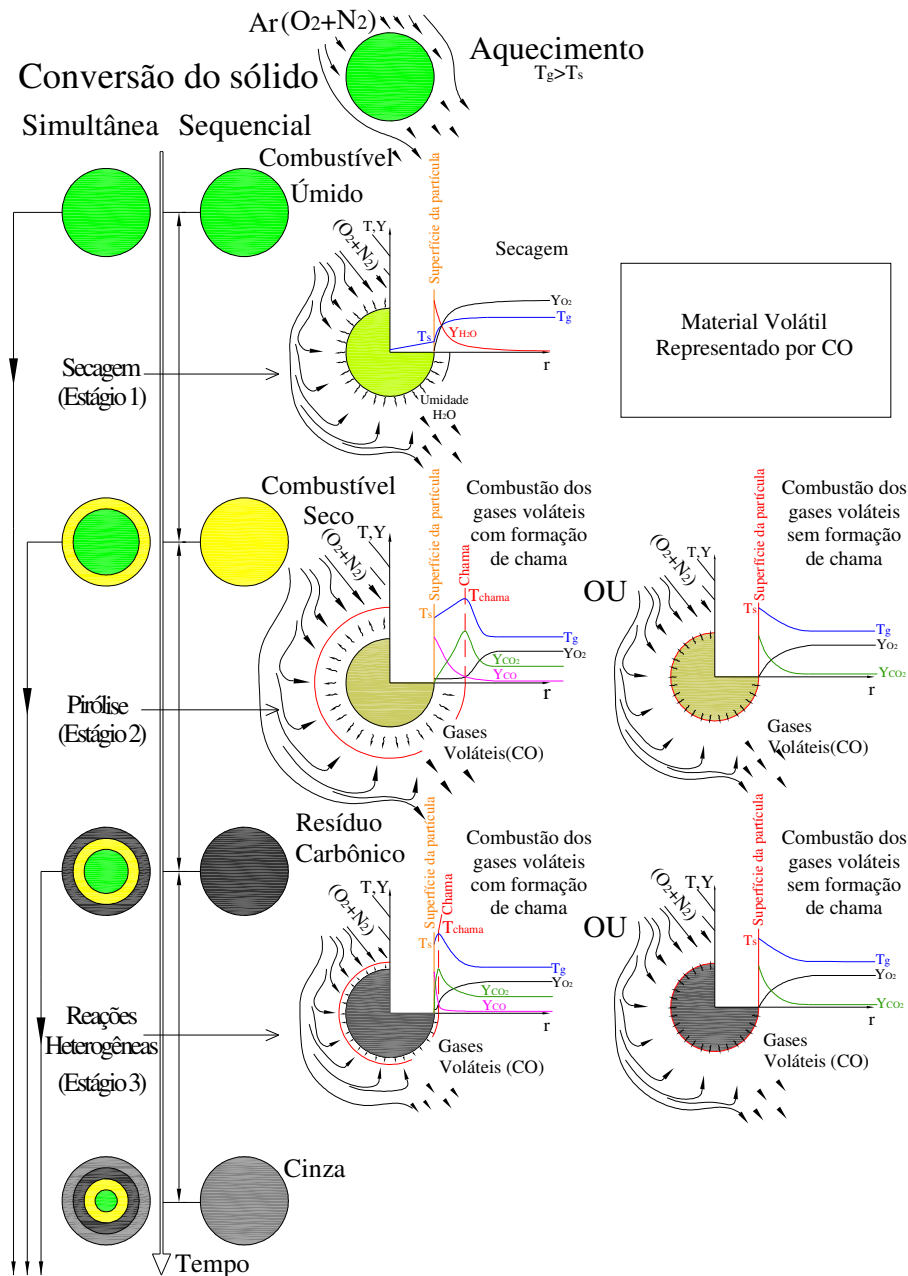


Figura 1.1 – Desenho esquemático das principais fases da combustão de uma partícula de carvão ou de biomassa.

Com base na sequencia apresentada na figura 1.1, nota-se que quando uma partícula é lançada num ambiente reativo (combustão ou gaseificação) são observados os seguintes processos principais; aquecimento por convecção e radiação, o que ocasiona a perda de massa inicial devido à secagem, degradação térmica do sólido (emissão de voláteis), reações homogêneas de oxidação dos voláteis e, finalmente, oxidação do resíduo carbônico (reações heterogêneas). Nesta dinâmica, grandes gradientes de velocidade, temperatura e concentração de espécies se estabelecem adjacentes à partícula, numa região denominada camada limite. Os fenômenos que ocorrem nesta camada limite, juntamente com algumas características do reator, estabelecerão a taxa de conversão global da partícula. Por isso, uma descrição mais detalhada de tais fenômenos é oportuna.

Muitos modelos matemáticos e respectivos códigos para predição de queima de partículas de carvão e biomassa foram propostos nas últimas décadas, como, por exemplo: Sotirchos e Amundson (1984), Mussara et al. (1986), Biggs e Agarwal (1996), Veras (1997), Helsen e Van den Bulk (2001), Wang e Bhatia (2001), Wendt et al. (2002), Peters e Bruch (2002), Bryden et al. (2002), Krabbenhøft (2003), Bryden e Hagge (2003), Berkel (2004), Rostami et al. (2004), Perkins e Sahajwalla (2005), YANG et al. (2005), Ip (2005), Hong Lu (2006), Bellais (2007), Johansson et al. (2007), Rein et al. (2007), Saidi et al. (2007), Yang et al. (2008). Nestes trabalhos o problema de combustão é abordado com diferentes níveis de complexidade, por isso só trabalhos julgados mais recentes em combustão de sólidos serão resumidos a seguir, para efeito de revisão bibliográfica.

Helsen e Van Den Bulk (2001) propuseram um modelo matemático unidimensional, bifásico e transiente para simulação da pirólise de uma única partícula de madeira seca. Em tal modelo a fase sólida consistia de madeira e resíduo de carbono. A fase gasosa era composta de gases voláteis e alcatrão. Equações de conservação médias no volume para a massa e energia foram desenvolvidas para a fase sólida e para a gasosa. Uma equação de conservação média no volume para quantidade de movimento foi utilizada para o cálculo do escoamento do gás no meio poroso. A cinética química e a pirólise foram modeladas por mecanismos globais. A variação das propriedades físicas e de transporte com a temperatura e com a composição foi contabilizada com equações algébricas. O código comercial de CFD PHOENICS foi utilizado para resolver numericamente as equações matemáticas. O modelo foi validado através da comparação com dados experimentais. Segundo os autores, o modelo podia descrever qualitativamente a evolução da pirólise e prover uma boa predição dos perfis internos de temperatura de

uma partícula termicamente espessa, o que é especialmente importante para grandes partículas, cuja conversão de massa é altamente dependente da temperatura.

Em Wendt et al. (2002) foi desenvolvido um modelo numérico bidimensional, baseado no código comercial FLUENT, para predizer a pirólise e a ignição de uma única partícula de carvão exposta a fluxo de calor radiativo. No modelo os gradientes de temperatura intrapartícula e a absorção de radiação térmica se modificavam com a liberação local de voláteis e, portanto, com a conversão do carvão virgem. Os gradientes de pressão interna originados pela liberação de massa durante a pirólise, que causam o escoamento viscoso de gás através dos poros, foram descritos pela lei de Darcy. O modelo considerava que a combustão intrínseca de coque era dependente da concentração local de oxigênio. A ignição era identificada tanto por aumento da temperatura da fase gasosa quanto pela condição de inflexão da temperatura da superfície da partícula para os modos de ignição heterogênea e homogênea. Na comparação com modelos unidimensionais publicados na literatura, que assumiram partícula isotérmica, foi verificada razoável concordância para demora de ignição com partículas pequenas inseridas em ar aquecido. No entanto, desvios para partículas maiores que $300\mu\text{m}$ foram observados, relacionados à fase de ignição primária. Tais desvios foram atribuídos aos gradientes de temperatura intrapartícula. O modelo foi aplicado para predizer o efeito da forma da partícula no processo de ignição, que já foi observado em experimentos sob condições de microgravidade. Os resultados numéricos ficaram em concordância com os experimentais e mostraram que o tempo de ignição homogênea era menor para a forma discoidal seguida pela forma cilíndrica e então pela forma esférica. A demora da ignição heterogênea, também calculada, não acompanhou esta tendência.

Rostami et al. (2004) modelaram a combustão sem chama de um leito de combustível poroso. Os autores dividiram a modelagem da combustão em duas partes. A primeira consistia da modelagem do escoamento do fluido e da transferência de calor, esta parte foi resolvida diretamente com o código comercial FLUENT 4.5. A segunda parte envolvia a pirólise e as reações de combustão. De forma geral, o modelo desenvolvido era bidimensional, axissimétrico e transiente, baseado nos princípios de conservação para a combustão de um bastão cilíndrico de combustível sólido poroso. A transferência de calor foi representada por duas equações de energia, que modelaram a transferência de calor para a fase sólida e a gasosa. Nas simulações o material era submetido primeiro a pirólise, que consistia de um conjunto de reações de primeira ordem, desta resultava um resíduo sólido carbônico que era oxidado. A conversão de massa sempre era acompanhada pela formação

de produtos de combustão da fase gasosa. Cálculos de combustão foram feitos para várias condições de contorno, propriedades físicas do combustível e porosidade. Os resultados das simulações incluíam perfis de temperatura de gás e de sólido, concentração de oxigênio, velocidade de gás e distribuição de pressão. Os efeitos da perda de calor pela superfície, do poder calorífico, da taxa de insuflação de ar, da porosidade do combustível e da velocidade da frente de combustão foram discutidos. Segundos os autores, as simulações capturaram o desenvolvimento de uma região de combustão permanente que se movia sob taxa constante. Os picos de temperatura e velocidade de combustão ficaram dentro das faixas dos dados experimentais. A partir de um estudo paramétrico foi identificado que os parâmetros mais importantes eram transferência de massa lateral e condições de contorno para oxigênio e coeficiente de transferência de calor para combustão natural, sem insuflação de ar. Na combustão com insuflação de ar, a taxa de insuflação de ar no meio poroso e a porosidade do meio eram os parâmetros principais. Os resultados do modelo concordaram razoavelmente com dados experimentais para o caso da combustão. Segundos os autores um grande número de melhorias ainda precisa ser realizada no modelo, principalmente relacionadas às perdas de calor.

Hong Lu (2006) analisou a pirólise e a combustão de biomassa através de experimentação em reator e modelagem numérica. Parte experimental do trabalho foi realizada em um reator de leito arrastado. Este reator trabalhava com atmosferas de nitrogênio/ar a uma temperatura máxima de parede de 1600 K. Partículas grandes, ~40 μ m, foram reagidas em suspensão em uma fornalha de partícula única, operada em condições similares às do reator de leito arrastado. O autor propôs um modelo de combustão numérico unidimensional e transiente para secagem, pirólise, oxidação e gaseificação do resíduo carbônico de partículas com diferentes formas. O modelo contabilizava o encolhimento e o inchamento da partícula. Foi mostrado, no trabalho, como a forma e o tamanho da partícula influenciavam a taxa de combustão. As previsões do modelo para três formas diferentes de partículas concordaram razoavelmente com os dados experimentais. Hong Lu (2006) conclui que quanto mais se aproxima da forma esférica, mais rápida é a conversão do combustível.

Saidi et al. (2007) desenvolveram um modelo tridimensional para simulação numérica da combustão sem chama em regime permanente de um meio poroso. O combustível do estudo consistia de celulose e tabaco (cigarro), embrulhado em um papel poroso e envolvido por ar ambiente. O modelo considerava os efeitos de forças devido o empuxo no campo de escoamento, tratamento separado do sólido e do gás para

contabilização de desequilíbrio térmico. Foi utilizado um submodelo de cinética para múltiplos precursores e para oxidação do resíduo de carbono. As mudanças na porosidade do sólido devido à pirólise e à oxidação de carbono e os efeitos de porosidade na permeabilidade do leito e difusividade dos gases foram incluídas no modelo. Equações de conservação médias no volume para a massa, quantidade de movimento, espécies químicas e energia foram resolvidas num domínio discreto usando o código comercial FLUENT 6.0. Segundo os autores as simulações reproduziram razoavelmente as maiores características observadas experimentalmente para combustão sem chama de cigarro e celulose. Os resultados mostraram a significância do mecanismo de difusão na diluição das espécies gasosas transportadas através do cigarro. Foram apresentados perfis de velocidade, temperatura do sólido e do gás, taxa de queima e perfis de concentração de espécies gasosas através do meio poroso.

Em Yang et al. (2008) é apresentado um modelo bidimensional para partículas cilíndricas de biomassa envolvidas por uma corrente de gás e experimentação para estudar as características da combustão de uma única partícula de biomassa na faixa de 10 μm a 20 mm. Os subprocessos de secagem, pirólise, gaseificação de coque e reações homogêneas na fase gasosa foram considerados na modelagem. Segundo os autores, pela primeira vez o escoamento de camada limite era modelado para revelar a microestrutura do escoamento de fluido envolta de uma partícula em combustão. Apesar de considerar duas equações de energia, uma para a fase sólida e outra para a fase gasosa, os autores assumiram que as fases apresentavam mesma temperatura dentro da partícula sólida, ou seja, era assumido o equilíbrio térmico no meio poroso. Uma análise de sensibilidade foi conduzida para identificar os parâmetros que mais influenciavam a combustão, dando ênfase ao tamanho da partícula e a taxa de aquecimento. Os resultados das simulações auxiliaram na determinação de casos de interface: partículas grandes/pequena. No caso de grandes partículas suspensas, foi demonstrada a ocorrência de características gerais da combustão, incluindo a liberação de alcatrão e sua combustão. Tais observações foram consistentes com observações experimentais realizadas com partículas de biomassa em suspensão. Os autores concluem o artigo afirmando que os efeitos ocorriam em partículas que maiores que 200–250 μm em diâmetro, para partículas de biomassa esférica, e 150–200 μm para partículas de biomassa cilíndrica dependência das condições exatas de troca de calor.

Pode-se verificar que existem muitas semelhanças entre os modelos resumidos anteriormente. Por exemplo, em todos os trabalhos mencionados existe o consenso que é

importante à consideração dos gradientes de temperatura dentro da partícula sólida para melhor predição da ignição, secagem, pirólise, oxidação e gaseificação.

Em alguns trabalhos os efeitos de camada limite são considerados através de condições de contorno (Helsen e Van den Bulk, 2001; Rostami et al., 2004; Hong Lu, 2006), mas destacam que a transferência de calor e de massa podiam ser bem preditas se a camada limite fosse incluída no domínio de cálculo e se fosse utilizado um domínio bidimensional.

A maioria trabalhos dos considera equilíbrio térmico entre as fases na proposição de seus modelos, por exemplo, em Helsen e Van den Bulk (2001), em Wendt et al. (2002), em Hong Lu (2006) e em Yang et al. (2008). Os trabalhos que não consideram o equilíbrio térmico entre as fases assumem o desenvolvimento da combustão sem a formação de chama (Rostami et al., 2004; Saidi et al., 2007). Nenhum trabalho encontrado na literatura para a combustão com chama de sólidos considerava não equilíbrio térmico.

A queima de sólidos particulados é uma necessidade atual e futura de sorte que predições numéricas do processo de combustão associado são fundamentais na interpretação de dados experimentais. Tais informações podem também auxiliar na definição de estratégias para redução na emissão de poluentes bem como no aperfeiçoamento de reatores empregados em plantas de geração de energia elétrica a partir da queima de sólidos pulverizados.

O objetivo principal deste trabalho é a modelagem da queima de combustíveis sólidos (carvão e biomassa), com destaque para os processos fluidodinâmicos, de transferência de calor e de massa na fase condensada e principalmente no meio gasoso, tanto na camada limite em torno da partícula como na estrutura porosa por ela definida. Os estágios de secagem, pirólise, reações homogêneas e oxidação do resíduo carbônico (reações heterogêneas) definem os principais processos da dinâmica deste modo de queima e foram modelados apropriadamente. O uso industrial de combustíveis sólidos tanto por meio da combustão como da gaseificação podem ser avaliadas preliminarmente por meio desta ferramenta numérica aqui proposta. Para descrever os principais processos da combustão/gaseificação o modelo propõe resolver um conjunto de equações diferenciais, destacando-se; conservação de massa total, conservação da quantidade de movimento, conservação da energia e conservação das espécies químicas para a fase gasosa. Adicionalmente, a equação da energia também é resolvida para o meio sólido. A fase condensada foi modelada como sendo uma estrutura porosa homogênea, isotrópica e saturada de fluido. As equações de conservação de quantidade de movimento, de energia e

da massa, médias no volume para o meio poroso, foram integradas no meio aberto (somente fluido) e poroso tornando desnecessárias aproximações para o cálculo das quantidades conservadas na interface entre os meios. Assim, todos os problemas relacionados à interface gás/sólido foram evitados.

Dada à complexidade matemática e numérica da proposta, alguns objetivos específicos foram propostos. Assim, parte substancial do trabalho foi dedicada ao desenvolvimento e validação de um código numérico robusto para a solução das equações diferenciais e algébricas que descrevem os fenômenos relacionados à fluidodinâmica em torno de uma partícula (bidimensional). O código proposto segue aquele dos volumes de controle baseado em elementos, CVFEM, por ser mais preciso e flexível no estudo de geometrias complexas, se comparado ao método de volumes de controle. No entanto, foi observado que algumas previsões do modelo CVFEM, originalmente proposto por Baliga e Patankar (1980), e depois melhorado por Prakash e Patankar (1985), Masson et al. (1994) e Saabas e Baliga (1994), estavam aquém dos resultados referenciais (benchmarks) obtidos com malhas de igual refinamento. Por isso, algumas modificações foram propostas ao modelo CVFEM. Estas resultaram em menor tempo de CPU e aumento da precisão dos resultados, sem necessidade de refino de malha.

Em processos de combustão, os reagentes são convertidos rapidamente nos produtos. Desta forma, a técnica de divisão de operações (dois passos fracionados) foi utilizada para solução do acoplamento existente entre conservação de energia e de espécies químicas. No primeiro passo as equações de conservação são resolvidas sem os termos de reação química, por meio da discretização do CVFEM. No segundo passo os efeitos devido à reação química são contabilizados pelo método de Runge-Kutta explícito de quarta ordem.

ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

Este trabalho contém seis capítulos. Um breve resumo dos capítulos é dado a seguir.

No capítulo 2 é apresentada a base teórica da combustão de partículas sólidas.

No capítulo 3 é apresentada a formulação do problema de combustão, incluindo as simplificações necessárias para tornar o problema solúvel via numérica.

No capítulo 4 é apresentado o método numérico que será utilizado na solução das equações diferenciais. Também foram apresentados detalhes do desenvolvimento e algumas propostas de modificação ao método numérico.

No capítulo 5 são apresentados resultados obtidos com os modelos apresentados no capítulo 3. Os casos foram validados via comparação com resultados numéricos e experimentais publicados por outros autores.

No capítulo 6 são apresentadas algumas conclusões a respeito do que foi apresentado nos capítulos 3, 4 e 5.

2 – COMBUSTÃO DE PARTÍCULAS CARBÔNICAS

2.1 – PERFIS DE CONCENTRAÇÃO DE ESPÉCIES E DE TEMPERATURA NA CAMADA LIMITE

Uma predição mais exata da composição dos gases na camada limite de uma partícula reativa é um dos principais requisitos para se entender alguns importantes processos na conversão desta num combustor ou reator de gaseificação.

Na fase com predomínio das reações homogêneas a queima de uma partícula de biomassa ou carvão pode ser estudada de forma similar àquela empregada na queima de gotas (Turns, 2000) na forma unidimensional. Neste caso, considera-se que a chama se estabelece numa região próxima à gota e tem espessura infinitesimal. Desta forma, duas regiões ficam bem definidas; a primeira entre a superfície da gota e a chama e a segunda entre a chama e a região não perturbada. Modelos matemáticos mais complexos permitem analisar o processo considerando a distribuição dos gases de forma contínua ao longo da camada limite da partícula.

Esta abordagem simplificada (chama de espessura infinitesimal) é empregada também na fase de queima heterogênea da partícula sólida (carbônica) cujos voláteis foram exauridos (coque). Diversos pesquisadores tentaram caracterizar a distribuição dos principais gases na camada limite de uma partícula em combustão por modelos conhecidos como; de filme simples, de filme duplo e contínuo (Ulzama, 2007).

Os modelos de filme simples e duplo compartilham algumas simplificações, sendo as principais (Turns, 2000); partículas tomadas como esféricas - tornando os modelos unidimensionais, inexistência de interação entre partículas, meio ambiente infinito e filme de gás estagnado composto apenas de oxigênio e um gás inerte.

Na fase onde predominam as reações heterogêneas (oxidação do coque) o modelo de filme simples assume que o oxigênio reage com o carbono na superfície da partícula, local onde se identifica a máxima temperatura das fases gasosa e condensada, com os produtos da combustão afastando-se, por difusão, da superfície da partícula. Como a reação ocorre na superfície da partícula desconsidera-se a existência de chama na fase gasosa (Winter, 1995). Este modelo é esquematicamente apresentado na figura 2.1(a). Apesar da simplicidade, este modelo possibilita inferir se a combustão do coque é limitada pela cinética química ou devido à difusão do oxidante na camada limite, como consequência do diâmetro da partícula, temperatura e pressão dos gases. O modelo de

filme simples é aplicável a partículas com diâmetro inferior a 100 μm (Ayling & Smith, 1972).

O modelo de filme duplo é uma evolução do modelo de filme simples, pois contabiliza possíveis reações de oxidação na fase gasosa. Se a oxidação do carbono na superfície da partícula produzir majoritariamente CO, pode ocorrer oxidação deste para CO₂ na vizinhança da partícula, alterando os fluxos de massa e calor na fase gasosa. Considera-se também que os reagentes são totalmente consumidos na chama, por isso não coexistem no espaço (Turns, 2000). A figura 2.1 (b) ilustra uma aproximação assumida como referência. O modelo de filme duplo é normalmente aplicado para partículas de diâmetro maior que 1,0 mm (Wicke & Wurzbacher, 1962).

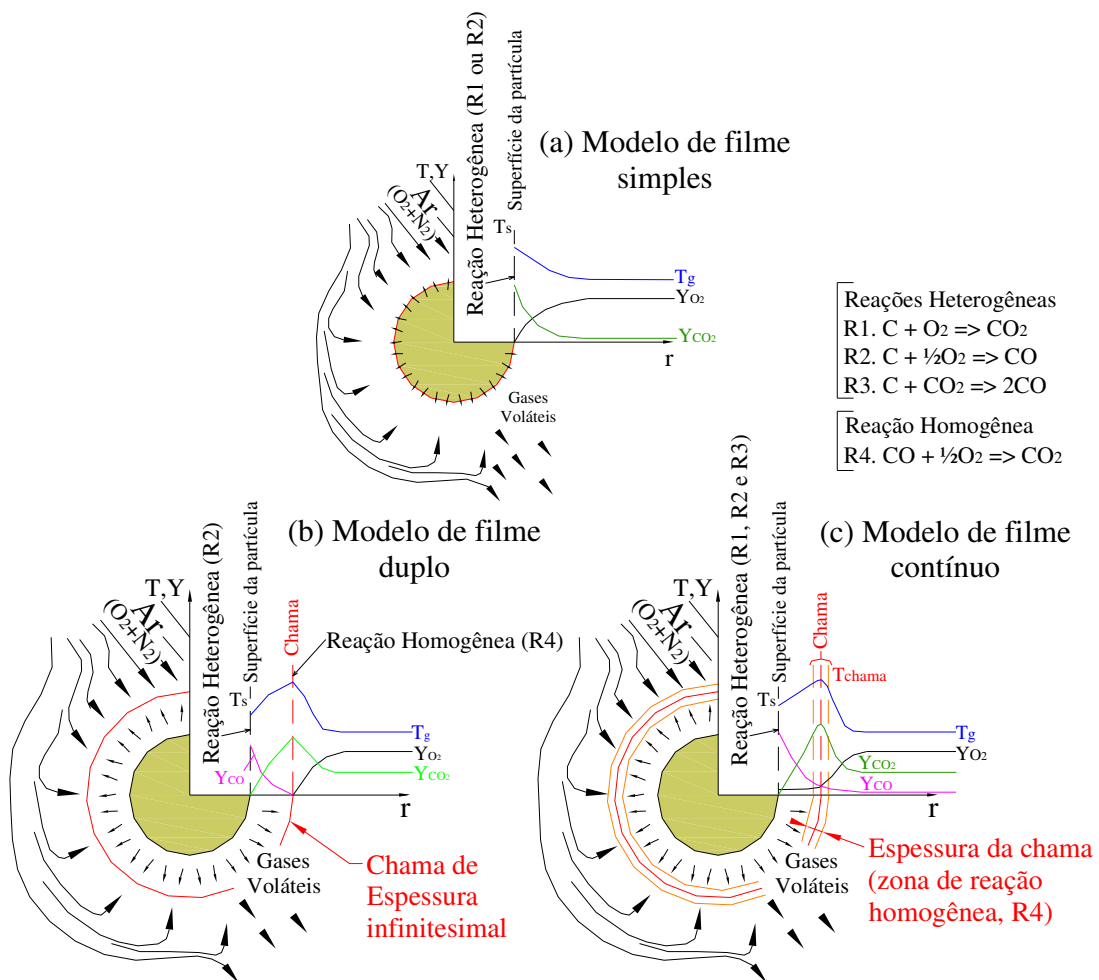


Figura 2.1- Modelos de perfis de concentração envolta de uma partícula em combustão.

A melhor aproximação para os processos que ocorrem na camada limite da partícula em combustão é dada por modelos contínuos. Segundo Veras (1997), neste modelo a zona de chama é distribuída dentro da camada limite da partícula e a posição da chama se dá pela difusão dos gases reagentes e os limites de inflamabilidade da mistura. Uma representação simplificada da distribuição de espécies é apresentada na figura 2.1(c). Este modelo não sofre de limitação de tamanho da partícula, por isso pode ser utilizado na faixa de tamanhos 100 -1000 μm , muita mais abrangente que aqueles tratados nos modelos de filme simples e filme duplo.

2.2 – PERFIS DE TEMPERATURA NO INTERIOR DE UMA PARTÍCULA EM COMBUSTÃO.

O perfil de temperatura no interior de uma partícula pode ser definido previamente, como hipótese simplificadora, a partir do número de Biot térmico (definido como a razão entre a transferência de calor convectiva e difusiva no interior da partícula, $Bi_T = h_c r_p / k_s$, em que $r_p = V/A_s$). Se Bi_T for menor que 0,1; os gradientes de temperatura internos a partícula podem ser desprezados e a partícula pode ser assumida isotérmica, ou seja, de perfil de temperatura constante (Bryden *et al.*, 2002). Apesar de isotérmica, a temperatura da partícula pode variar com o tempo, em processos não estacionários. Porém, esta hipótese só é válida se as reações heterogêneas restringirem-se à superfície da partícula (Costa, 2002).

Diferente das pequenas partículas, aquelas de maior tamanho podem apresentar gradientes consideráveis de temperatura na fase de aquecimento. Neste caso, se $Bi_T > 10$ a transferência de calor fica totalmente limitada pela condução interna (Bellais, 2007). O termo grandes partículas pode ser substituído por partículas termicamente espessas (Yang, *et al.*, 2005). Nestas partículas, os processos de transferência de massa internos a partícula, devido secagem e a pirólise, são controlados pela transferência de calor interna (Bellais, 2007). Portanto, cálculos precisos da distribuição de temperatura no interior de uma partícula termicamente espessa são necessários para melhor definir os processos na fase condensada.

A figura 2.2 ilustra a forma que os perfis de temperatura podem assumir em função do número de Biot térmico.

Os modelos mais recentes de combustão de partículas carbônicas tratam o meio sólido como um meio poroso. Em um meio poroso existem duas possibilidades para

realização do cálculo da distribuição de temperatura (Nield e Bejan 2006). Uma com base na hipótese de equilíbrio térmico local entre o meio sólido poroso e o meio gasoso. Desta forma, apenas uma equação de conservação de energia deve ser solucionada. Rigorosamente, pode-se desconsiderar o equilíbrio entre as fases e, portanto, duas equações de conservação da energia necessitam ser resolvidas; uma para a fase sólida porosa e outra para a gasosa. Nesta hipótese, o acoplamento entre as equações de energia é contabilizado por um coeficiente de troca de calor convectivo, baseado na área superficial entre as fases.

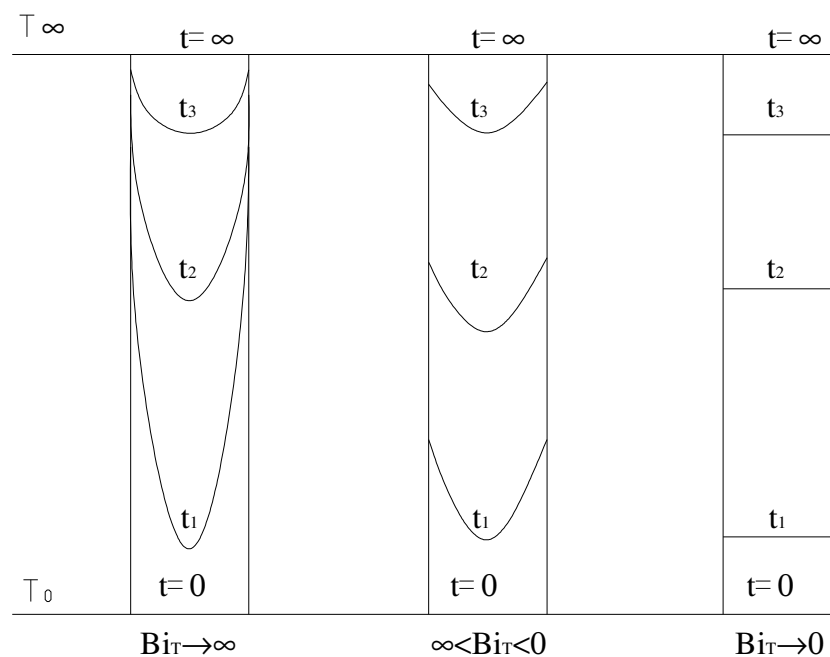


Figura 2.2 - Distribuição de temperatura dentro de uma partícula durante aquecimento para vários Bi_T , para uma partícula de temperatura T_0 no tempo $t = 0$, repentinamente exposta a uma temperatura T_∞ (adaptado de Thunmans, 2004).

2.3 – MODELOS DE ESTRUTURA POROSA E CONCENTRAÇÃO DE ESPÉCIES EM UM SÓLIDO EM COMBUSTÃO.

O número de Biot mássico, $Bi_M = h_{MTP}/D_{eff}$, é utilizado para caracterizar o tipo de resistência predominante na transferência de massa, se interna a partícula ou externa. Conforme Cremasco (2002), nos casos em que $Bi_M \rightarrow 0$, o processo limitante para a transferência de massa é externo ao meio poroso, sendo a resistência interna deste

considerada desprezível. Nestes casos, em processos reativos, é comum assumir o meio sólido sendo impermeável aos gases reagentes e o material volátil produzido no interior do sólido é instantaneamente expulso através da superfície da partícula, sem qualquer resistência (Veras, 1997). Assim, qualquer efeito do sólido no meio fluido é contabilizado por condições de contorno.

Para $Bi_M \rightarrow \infty$, na prática ocorre quando $Bi_M > 50$, a resistência externa ao fenômeno de transferência de massa é desprezível se comparado aquela do meio poroso (Cremasco, 2002). Neste caso a fase condensada deve ser tratada como meio poroso, por uma matriz de poros de tamanhos e formas diferentes, onde ocorre o transporte de produtos e reagentes cuja resistência não pode ser desprezada.

Os trabalhos de simulação das fases de secagem (em altas temperaturas), de pirólise ou da combustão onde o meio sólido é considerado poroso, homogêneo e isotrópico, com poros de um único tamanho, serão referenciados no presente trabalho como sendo convencionais. Trabalhos que servem de exemplo neste caso são; Peters e Bruch (2002), Bryden *et al.* (2002), Krabbenhøft (2003), Bryden e Hagge (2003), Berkel (2004), Rostami *et al.* (2004), Yang *et al.* (2005), Ip (2005), Hong Lu (2006), Bellais (2007), Johansson *et al.* (2007), Rein *et al.* (2007). Adicionalmente, na maioria dos modelos convencionais não é comum considerar-se a variação da porosidade como função da conversão de material sólido, nem tampouco modelar a mesma como bimodal (Sotirchos & Amudson, 1984; Biggs e Agarwall, 1996; Wang & Bhatia 2001; Perkins & Sahajwalla, 2005), onde a existência de macro-poros e micro-poros define estruturalmente a fase condensada. Neste modelo, as reações heterogêneas ocorrem, predominantemente, nos micro-poros. Estes têm sua concentração alterada na medida em que o sólido (coque) é oxidado ou mesmo gaseificado. Os macro-poros servem principalmente como canais de transporte dos gases na partícula. Os macro-poros têm sua dimensão alterada pela degradação térmica da partícula (pirólise). Na estrutura porosa bimodal a análise de Stefan-Maxwell tem sido classicamente aplicada na predição das concentrações de espécies (modelo *Dusty Gas*). A porosidade do meio é função da conversão de massa. Assim, na medida em que a conversão de material sólido é observada, ocorre aumento da porosidade, redução da resistência ao transporte e fragmentação periférica, que consiste na desintegração da estrutura porosa na superfície da partícula. As reações heterogêneas provocam mudanças na estrutura porosa da partícula e também causam alterações na reatividade. A mudança da área reativa da partícula (área superficial dos micro-poros) durante as reações químicas

pode ser calculada, por exemplo, com o modelo de poro aleatório de Bhatia e Perlmutter (1980).

Se o domínio incluir apenas o meio poroso, excluindo a camada limite do domínio de cálculo, as condições de contorno devem levar em conta os efeitos de camada limite. Tais efeitos geralmente são aproximados através de coeficientes globais de troca de calor e massa, calculados com base experimental ou obtidos do número de Nusselts ($Nu=h_{CD}/k_g$) e do número de Sherwood ($Sh=h_{MD}/D_{AB}$), respectivamente. Muitas correlações empíricas estão disponíveis na literatura para estes números, considerando escoamento laminar, porém, tais correlações são mais confiáveis para formas específicas da partícula, como placas, cilíndricos ou esferas. Tais correlações não podem ser aplicadas a geometrias genéricas (Hong Lu, 2006). Estes coeficientes globais de troca de calor e massa devem ser corrigidos quando se tem conversão do material sólido em gasoso devido ao fluxo de Stefan (Peter e Bruch, 2001). Este efeito geralmente produz redução dos coeficientes globais, especialmente nos estágios de secagem e pirólise, uma vez que o escoamento dos gases se dá principalmente no sentido oposto ao da transferência de calor e massa na camada limite da partícula.

Espessuras de camada limite para estimativa da transferência de calor e massa também são necessárias para a imposição de condições de contorno nos limites do domínio. Muitas aproximações estão disponíveis na literatura, mas deve-se atentar para possíveis alterações nesta dimensão (Hong Lu, 2006), devido à presença de chama nas vizinhanças da partícula. O autor conclui que um modelo bidimensional seria mais adequado para prever a espessura exata de camada limite.

2.3 – MODELOS MATEMÁTICOS DE CONVERSÃO DE MASSA.

2.3.1 – Secagem

A umidade geralmente está presente em sólidos porosos como biomassa e carvão e pode ocorrer de duas formas: água livre no interior dos poros do combustível, incluindo umidade superficial, e como água adsorvida no interior da estrutura porosa do combustível (Thunman, 2004).

O conteúdo de água, ou umidade, é definido como uma fração da massa da partícula seca em $102^{\circ}\text{C}\pm 3^{\circ}\text{C}$ (Bellais, 2007):

$$Y_U = \frac{m_{H_2O}}{m_{madeira}} \quad (2.1)$$

Onde: $m_{madeira}$ é a massa de madeira seca e m_{H_2O} é massa de água no sólido.

Segundo Bellais (2007) o conteúdo de umidade de madeira verde varia de 40 a 60%. Algumas publicações definem o conteúdo de umidade em base úmida, massa total da partícula, incluindo a massa da própria umidade:

$$Y_U = \frac{m_{H_2O}}{m_{madeira} + m_{H_2O}} \quad (2.2)$$

Durante o aquecimento e a secagem de uma partícula sólida predominam os processos físicos, tais como transferência de calor e de massa. A secagem é certamente um processo endotérmico e ocorre, majoritariamente, quando a partícula excede cerca de 105°C (Tillman, 1991). A pirólise, entretanto, pode ser endotérmica ou exotérmica.

É importante atentar que durante a secagem de uma partícula a umidade evaporada pode ser transportada tanto para fora da partícula quanto para seu interior, onde poderá condensar se a temperatura e pressão permitirem (Thunman, 2004). Como consequência, a modelagem do processo de secagem deve considerar, necessariamente, as taxas de vaporização e de condensação.

O impacto da secagem no processo subsequente de pirólise tem sido bastante investigado. De acordo com Bilbao (1996), o conteúdo de umidade é um fator importante que influencia o comportamento do combustível na combustão. Isto porque o processo de evaporação consome energia, o que retarda o processo de decomposição do material, modifica os perfis de temperatura no interior da partícula bem como das taxas e produtos da pirólise (Bryden *et al.*, 2002). Segundo Galgano e Di Blasi (2004), o conteúdo inicial de umidade também afeta outras variáveis do processo, como reatividade, temperatura de pirólise e níveis máximos de voláteis emanados.

O cálculo da taxa de evaporação é a parte crítica de um modelo de secagem (Bellais, 2007). Existem diferentes formas de modelar o processo de secagem de partículas em altas temperaturas. Os modelos mais frequentemente encontrados na literatura podem ser ordenados em três tipos distintos (Bellais, 2007); modelo de sorvedouro de calor (i),

modelo cinético de primeira ordem (ii) e modelo de equilíbrio de fases (iii). O modelo de equilíbrio se baseia na hipótese que o vapor de água está em equilíbrio com a água líquida. Então, a pressão parcial de vapor de água é fixada pela pressão de saturação. Segundo Bryden e Hagge (2003), uma inconsistência deste modelo reside no fato que é improvável a ocorrência de equilíbrio dentro de uma partícula de biomassa submetida a fluxos de calor típicos de processos de combustão. Uma das aproximações mais utilizadas é aquela na qual o processo de secagem é considerado como uma reação heterogênea (Peters & Bruch, 2002; Thunman, 2004). Esta aproximação apresenta vantagem no que concerne à estabilidade do modelo numérico. Como desvantagem no uso de expressão de Arrhenius para o cálculo da secagem destaca-se o uso de uma expressão única para reproduzir fenômenos físicos diferentes (Bryden & Hagge, 2003).

Em Bellais (2007) os três modelos de secagem mencionados foram comparados. Experimentos e simulações foram realizados para uma temperatura externa variando de 360 a 580 °C. A principal conclusão do trabalho foi a não ocorrência de resultados discrepantes das predições dos modelos de secagem, tanto para a predição da taxa global de secagem como para temperatura de superfície do sólido.

2.3.2 – Pirólise

Em um ambiente de combustão, após a secagem de uma partícula, ou de determinada zona no seu interior, a sua temperatura atinge valores que promovem decomposição térmica do combustível sólido, liberando alcatrão (hidrocarbonetos de alto peso molecular) e gases leves não condensáveis, ficando a fase condensada com excesso de carbono, normalmente referenciado como coque. Se o fluxo de voláteis impedir a penetração do oxigênio na partícula, então a devolatilização é referenciada como estágio de pirólise (Ragland & Borman, 1998).

Se a quantidade de oxigênio presente no meio que envolve a partícula for suficiente, os produtos da pirólise podem reagir numa chama difusa em torno da partícula, acelerando o processo de transferência de calor e aquecimento da partícula, resultando no aumento da taxa de liberação dos voláteis. Este tipo de liberação de massa geralmente não acarreta diminuição expressiva do tamanho da biomassa, mas sim o aumento de sua porosidade (Basu, 2006). Em certos casos pode ocorrer a dilatação da partícula, causada pela alta pressão interna exercida pela liberação dos gases quando a partícula sofrer

amolecimento. As pressões internas também podem, inclusive, provocar a fragmentação da partícula.

Diversos fatores afetam a taxa de pirólise, a produção final, a composição e a propriedades dos produtos emanados. Conforme Veras (1997), a temperatura, a pressão e a taxa de aquecimento são os parâmetros operacionais principais. Além disso, as propriedades da biomassa ou do carvão mineral (composição química, conteúdo de cinza, tamanho de partícula e forma, massa específica, umidade) influenciam o processo. (Di Blasi, 2008).

A degradação térmica de uma partícula pode ser aproximada de muitas maneiras. De acordo com Saastamoinen (2006), a aproximação mais simples é aquela na qual a liberação de material volátil ocorre instantaneamente quando a partícula é introduzida em ambiente suficientemente quente. De forma geral, a produção de voláteis tem sido estimada através de reações globais irreversíveis de taxa única ou múltiplas, na forma de equação de Arrhenius. Alguns dos modelos mais recentemente utilizados na literatura (tabela 2.1) são comentados a seguir.

Para a madeira, a hemicelulose entra no estágio de pirólise em 225 – 325°C, a celulose em 325-375°C e a lignina em 300-500°C (Ragland & Borman, 1998). A hemicelulose é a mais reativa das três. Apesar dos componentes da madeira apresentarem taxas de pirólise específicas, é comum empregar-se uma taxa global única na forma de Arrhenius ($k = A \exp[-E/(R_u T_p)]$) na modelagem da combustão. É importante notar que o fator pré-exponencial, A, e a energia de ativação, E, são determinados experimentalmente para condições específicas de combustão e tipo de combustível (Ragland *et al.*, 1991). Segundo Arenilas *et al.* (2001) a aproximação de taxa global única pode ser útil na comparação de amostras diferentes ou processos de pirólise diferentes, porém, não ajusta os resultados experimentais com grande precisão para um combustível específico.

Nas elevadas taxas de aquecimento e temperaturas de combustão a quantidade de material volátil liberado pelas partículas é maior e o de carbono fixo menor do que o sugerido pela análise imediata (Ragland *et al.*, 1991). Além disso, segundo Ushima (1999), os produtos de pirólise gerados em temperaturas relativamente moderadas (200 a 350°C) apresentam elevados teores de CO₂ e vapor d'água. Os produtos gerados em temperaturas mais elevadas (400 a 800°C) apresentam maiores concentrações de CO, H₂, CH₄. O modelo de taxa única não é capaz de prever os fenômenos supracitados. Alternativamente, pode se valer de modelos de pirólise baseados em duas reações paralelas concorrentes (Kobayashi *et al.*, 1976; Ubhayakar *et al.*, 1976). Nestes modelos,

apresentados na tabela 2.1, dois fatores de produção total de voláteis são utilizados nas reações competitivas. Uma energia de ativação é muito maior que a outra, a reação de baixa produção é favorecida em baixa temperatura, enquanto que a reação de alta produção é favorecida em altas temperaturas. Como a taxa de liberação de massa é dependente da temperatura, a produção total de voláteis, em altas taxas de aquecimento e temperaturas, apresenta boa aproximação com dados experimentais.

Para biomassa, de acordo com Di Blasi (1996), o modelo semi-global de dois estágios é mais adequado que aquele de taxa única, na medida em que se contabiliza a degradação primária e a secundária (tabela 2.1). A reação secundária acontece na fase vapor-gás dentro dos poros do material sólido e a taxa de reação é proporcional à concentração dos vapores de alcatrão (Di Blasi, 1996). Quando a concentração deste produto for muito baixa, esta reação não terá tanta influência.

A pirólise tem sido modelada por uma série infinita de reações paralelas, como proposto por Anthony *et al.* (1975), no modelo de energia de ativação distribuída, (*Distributed Activation Energy Model- DAEM*). As principais simplificações na proposição do DAEM consistem em assumir que todas as reações compartilham o mesmo fator de frequência e que o número de reações é grande o bastante que permite expressar a distribuição de energia de ativação por uma função contínua. Esta função geralmente é tomada como uma distribuição Gaussiana com uma energia de ativação média e um desvio padrão. No modelo DEAM os parâmetros cinéticos para a taxa de volatilização são determinados para um combustível específico e em condições experimentais particulares (Williams *et al.*, 2000).

Estudos cinéticos dos componentes de biomassa isolados e de biomassa sintética indicam que a interação entre os componentes (celulose, hemicelulose e lignina) não é tão significativa quanto a sua composição. Por conta disso muitos pesquisadores, tais com Radmanesh *et al.* (2006), Raveendran *et al.* (1996), Órfão *et al.* (1999), Demirbas (2004), Hong Lu (2006), consideram o modelo de três reações paralelas independentes, chamado de modelo de superposição, como o melhor modelo cinético para descrever a pirólise da madeira em taxas de aquecimento moderadas. Este modelo é apresentado na tabela 2.1. Recentemente, Belderok (2007) fez um extenso estudo para a determinação dos parâmetros cinéticos deste modelo e relatou que os experimentos mostraram uma diferença clara de comportamento entre madeiras macias e duras e biomassa não-madeira. Foi verificado que a degradação térmica da hemicelulose de madeira dura acontece em uma temperatura mais baixa que nas macias.

Os bons resultados do modelo de superposição, segundo Chen *et al.* (1998), não são garantidos quando os parâmetros cinéticos não são totalmente conhecidos ou são inconsistentes de um laboratório para outro. Di Blasi (2008) também apoia este ponto de vista por questões de confiabilidade e sistematização na condução dos experimentos.

Reconhecendo que a estrutura química dos combustíveis influencia a decomposição térmica, os modelos fenomenológicos abandonam o empirismo presente nos modelos de taxa cinética global e se baseiam na estrutura físico-química dos combustíveis para a previsão das taxas de liberação de voláteis. De acordo com Eaton (1999) três modelos estruturais são capazes de prever a decomposição térmica numa ampla faixa de temperatura, taxas de aquecimento e pressão. São eles:

- Functional Group - Depolymerization, Vaporization Cross Linking Model – FG-DVC (Solomon *et al.*, 1990);
- FASHCHAIN (Niksa, 1991);
- Chemical Percolation Devolatilization Model – CPD (Grant, 1989; Fletcher *et al.*, 1992).

A estrutura química do combustível pode ser caracterizada por NMR (*Nuclear Magnetic Resonance*), FTIR (*Fourier Transform Infra-Red*) ou outros procedimentos padronizados. De acordo com Eaton *et al.* (1999) a principal diferença entre os modelos estruturais citados está no modelo de rede empregado para interpretar as inter-relações características da estrutura macromolecular do carvão, alcatrão e coque. O modelo FG-DVC utiliza uma estrutura Bethe de dois parâmetros. O FLASHCHAIN usa um modelo de cadeia direta, sem ligações cruzadas, para aproximar o impacto qualitativo da rede macromolecular. O modelo CPD usa a teoria de percolação e uma estrutura Bethe tridimensional para aproximar uma rede de carvão onde as frações das pontes intactas e números de coordenação são determinados de dados de C NMR.

Além da modelagem do processo de degradação térmica a predição do calor de reação associado é outro grande desafio. Por exemplo, Adesanya e Pham (1995) relataram que o calor de reação de pirólise é muitas vezes desprezível e varia durante o processo, sendo endotérmico nos estágios iniciais e exotérmico nos estágios finais. Dependendo da temperatura de pirólise pode-se ter o processo globalmente exotérmico ou endotérmico. Este comportamento é verificado tanto para madeira quanto para o carvão. Como o calor

de pirólise é relativamente modesto autores consideram o processo como termicamente neutro.

Finalizando, como já foi comentado, se uma partícula for termicamente espessa o processo de conversão de massa devido à pirólise será controlado pela transferência de calor e massa, por isso, independente da sofisticação do modelo de pirólise a predição da degradação térmica só será precisa se também for utilizado um bom modelo de transferência de calor.

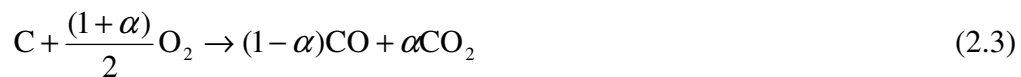
Tabela 2.1 - Modelos de Pirólise.

<p>Modelo de taxa única Combustível(m_p) \xrightarrow{k} $m_p(Y_1)$Gás + $m_p(1 - Y_1)$Coque $\frac{dm_i}{dt} = Y_i k m_p$, $k = A_1 \exp[-E_1/(RT_p)]$</p>	<p>m_p é a massa da partícula, m_i representa a massa de gás e coque produzidos e Y_i corresponde à fração de cada componente no combustível.</p>
<p>Modelo de Reações Concorrentes Combustível(m_p) $\xrightarrow{k_1}$ $m_p(Y_1)$Gás + $m_p(1 - Y_1)$Coque Combustível(m_p) $\xrightarrow{k_2}$ $m_p(Y_2)$Gás + $m_p(1 - Y_2)$Coque $\frac{dm_p}{dt} = (k_1 + k_2)m_p$, $k_i = A_i \exp[-E_i/(R_u T_p)]$, $i = 1,2$</p>	<p>Os termos Y_1 e Y_2 representam diferentes fatores de produção para as duas reações competitivas.</p>
<p>Modelo Semi-global de Dois Estágios Reações primárias: Reações secundárias: Madeira $\xrightarrow{k_1}$ Gás Alcatrão $\xrightarrow{k_4}$ Gás Madeira $\xrightarrow{k_2}$ Alcatrão Alcatrão $\xrightarrow{k_5}$ Coque Madeira $\xrightarrow{k_3}$ Coque $\frac{dm_i}{dt} = m_p k_i$, $k_i = A_i \exp[-E_i/(R_u T_p)]$, $i = 1,2,3,4,5$</p>	<p>m_p é a massa da partícula.</p>
<p>Modelo de Energia de Ativação Distribuída $\frac{m_V - m}{m_V} = \int_{E_0 - 2\sigma}^{E_0 + 2\sigma} \exp\left(-\int_0^\infty k t dt\right) f(E) dE$ $f(E) = \frac{1}{\sigma(2\pi)} e^{-\frac{E - E_0}{2\sigma^2}}$, $k = A_1 \exp[-E_1/(R_u T_p)]$</p>	<p>A distribuição de energia de ativação é definida por uma energia de ativação média, E_0, e por um desvio padrão, σ. m_V é a massa de material volátil.</p>
<p>Modelo de Superposição dos Constituintes da Biomassa Madeira($f_1 m_p$) $\xrightarrow{k_1}$ } Gás($Y_{\text{gás}} m_p$) + coque($Y_{\text{coque}} m_p$) Madeira($f_2 m_p$) $\xrightarrow{k_2}$ } Madeira($f_3 m_p$) $\xrightarrow{k_3}$ } $\frac{dm_i}{dt} = Y_i (f_1 k_1 + f_2 k_2 + f_3 k_3) m_p$ $k_i = A_i \exp[-E_i/(R_u T_p)]$, $i = 1,2,3$</p>	<p>m_i representa a massa de gás e coque produzidos, Y_i correspondem às frações de massa de gás e coque no combustível; e f_i são as frações de celulose, hemicelulose e lignina.</p>

2.3.3 – Oxidação e Gaseificação do Coque

Após a emissão de voláteis o sólido remanescente apresenta predominância de carbono na sua estrutura química. Este carbono é passível de oxidação e/ou gaseificação. Este processo é de modelagem extremamente complexa em função da natureza porosa da fase condensada e da dinâmica das reações heterogêneas. Neste item será abordado apenas o processo de oxidação da partícula. As reações de gaseificação não trazem complexidade adicional na modelagem, pois não acarretam problemas sérios de estabilidade numérica, por serem endotérmicas.

Assumindo que o oxigênio do ar difunde para a superfície de uma partícula de coque a oxidação do carbono pode ser representada de forma simplificada por um mecanismo global de reações irreversíveis da seguinte maneira, admitindo-se CO e CO₂ como possíveis produtos da reação:



Conforme observado por Hurt e Haynes (2005) a oxidação do carbono pela Eq. (2.3) não é suficiente representar, na totalidade, a complexidade do processo reativo. Há, na literatura especializada falta de consenso para os parâmetros cinéticos. A classificação e tipos de modelos mais utilizados e citados na literatura serão apresentados nos próximos parágrafos.

Os modelos de oxidação de coque podem ser classificados como globais ou intrínsecos (Smoot & Smith, 1985). Os modelos globais consideram as partículas de coque impermeáveis aos efeitos de difusão no interior da partícula e agregam tais efeitos nas constantes da taxa de reação química. Estes modelos são altamente empíricos, baseiam a taxa de reação global na área superficial externa da partícula e na concentração de oxidante na superfície desta. Os modelos intrínsecos relacionam a taxa de oxidação de coque com a área superficial específica ativa, consideram o perfil de concentração de oxidante no interior da partícula como não uniforme e necessitam de submodelos que caracterizem a estrutura e distribuição dos poros (Hong, 2000).

Walker *et al.* (1959) propuseram a existência de três diferentes zonas de temperatura ou regimes de oxidação de coque. A Figura 2.3 ilustra as três zonas graficamente e indica a dependência teórica da taxa de reação na concentração de oxigênio.

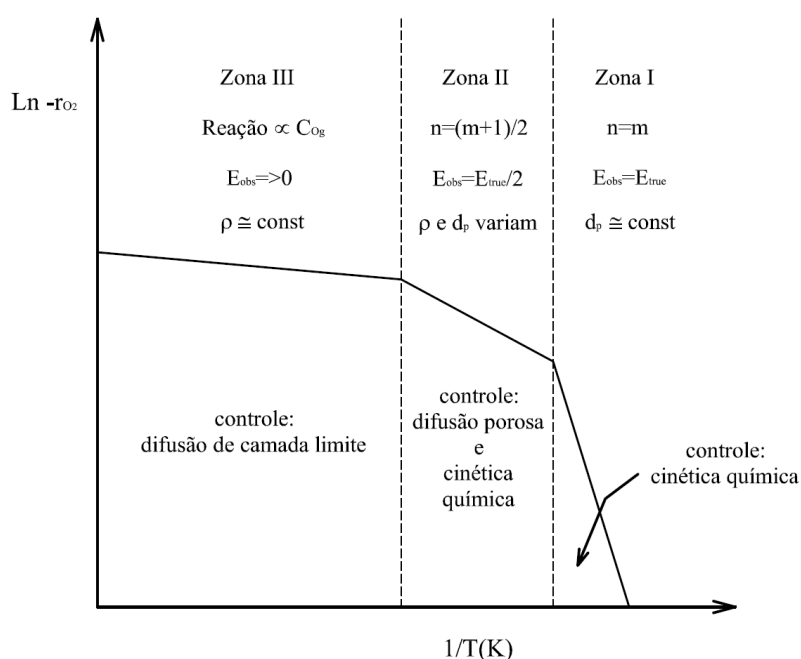


Figura 2.3 - Zonas de controle para a oxidação heterogênea de coque.

Na Zona I, onde a velocidade da reação é lenta comparada à taxa de difusão do oxidante (baixas temperaturas e partículas pequenas), a reação química é o fator limitante na queima da partícula. Nesta zona a energia de ativação observada é igual ao valor verdadeiro e a ordem aparente de reação, n , é igual à ordem verdadeira, m . Neste regime a concentração do oxidante na superfície da partícula é praticamente a mesma do escoamento não perturbado. Na Zona II a taxa de reação é controlada tanto pela cinética química quanto pela difusão porosa. A energia de ativação observada é metade do valor verdadeiro e a ordem aparente de reação, n , é relacionada à ordem verdadeira da seguinte forma: $n = (m + 1)/2$. A Zona III, que ocorre em altas temperaturas, é caracterizada pelas limitações de transferência de massa na camada limite da partícula. Nesta zona a energia de ativação observada é baixa e a ordem da reação é unitária. Este mecanismo de controle pode ser observado durante a combustão de grandes partículas.

Com frequência uma equação de taxa de n -ésima ordem empírica, modelo da tabela 2.2, é utilizada para descrever a cinética da oxidação de coque em temperaturas típicas de caldeiras industriais (Hurt & Calo, 2001). A forma mais comum da equação de taxa de n -ésima ordem é dada na tabela 2.2. Esta equação fornece uma base para a estimativa de taxa de oxidação de coque e tem se mostrada adequada para uso prático em pressão atmosférica numa faixa estreita de temperatura e, portanto, não pode ser aplicado indiscriminadamente.

De acordo com o Zeng (2005), o modelo também não contabiliza explicitamente os efeitos da difusão do oxidante nos poros na cinética química, que são implicitamente incluídos na energia de ativação observada e no fator pré-exponencial.

Um modelo de cinética química teórica mais elaborado para oxidação de coque é aquele baseado em um mecanismo de Langmuir-Hinshelwood. Conforme Hong *et al.* (2000), estudos fundamentais mostram que as reações carbono/oxigênio envolvem quimissorção, difusão superficial de oxigênio e dessorção de complexos de oxigênio superficiais. A equação da taxa de n -ésima ordem falha em refletir os passos de adsorção e dessorção no processo reativo global. Uma representação mais mecanicista da taxa de reação intrínseca é aquela na forma de Langmuir-Hinshelwood, que, na sua forma mais simples, se torna a equação de taxa de Langmuir. Esta lei de taxa prediz uma ordem de reação efetiva que varia com concentração de oxigênio na superfície e temperatura. A forma de Langmuir-Hinshelwood exibe dois casos limites para uma determinada pressão, ordem zero, controle de dessorção, no limite inferior de temperatura e primeira ordem, controle de adsorção, no limite superior de temperatura.

Um problema com o modelo Langmuir-Hinshelwood é a predição na transição de baixa para alta ordem com o aumento da temperatura o que é precisamente o oposto do comportamento experimental na faixa de temperatura baixa para intermediária. Adicionalmente, em temperatura constante, a cinética de Langmuir-Hinshelwood não prediz ordem constante com mudança de pressão parcial de oxigênio (Zeng, 2005). Por isso a cinética de Langmuir-Hinshelwood não pode ser utilizada como uma forma cinética generalizada, embora tenha mais base teórica que a cinética de n -ésima ordem.

Hurt e Calo (2001) relatam forte evidência nos dados acumulados na literatura para alta ordem de reação (0.6-1) em temperatura abaixo de 900 K, evidência mais fraca, mas significativa, para ordem baixa acima de 1200 K, e algumas sugestões de transição para outro regime de alta ordem em temperaturas de cerca de 1600 K. Nem a cinética de lei de potência global nem a cinética semi-global de Langmuir-Hinshelwood podem descrever este comportamento dependente da temperatura. Para solucionar os problemas na ordem de reação para cinética de oxidação de coque convencional Hurt e Calo (2001) propuseram um mecanismo cinético intrínseco de triplo passo, que inclui uma reação entre oxigênio gasoso e complexo de superfície C(O) que, segundo os autores, é fundamental para descrever altas ordens de reação amplamente informadas no regime de baixa temperatura da Zona I:



As taxas do modelo de triplo passo podem ser combinadas para produzir uma expressão de regime permanente para a taxa de oxidação global e razão primária de CO/CO_2 .

Em Hurt e Haynes (2005) comenta-se que muitos estudos experimentais verificaram altas ordens fracionárias para a reação global de carbono/oxigênio, incluindo estudos que cobrem uma ampla faixa de pressão parcial de oxigênio. Este comportamento persistente de n -ésima ordem é incompatível com o simples modelo cinético de Langmuir e também se constitui um desafio para modelos de múltiplos passos mais elaborados de reações elementares em superfícies ideais. Hurt e Haynes (2005) sugeriram que a ordem altamente fracionada e persistente na reação carbono/oxigênio é devido à heterogeneidade de superfície e demonstraram que até modelos de reação superficial simples, que incluíram a heterogeneidade de superfície, podem prever o comportamento de lei da potência sobre uma ampla faixa de pressão parcial se a largura da distribuição da energia de ativação para absorção e dessorção é grande. Contudo, os próprios autores reconhecem que é impraticável a caracterização superficial detalhada de cada material de carbono de interesse tecnológico necessária para uso em um modelo deste tipo.

Tabela 2.2 - Mecanismos Globais e Semi-Globais e leis de taxa correspondentes.

Modelo 1. Lei de potência global 1. $C + O_2 \rightarrow CO/CO_2$	$r_{gas} = kP_{O_2}^n$
Modelo 2. Langmuir-Hinshelwood 1. $C + O_2 \rightarrow C(O)$ 2. $C(O) \rightarrow CO$	$r_{gas} = \frac{k_1 k_2 P_{O_2}}{k_1 P_{O_2} + k_2}$
Modelo 3. Semi-global de triplo passo 1. $C + O_2 \rightarrow 2C(O)$ 2. $C(O) + O_2 \rightarrow CO_2 + C(O)$ 3. $C(O) \rightarrow CO$	$r_{gas} = \frac{k_1 k_2 P_{O_2}^2 + k_1 k_3 P_{O_2}}{k_1 P_{O_2} + k_3/2}$ $CO/CO_2 = \frac{k_3}{k_2 P_{O_2}}$

Tabela 2.3 - Mecanismos de controle e expressões de taxa para cada faixa de temperatura para o modelo semi-global de triplo passo.

Faixa de temp. da partícula	Faixa de queima simplificada	Mecanismo de controle
Temp. baixa (k_3 pequeno)	$r_{gas} = k_2 P_{O_2}$	Reação complexo-O ₂
Temperatura baixa-Moderada ($k_1 P_{O_2} \gg k_3$)	$r_{gas} = k_2 P_{O_2} + k_3$	Misto, dessorção/complexo-O ₂
Temperatura moderada ($k_1 P_{O_2} \gg k_3 \gg k_2 P_{O_2}$)	$r_{gas} = k_3$	Dessorção
Temperatura moderada-Alta ($k_1 P_{O_2}, k_3 \gg k_2 P_{O_2}$)	$r_{gas} = \frac{k_1 k_3 P_{O_2}}{k_1 P_{O_2} + k_3 / 2}$	Misto adsorção/dessorção tipo Langmuir-Hinshelwood.
Temp. muito alta (k_3 grande)	$r_{gas} = 2k_1 P_{O_2}$	Assorção

2.5 – CARACTERÍSTICAS DOS COMBUSTÍVEIS SÓLIDOS.

A caracterização dos combustíveis sólidos é importante para que se possa estudar o seu comportamento em um ambiente de combustão. Existem dois tipos de análises utilizadas para caracterizar os combustíveis sólidos carbônicos; análise elementar e análise imediata. Na análise elementar são determinadas as quantidades de carbono, hidrogênio, nitrogênio, enxofre e demais elementos que constituem o combustível seco. Já na análise imediata as quantidades de carbono fixo, umidade, material volátil e cinzas são determinados empregando técnicas padronizadas (Gomide, 1979). O poder calorífico do combustível também é uma importante característica do combustível, que é o oposto da entalpia de combustão. O poder calorífico pode levar em conta a entalpia de vaporização do vapor de água formado na combustão, sendo referenciado neste caso de Poder Calorífico Superior (PCS). Se for realizada a dedução da entalpia de vaporização da água anteriormente citada do PCS o poder calorífico é designado de Poder Calorífico Inferior (PCI).

Os combustíveis sólidos de interesse industrial incluem madeira, outras formas de biomassa, turfa e carvão (Born & Ragland, 1998). As características mais importantes destes combustíveis sólidos serão comentadas a seguir.

A madeira é um material complexo, composto de celulose, hemicelulose e lignina, além de extrativos, água e material mineral, em menor quantidade. A celulose é o componente principal da maioria dos materiais ligno-celulosicos e é a combinação orgânica mais abundante no planeta (Orfão *et al.*, 1999). Do ponto de vista físico, a

madeira é comumente caracterizada como macia e dura, diferenciadas por suas estruturas de fibra e por suas propriedades anisotrópicas. A estrutura fibrosa da madeira dura difere da estrutura da macia em tamanho, seção perpendicular e direção de fibra, como apresentado nas figuras 2.4(a) e 2.4(b). Análise elementar, considerando valores médios, dos dois tipos é apresentada na tabela 2.4. O poder calorífico superior das macias fica entre 20-22 MJ/kg e da madeira dura por volta de 19-21MJ/kg (Ragland & Aerts, 1991). Os extrativos acarretam uma pequena diferença de poder calorífico entre os tipos, segundo (Belderok, 2007). Os dois tipos de madeira apresentam poros relativamente maiores que dos combustíveis fósseis (Tillm, 1991). Por conta da porosidade, para condições de interesse prático, a biomassa sempre apresenta conteúdo de umidade relevante (Di Blasi, 2008).

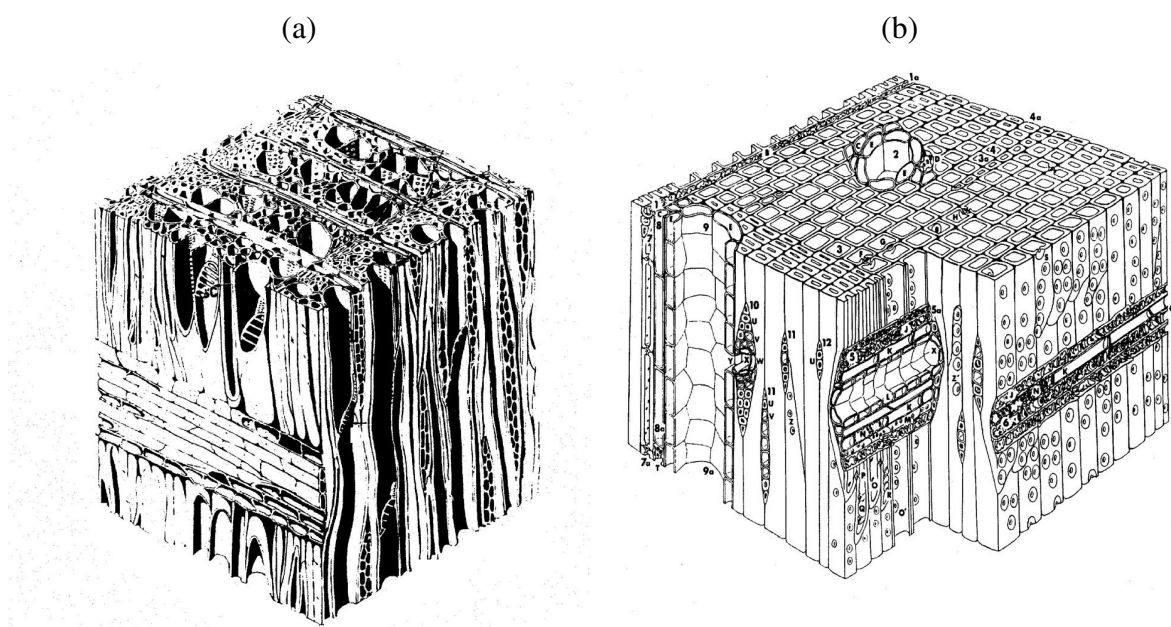


Figura 2.4 – (a) Estrutura de fibra de madeira dura (b) estrutura de fibra de madeira macia (Thunman, 2004).

Tabela 2.4 - Análise elementar da madeira (valor médio, % em massa, base seca e isenta de cinza, Ragland e Aerts, 1991).

Elemento	Composição média de madeira macia	Composição média De madeira dura
C	50,2	52,7
H	6,2	6,3
O	43,5	40,8
N	0,1	0,2
S	-	0,0

Tabela 2.5 - Análise imediata de madeira seca e de carvão vegetal (% base úmida, Ushima, 1999).

Combustível	Umidade	Voláteis	Carbono Fixo	Cinzas
Carvão vegetal	-	13-17	75-85	1-3
Cavaco de madeira seca	-	85,9	13,5	0,60

De acordo com Thunman (2004) a turfa é o primeiro estágio de formação do carvão, como consequência do decaimento de biomassa em ambientes úmidos que, na presença da ação de bactérias, se decompõe quimicamente. A taxa de formação do leito de turfa é de 3 cm a cada 100 anos. Pode conter 90% de umidade e 10% de sólido, que deste 1 a 10% aparece na forma de cinzas. Seu poder calorífico fica entorno de 20 MJ.

Segundo Thunman (2004) o carvão é constituído de um vasto conjunto de compostos orgânicos. É um sólido mineral heterogêneo composto principalmente de carbono, hidrogênio e oxigênio e quantidades menores de enxofre e nitrogênio. Outros constituintes são compostos inorgânicos, que formam a cinza (Born & Ragland, 1998). Uma importante classificação dos carvões é pelo seu grau de carbonificação, ou *rank*. A tabela 2.6 mostra as características dos diferentes *ranks* de carvão, segundo a American National Standards Institute – ASTM, dados tomados de (TILLM, 1991).

Tabela 2.6 - Características de diferentes *ranks* de carvão (Tillm, 1991).

Carvão	Limites de carbono fixo (%) ^a	Poder calorífico (Btu/lb) ^a	Análise elementar		
			C(%) ^b	H(%) ^b	O(%) ^b
Antracito	96-98		90-97	3-5	1-3
Betuminoso			85-90	4-5	5-10
Baixo volátil	68-86				
Médio volátil	69-78				
Alto volátil A	<69	<14000			
Alto volátil B		13000-14000			
Alto volátil C		11500-13000			
Sub-Betuminoso		8300-11500	75-85	5	10-20
Linhito A		6300-8300	70-75	4-5	20-25
Linhito B		<6300	50-60	5-6	35-40

^a base isenta de cinzas

^b base seca e isenta de cinzas

A cinza é um material complexo em cuja composição existem vários óxidos, conforme pode ser visto na tabela 2.7. Cinzas apresentam-se em quantidades mais significativa no carvão mineral do que na biomassa. Alguns carvões podem ter até 40% de conteúdo de cinza, que acarretam problemas de ignição. O conteúdo de cinza é definido como a razão entre a massa do resíduo da combustão e a massa original do sólido, normalmente é expressa em base seca. Segundo Ma (2006) a área superficial específica da cinza fica entorno de $5 \text{ m}^2/\text{g}$.

Outras características do carvão mineral e da biomassa são apresentadas na tabela 2.7. Observando-se as tabelas 1.4, 1.5, 1.6 e 1.7, nota-se que em comparação ao carvão mineral, à madeira apresenta baixo conteúdo de cinzas, tem menos carbono, mais oxigênio, menor poder calorífico, maior conteúdo de umidade e menor massa específica. Pode-se concluir que, em função de suas características, biomassa e carvão devem ser considerados combustíveis diferenciados (Hong Lu, 2006).

Tabela 2.7 - Propriedades físicas e químicas de carvão e biomassa (Dermirbas, 2004).

Propriedades	Carvão	Biomassa
Massa específica aparente	$\sim 1300 \text{ kg/m}^3$	$\sim 500 \text{ kg/m}^3$
Tamanho de partícula	$\sim 0,1 \text{ mm}$	$\sim 3,0 \text{ mm}$
Temperatura de ignição	(490-595)K	(418-426)K
Cinza	SiO ₂ (%peso, seco)	40-60
	K ₂ O(%peso, seco)	2-6
	Al ₂ O ₃ (%peso, seco)	15-25
	Fe ₂ O ₃ (%peso, seco)	8-18

3 – FORMULAÇÕES MATEMÁTICAS

A formulação do problema de combustão será descrita neste capítulo, incluindo as simplificações necessárias para tornar o problema numericamente tratável.

3.1 – HIPÓTESES DO MODELO MATEMÁTICO.

No presente trabalho, propõe-se resolver, numericamente, um conjunto de equações diferenciais de conservação, junto com outras auxiliares, como ferramenta que permita o estudo da queima de partículas de combustíveis sólidos carbônicos. Para tornar possível a solução numérica de um problema desta complexidade, algumas hipóteses simplificadoras se fazem necessárias, a saber:

1. O escoamento é laminar, reagente e acontece sob regime transiente em um meio conjugado, parte aberto (fluido adjacente à partícula) e parte poroso (interior da partícula). Admite-se variação de pressão e velocidade no meio poroso.
2. Apenas domínios bidimensionais serão considerados, portanto, no sistema de coordenadas cartesiano (x,y,z) os gradientes da direção z serão desprezados. O sistema de coordenadas cilíndrico (z,r,θ) também será utilizado e os gradientes na direção θ serão desprezados, assim casos axissimétricos também poderão ser simulados. A hipótese de gradiente nulo numa determinada direção é uma simplificação que deve ser tomada para reduzir o tempo de computação. Para minimizar os efeitos desta simplificação, as partículas serão posicionadas de modo que os menores gradientes, associados aos fenômenos em estudo, fiquem nesta direção. Um diferencial deste trabalho é que os domínios nos planos “ $x-y$ ” e “ $z-r$ ” poderão ter formas irregulares;
3. Transferências de calor e de massa também serão consideradas em todo o domínio conjugado. O transporte de gases voláteis e espécies oxidantes ocorrerão por difusão e convecção no meio aberto e no poroso. O fluxo de difusão de espécies será aproximado pela lei de Fick tanto no meio aberto quanto no meio poroso;
4. O meio sólido (partícula) será considerado poroso e rígido. Sua estrutura porosa será assumida homogênea, isotrópica, saturada de fluido e bimodal. Não será considerada a adsorção de gases na estrutura sólida porosa e nem qualquer efeito catalítico. Não será admitido qualquer tipo de movimento do meio poroso

em relação a um sistema de coordenadas global. Consequentemente rotação, translação e fragmentação do meio poroso não serão consideradas. Encolhimento e inchamento da partícula devido secagem ou pirólise também não serão contabilizados. Porém, a forma e o volume da partícula poderão se modificar em função das reações heterogêneas;

5. Considera-se que a massa específica aparente do sólido varia somente com a porosidade e com o conteúdo de umidade. Assumi-se também que o sólido é composto somente de material volátil (material sólido que pode volatilizar quando submetido a altas temperaturas), de carbono e de cinzas. As massas específicas intrínsecas dos materiais serão consideradas constantes durante toda a conversão de massa. A massa específica intrínseca do sólido será obtida a partir das massas específicas intrínsecas de material volátil, de carbono e de cinzas ponderadas por suas frações de volume;
6. A conversão de massa local levará em conta a secagem, a pirólise e a oxidação do resíduo carbônico e causará também aumento local da porosidade da partícula. A porosidade global será função da micro-porosidade e da macro-porosidade local. O processo de pirólise altera a macro-porosidade e a oxidação do coque altera a micro-porosidade. Todos estes processos serão calculados em função de propriedades locais no interior da partícula. O coque, resultante da pirólise, consistirá de carbono puro e sua estrutura porosa possuirá topologia similar a do combustível sólido precursor;
7. Não será considerada formação de fuligem;
8. Os gases voláteis e espécies oxidantes serão restritos a oito espécies: CH_4 , O_2 , C_6H_6 , H_2O , H_2 , CO , CO_2 e N_2 . O C_6H_6 representará o alcatrão e o CH_4 representará os hidrocarbonetos leves. O preenchimento do meio poroso por O_2+N_2 , ou de O_2+CO_2 , será considerado como condição inicial de todas as simulações. As proporções entre O_2 e N_2 , ou de O_2+CO_2 , serão definidas em cada caso simulado;
9. Serão consideradas reações heterogêneas e homogêneas dentro da partícula. Estas reações químicas serão consideradas através de mecanismos globais, de passo único ou de passos múltiplos, a ser indicado em cada caso simulado;
10. Uma das maiores simplificações assumidas no presente trabalho está relacionada ao cálculo do transporte de massa, calor e quantidade de movimento, que será posto como função única da porosidade total. Neste

aspecto o modelo não será bimodal, caso onde o transporte deveria ser posto diretamente como função da macro-porosidade e da micro-porosidade. O impacto da variação da macro-porosidade e da micro-porosidade será realizado via porosidade total, ou seja, assume-se que a porosidade total varia em função da macro-porosidade e da micro-porosidade, mas é focando apenas nesta porosidade total que o transporte de calor, massa e quantidade de movimento serão calculados;

11. A água, referenciada de umidade, será tratada como pertencente ao sólido, por isso a dinâmica do escoamento de água líquida e os gradientes de pressão devido à capilaridade serão desconsiderados. No entanto, após evaporação, a água gasosa terá mobilidade por difusão e convecção, como qualquer um dos componentes da mistura de gases no meio poroso. A secagem será calculada por uma taxa cinética;
12. As propriedades de transporte das espécies gasosas serão calculadas em função da temperatura e concentração local dos gases, com base em modelos da teoria cinética dos gases disponíveis na literatura. A equação de estado para gases ideais será utilizada para contabilizar a variação da massa específica com a temperatura e composição da mistura de gases.
13. As propriedades termofísicas do material sólido serão calculadas localmente em função da temperatura e grau de conversão do material sólido;
14. Não será considerado equilíbrio térmico entre a fase sólida e a gasosa. Logo, duas equações de conservação serão resolvidas, uma para o sólido e outra para o gás. Estas equações serão acopladas através de um termo apropriado;
15. O gás será considerado transparente, para que não seja necessário o cálculo de troca de calor por radiação, TCR, no meio fluido. Contudo, como a TCR é importante no meio poroso, especialmente na parte do coque onde o diâmetro dos poros e a temperatura são maiores, o seu efeito na equação de conservação da energia do meio sólido será contabilizado através de um aumento na condutividade térmica por uma condutividade radiativa. Tal aproximação, aplicável se o meio for opticamente espesso, é conhecida como “Aproximação de *Rosseland*” ou “Aproximação Difusa” (Bejan e Kraus, 2003);
16. O fluxo de calor entre o meio ambiente envolvente a partícula, assumido a uma temperatura T_{rad} , e o meio poroso, através da interface entre os meios, será

considerado através da lei de radiação de Stefan-Boltzmann, calculado na superfície que envolve a partícula.

Algumas das simplificações apresentadas serão justificadas no decorrer do trabalho e outras simplificações ainda serão assumidas e mencionadas na medida em que os modelos matemáticos forem sendo apresentados no decorrer do presente capítulo.

3.2 – MODELAGEM DO MEIO POROSO

Segundo Nield e Bejan (2006), um meio poroso pode ser definido como uma matriz sólida com vazios interconectados. A interconectividade dos vazios permite o escoamento de um ou mais fluidos pelo material. Se os vazios do meio poroso estão completamente preenchidos o meio poroso é chamado de saturado. Já se os vazios estão parcialmente preenchidos o meio poroso é chamado de não-saturado. Carvão e a biomassa são exemplos de meios porosos naturais.

3.2.1 – Média Volumétrica

A priori o estudo de fenômenos de transporte em meios porosos poderia ser realizado com as equações de conservação na escala microscópica dos poros. Porém, este estudo é praticamente impossível de ser conduzido, em muitas situações de interesse. A complexidade da matriz porosa dificulta o estabelecimento das condições de contorno. Além disso, a diferença entre as escalas dos poros e das partículas exigiria o uso de malhas numéricas muito refinadas. Pelas razões supracitadas é frequente o uso de procedimentos de média volumétrica na análise de escoamento de fluidos, transferência de calor e massa em meios porosos.

As equações de conservação da massa, de quantidade de movimento e da energia são deduzidas a partir da hipótese do contínuo. Deve-se atentar que a definição de contínuo está intimamente ligada à escala na qual os fenômenos se apresentam. Por isso o meio poroso pode ser tratado como contínuo se for escolhida uma escala apropriada. Após a escolha da escala e através de procedimentos de média, as equações microscópicas podem ser expressas em escala macroscópica. Classicamente o método da média volumétrica, apresentado em Whitaker (2005), é adotado na literatura. Neste método a escala macroscópica é definida pelo volume elementar representativo (VER). De acordo com

Whitaker (2005) o método de média volumétrica conduzirá a resultados independentes do tempo e da posição no meio poroso se o comprimento característico associado ao meio poroso, numa escala macroscópica, e um comprimento associado aos poros, numa escala microscópica, forem bem diferentes. A demonstração e a aplicação dos teoremas de média nas equações de conservação fogem ao escopo deste trabalho, por isso, para maiores detalhes sobre o método recomenda-se consultar Whitaker (2005).

A seguir são apresentadas as equações de conservação de quantidade de movimento, conservação da energia e conservação de espécies químicas, médias no volume, que serão utilizadas para a modelagem do caso de combustão. Por simplicidade e para facilitar a leitura das equações, a notação de média volumétrica foi omitida de todos os termos das equações.

3.3 – EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO MÉDIAS NO VOLUME

3.3.1 – Equações Médias de Conservação de Quantidade de Movimento e Conservação da Massa.

O primeiro modelo de escoamento em meios porosos foi proposto por Henry Darcy, baseado em observações experimentais de escoamentos em meios porosos homogêneos, isotrópicos e saturados de fluido (Nield e Bejan, 2006). Sob as condições de fluxo unidirecional e estacionário, Darcy verificou a proporcionalidade entre velocidade e gradiente de pressão, que em notação moderna é expressa como:

$$(\nabla p)_p = -\frac{\mu_g}{K} \mathbf{u} \quad (3.1)$$

A permeabilidade, K , independente das propriedades do fluido, portanto é uma característica intrínseca do meio. Este termo tem unidade de comprimento quadrado, ou unidade de Darcy ($0,987 \times 10^{-12} \text{ m}^2$). Na equação (3.1) a permeabilidade foi apresentada como um escalar, devido à consideração de isotropia do meio poroso, mas no caso de um meio anisotrópico ela é um tensor de segunda ordem.

Na equação (3.1) a velocidade \mathbf{u} , chamada de velocidade de Darcy, não é uma velocidade física, ao invés, é uma velocidade superficial baseada na seção transversal completa do meio, não só na seção transversal de fluxo do fluido. De acordo com Nield e

Bejan (2006) a velocidade de Darcy \mathbf{u} e a velocidade média intrínseca \mathbf{V} estão relacionadas através da relação de Dupuit-Forchheimer: $\mathbf{u} = \varepsilon \mathbf{V}$.

Conforme Nield e Bejan (2006) a aplicabilidade do modelo de Darcy é limitada a baixos números de Reynolds, por contabilizar apenas a resistência viscosa do escoamento. Quando o número de Reynolds associado ao escoamento é maior que a unidade as contribuições inerciais para a resistência do escoamento tornam-se importantes. Muitos autores contabilizam os efeitos inerciais através da equação de Darcy-Forchheimer, dada por (Forchheimer, 1901, apud Nield & Bejan, 2006):

$$(\nabla p)_p = -\frac{\mu_g}{K} \mathbf{u} - C_F \frac{\rho}{\sqrt{K}} \frac{|\mathbf{u}| \mathbf{u}}{\varepsilon^{3/2}} \quad (3.2)$$

Onde: $|\mathbf{u}| = \sqrt{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}$ denota a magnitude da velocidade de Darcy e C_F é o coeficiente de Forchheimer, geralmente obtido de maneira semi-empírica.

Segundo Webb (2006), para lidar com os efeitos da alta porosidade e viscosidade, Brinkman introduziu uma extensão ao modelo de Darcy que inclui um termo viscoso de segunda ordem com uma viscosidade equivalente para o meio poroso. Com omissão do termo inercial a extensão viscosa pode ser escrita como:

$$(\nabla p)_p = -\frac{\mu_g}{K} \mathbf{u} + \mu_e \nabla^2 \mathbf{u} \quad (3.3)$$

Dois termos viscosos estão presentes na equação (3.3), o primeiro é o termo de Darcy e o segundo é análogo ao termo laplaciano que aparece nas equações de Navier-Stokes. O coeficiente μ_e é uma viscosidade efetiva para o meio poroso. A equação de conservação de quantidade de movimento com a extensão de Brinkman geralmente é empregada na interface entre um meio poroso e um meio aberto para obtenção da continuidade da tensão de cisalhamento e para contabilizar a condição de não deslizamento existente em paredes confinadas (Webb, 2006). Quando se trabalha com domínios conjugados, onde parte do domínio é aberto (livre ou desobstruído) e parte é poroso e saturado de fluido, é bastante frequente o uso do termo de Brinkman nas equações de conservação de quantidade de movimento, pois desta forma as equações de conservação do domínio poroso tem mesma ordem das equações de conservação do domínio aberto e

assim pode-se ter um conjunto equações que pode ser utilizado simultaneamente em todo o domínio (Costa *et al.*, 2004).

Conforme Whitaker (2006), a partir da aplicação de um procedimento de média volumétrica formal as equações de Navier-Stokes e considerando escoamento incompressível e fluido Newtoniano as equações de conservação de quantidade de movimento e da massa podem ser escritas como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) = \varepsilon \sum_{k=1}^{Nsp} \dot{\omega}_{s,k} \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho\mathbf{u}}{\varepsilon} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\rho\mathbf{u}\mathbf{u}}{\varepsilon^2} \right) = -\nabla p + \rho\mathbf{g} + \nabla \cdot \left(\frac{\mu_e \nabla \mathbf{u}}{\varepsilon} \right) + (\nabla p)_p \quad (3.5)$$

$$(\nabla p)_p = -\frac{\mu_g}{K} \mathbf{u} - C_F \frac{\rho}{\sqrt{K}} \frac{|\mathbf{u}| \mathbf{u}}{\varepsilon^{3/2}} \quad (3.6)$$

Onde: o termo $\sum_{k=1}^{Nsp} \dot{\omega}_{s,k}$ representa fonte de massa devido à degradação do meio sólido.

O termo inercial, no lado esquerdo da equação (3.5), e a equação da conservação da massa resultam de média formal. Do procedimento de média volumétrica surgem termos na equação de conservação de quantidade de movimento que representam a força de arrasto média por unidade de volume exercida pela fase sólida, composta pelo arrasto viscoso, arrasto inercial e arrasto de forma (pressão). Normalmente estes efeitos são modelados com base nas equações (3.1), (3.2) e (3.3), já comentadas. O primeiro termo viscoso na equação (3.5) é o termo de Brinkman e o último termo é o de Darcy-Forchheimer, introduzidos na equação (3.5) para modelar os efeitos microscópicos do meio poroso no campo de escoamento (macroscópico).

As equações (3.4) e (3.5) também são conhecidas de equações de Brinkman-Forchheimer (Costa *et al.*, 2004). Tais equações são aplicáveis a escoamento através de um meio poroso que tende ao sólido na medida em que a porosidade tende a zero.

3.3.2 – Equação Média de Conservação da Energia Para as Fases Sólida e Gasosa.

Na modelagem da combustão em meios porosos é aconselhável solucionar duas equações da energia, uma a fase gasosa e outra para a fase sólida, visto que as reações homogêneas acontecem no meio gasoso com a energia química liberada transferida por convecção para a matriz sólida (Viskanta, 2005). Essas duas equações de conservação de

energia são acopladas através de um coeficiente de transferência de calor convectivo que contabiliza a transferência de calor entre as fases.

Como simplificação para derivação das equações de conservação de energia no meio poroso a radiação da fase gasosa é desprezada em comparação com a radiação da fase sólida. Além disso, os termos relacionados à dissipação viscosa e trabalho de pressão também são desprezados.

A difusividade térmica, $\alpha_g = k_g / \rho c_{p,g}$, pode necessitar de uma correção devido à dispersão induzida pelo meio poroso. A dispersão térmica para escoamento laminar é proporcional ao número de Peclet, $D_{xx}^d \propto Pe^2$, onde $Pe = \mathbf{u}d_p / \alpha_g$. Assim, a dispersão de calor só é importante para $Pe > 1$, o que não ocorre nos estudos que serão aqui conduzidos, já que o tamanho dos grandes poros é da ordem de 10^{-5} m, e as maiores velocidades verificadas no interior de uma partícula em combustão também são modestas, da ordem de 10^{-2} m. Para temperatura de 1050 K $\alpha_g \approx 10^{-4}$ m²/s, o que resulta em $Pe \approx 10^{-3}$. Assim, D_{xx}^d é pequeno em comparação a α_g , por isso pode ser desprezado.

Com base no exposto, para um meio poroso isotrópico, homogêneo e saturado de fluido, as equações de conservação da energia médias no volume para o gás e para matriz sólida são dadas respectivamente por (Viskanta, 2005):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \rho T_g) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} T_g) = \nabla \cdot \left(\varepsilon \frac{k_g}{c_{p,g}} \nabla T_g \right) + \frac{S_g^T}{c_{p,g}} \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [(1 - \varepsilon) \rho_s T_s] = \nabla \cdot \left[(1 - \varepsilon) \frac{k_s}{c_{p,s}} \nabla (T_s) \right] + \frac{S_s^T}{c_{p,s}} \quad (3.8)$$

Onde: $S_g^T = -\varepsilon \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^{N_{sp}} h_k \rho D_{k,eff} \nabla Y_k \right) - \varepsilon \sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_{g,k} h_k - h S_t (T_s - T_g)$

$$S_s^T = S_{TS} + Q_{rad} - h S_t (T_g - T_s)$$

Os subscritos s e g se referem às fases sólida e gasosa, respectivamente.

A equação (3.7) está na forma da equação de energia para sistemas multicomponentes. O primeiro termo desta equação representa a acumulação e o segundo representa convecção de energia; o primeiro termo depois do sinal de igualdade contabiliza

a transferência de energia devido à difusão. O termo $\nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^{N_{sp}} h_k \rho D_{k,eff} \nabla Y_k \right)$ contabiliza o transporte de entalpia devido à difusão de espécies, que pode ter um efeito significativo no campo de entalpia quando o número de Lewis, $Le_k = k_{g,k} / (\rho c_{p,k} D_{km})$, para qualquer espécie se afasta da unidade. O termo $\sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_{g,k} h_k$ é o de geração de calor devido às reações químicas (homogêneas). O termo $h S_t (T_s - T_g)$ é responsável pela transferência de calor entre as fases e S_t é a área superficial específica de troca de calor.

Com relação à equação de conservação da energia da fase sólida, o primeiro termo da equação representa a acumulação de energia e o segundo responde pela difusão de calor. O termo $h S_t (T_g - T_s)$ é o de acoplamento com a fase gasosa. De acordo com Bird *et al.* (2002), para baixos Re, o h pode ser calculado a partir do Nu como:

$$Nu = \frac{h d_{p,Re}}{k_g (1 - \varepsilon) \psi} = 2,19 (Re Pr)^{1/3},$$

onde; $Re = \frac{\rho_g u_{darcy} d_{p,Re}}{(1 - \varepsilon) \mu \psi}$ e $d_{p,Re} = \frac{6(1 - \varepsilon)}{S_t}$, ψ é um fator de forma, k_g é a condutividade térmica do gás e S_t é a área superficial específica de troca de calor.

O termo Q_{rad} representa potência radiativa trocada entre o meio ambiente, assumido a uma temperatura de referencia T_{rad} , e o meio poroso. Esta troca se dá através da interface entre os meios, por isso só fornece potência para os nós localizados nesta posição, e considera-se que pode ser modelada pela lei de radiação de Stefan-Boltzmann:

$$Q_{rad} = A_{sup} \sigma \varepsilon_{rad} (T_{rad}^4 - T_s^4), \quad (3.9)$$

onde A_{sup} é a área superficial que envolve a partícula (m^2) e os parâmetros σ e ε_{rad} são a constante de Stefan-Boltzmann ($W/m^2 K^4$) e emissividade radiativa da partícula, respectivamente.

O termo S_{TS} , em S_s^T , representa a fonte de calor devido secagem, pirólise e reações heterogêneas do resíduo carbônico.

$$S_{TS} = \dot{\omega}_{sec} H_{sec\ agem} + \dot{\omega}_m H_{pirólise} + \sum_{i=1}^{N_{RT}} \dot{\omega}_i H_i, \quad (3.10)$$

Onde; $\dot{\omega}_{sec}$, $\dot{\omega}_m$ $\dot{\omega}_i$ representam as taxas de conversão de massa devido à secagem, à pirólise e às reações heterogêneas, respectivamente, em $\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$. $H_{sec\ agem}$ é o calor latente de vaporização da água, $H_{pirólise}$ é o calor de reação devido à pirólise e H_i é calor de reação devido às reações heterogêneas.

É importante notar que nas equações (3.7) e (3.8) também foi assumido que a porosidade da superfície era igual à porosidade do meio sólido, consideração importante para derivação dos termos associados a fluxo de calor (Nield & Bejan, 2006).

3.3.3 – Equação Média de Conservação de Espécies

Para um sistema monofásico multicomponente a equação média volumétrica de conservação de espécies, de acordo com Viskanta (2005), é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k) = \nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{J}_k) + \varepsilon \dot{\omega}_{g,k}, \quad k = 1, 2, \dots, N_{sp} - 1, \quad (3.11)$$

onde o termo $\dot{\omega}_{g,k}$ é a taxa líquida de produção da espécie k pela reação química.

Uma equação de conservação será resolvida para $N_{sp} - 1$ espécies, onde N_{sp} é o número total de espécies químicas gasosas presentes no sistema. Desde que a soma das frações de massa das espécies deve ser unitária, a N-ésima fração de massa é determinada como $Y_N = 1 - \sum_{k=1}^{N_{sp}-1} Y_k$. Além disso, a lei de Fick será utilizada na aproximação do fluxo de difusão de espécies, $\mathbf{J}_k = -\rho D_{k,eff} \nabla Y_k$, por conta disto o fluxo da N-ésima espécie será calculado em função dos fluxos das demais espécies, $\mathbf{J}_N = -\sum_{k=1}^{N_{sp}-1} \mathbf{J}_k$, uma vez que a soma dos fluxos para todas as espécies deve ser nula, $\sum_{k=1}^{N_{sp}} \mathbf{J}_k = 0$. Para minimizar o erro numérico no cálculo dos fluxos, a N-ésima espécie será aquela com a maior fração de massa global, como N_2 quando o oxidante é ar.

Deve-se observar que na equação (3.11) que o efeito de Soret, fluxo de massa produzido por gradientes de temperatura, foi desprezado. Essa simplificação foi adotada porque a difusão térmica só é importante para espécies leves (H, H₂, He) e em baixas temperaturas (Warnatz *et al.*, 2009). A dispersão de espécies induzida pelo meio poroso também foi desprezada na equação (3.11), a exemplo do que foi feito na equação da energia, pois $D_{km} \approx \alpha_g$ e $Pe_m \approx Pe$ o que resulta em $D_{lm}^d \approx D_{xx}^d$. Assim D_{lm}^d é pequeno em comparação a D_{km} , e seu efeito pode ser desprezado.

3.4 – MECANISMOS DE REAÇÃO QUÍMICA

Espécies químicas

Durante a pirólise uma grande quantidade de espécies é formada. A mistura de gases de pirólise de biomassa consiste principalmente de CO, CO₂, H₂O, H₂, hidrocarbonetos leves e pesados (Thunman *et al.*, 2001). Segundo Thunman (2004) hidrocarbonetos leves são definidos como hidrocarbonetos não condensáveis em temperatura ambiente. São principalmente metano e etileno, com aproximadamente três vezes mais metano do que etileno, podendo ser aproximado como C_{1,15}H₄, com poder calorífico de 49,4 MJ/kg. Os hidrocarbonetos pesados, chamados de alcatrão, são aqueles componentes que condensam em temperatura ambiente. Num ambiente de combustão são quebrados termicamente para o hidrocarboneto mais estável, como benzeno, naftaleno e tolueno. O alcatrão pode ser aproximado como C₆H_{6,2}O_{0,2}.

Bradley *et al.* (2006), baseados em pesquisas bastante completas sobre voláteis primários de carvão mineral, relatam que as espécies alcatrão, CH₄, H₂, CO, CO₂ e H₂O estão presentes em quantidade significativas.

Assim, com base nos trabalhos de Thunman *et al.* (2001) e Bradley *et al.* (2006), constata-se que as espécies CO, CO₂, H₂O, H₂ são comuns a carvão e biomassa. Através da tabela 3.1 é possível ter uma ideia da representação dada ao gás leve e ao alcatrão em alguns trabalhos selecionados, que investigaram combustão de carvão ou biomassa. Com exceção de Fortsch *et al.* (1998) e Han *et al.* (2003), todos os trabalhos representaram o hidrocarboneto leve como CH₄. A informação dada anteriormente por Thunman (2004) dá suporte à escolha de CH₄ como hidrocarboneto leve. Com relação ao alcatrão, duas representações são comuns: C_xH_y ou C_xH_yO_z. Se for assumido o alcatrão na forma C_xH_yO_z,

a determinação de x, y e z geralmente é realizada com base em relações de H/C e O/C medidas experimentalmente. De forma mais simples o alcatrão pode ser assumido como benzeno, C₆H₆ (Veras, 1997) e é esta a aproximação que será utilizada no presente trabalho. A principal motivação para representação do alcatrão pelo benzeno é a disponibilidade de propriedades de transporte e termo-físicas na literatura, imprescindíveis para uso nas simulações numéricas.

Tabela 3.1 - Representação usual dos hidrocarbonetos leves e alcatrão.

Trabalhos de referência	Hidrocarboneto Leve	Alcatrão	combustível
Liu e Gibbs (2002)	CH ₄ e C ₂ H ₆	-	biomassa
Klason e Bai (2007)	CH ₄	C _x H _y	biomassa
Thunman <i>et al.</i> (2002)	CH ₄ e C ₂ H ₄	C _x H _y O _z	biomassa
Han <i>et al.</i> (2003)	C ₂ H ₄	C _x H _y O _z	carvão
Fortsch <i>et al.</i> (1998)	C ₂ H ₄	C _x H _y O _z	carvão
Bradley <i>et al.</i> (2006)	CH ₄	-	carvão
Veras (1997)	CH ₄	C ₆ H ₆	carvão
Yang <i>et al.</i> (1998)	CH ₄	C _x H _y	carvão
Heikkinen (2005)	CH ₄	C _x H _y O _z	carvão/biomassa
Mussara <i>et al.</i> (1986)*	CH ₄	C ₆ H ₆	carvão
Wendt <i>et al.</i> (2002)	CH ₄	C _x H _y	carvão

*Citado por Veras (1997).

Com base no exposto, as espécies CO, CO₂, H₂O, H₂, CH₄ e C₆H₆ (alcatrão) serão utilizadas para representar as espécies provenientes da pirólise e oxidação do resíduo carbônico da biomassa e do carvão. O gás oxidante será representado por uma mistura de O₂ e N₂, ou O₂ e CO₂, em proporções a serem definidas nas simulações.

Uma vez que já foram definidas as espécies químicas, os correspondentes mecanismos de reação podem ser especificados.

3.4.1 – Mecanismos de Reações Homogêneas

Durante a combustão, combustível e oxidante reagem para formar os produtos da combustão. Os produtos não são frequentemente formados em uma simples reação química. Segundo Turns (2000), mecanismos completos de reação devem descrever a dinâmica em que ligações químicas são quebradas ou formadas e em que ordem. Tais mecanismos podem ter várias dezenas de reações elementares. A solução das equações que

governam um mecanismo pode fornecer as concentrações dos produtos, perfis de temperatura e calor liberado.

O emprego de um mecanismo de reação completo pode tornar a tarefa de simulação impraticável do ponto de vista computacional, uma vez que para cada espécie química considerada deve-se resolver uma equação de conservação (ou de transporte). Por causa disto é frequente o uso de mecanismos globais. Neste caso a redução no esforço de computação se dá principalmente devido a redução do número de espécies envolvidas (Ha *et al.*, 1998). Em um mecanismo global, para aproximar a combustão, é comum assumir que os reagentes são convertidos nos produtos finais em um passo único irreversível, como posto a seguir:



Onde: α , β e γ são coeficientes estequiométricos.

A expressão de taxa global associada ao mecanismo (3.37) é escrita como:

$$\hat{R}_{\text{comb}} = d[\text{Comb.}]/dt = -AT^n p^m \exp(-E/(R_u T_g)) [\text{Comb.}]^a [\text{O}_2]^b \quad (3.13)$$

Para faixas restritas de temperatura e pressão pode-se assumir que $n = m = 0$, com isso, a partir de dados experimentais o fator pré-exponencial pode ser determinado para uma determinada energia de ativação. Em um mecanismo global os valores de “a” e “b” não estão relacionados a coeficientes estequiométricos, são constantes empíricas calculadas para reproduzir valores de velocidade de chama e limites de inflamabilidade observados experimentalmente (Westbrook & Dryer, 1984).

Nas simulações que utilizam mecanismos globais de passo único, as temperaturas preditas podem ser maiores que da chama adiabática, pois a oxidação do combustível resulta diretamente em CO_2 e H_2O (Borman e Ragland, 1998). Esta é a maior deficiência da reação global (3.13), pois em chamas de hidrocarbonetos grandes quantidades de CO e H_2 podem existir em equilíbrio com CO_2 e H_2O , além disso, a oxidação do CO é a mais lenta do processo (Law, 2006).

Para melhorar a qualidade dos resultados, a oxidação do combustível pode ser considerada em duas ou mais etapas, como proposto por Dryer e Glassman (1973). Com esta medida as temperaturas previstas são mais realistas.

Como base no exposto, neste trabalho, para oxidação de CH_4 e C_6H_6 os mecanismos globais de reação R1 e R2, respectivamente, dados na tabela 3.2 serão utilizados. As constantes de taxa para estes mecanismos serão tomados de Westbrook e Dryer (1984). Uma reação para conversão de CO e sua reversa serão consideradas, calculadas pelas reações R3 e R4, respectivamente. Deve-se notar que a taxa de oxidação de CO tem uma dependência com $[H_2O]$. Segundo Flagan e Seinfeld (1988) a inclusão de $[H_2O]$ na expressão de taxa pode ser explicada porque a maioria do CO é consumida por OH que, como primeira aproximação, pode ser assumido em equilíbrio com H_2O . A última reação considerada é a de oxidação de hidrogênio, reação R5. Os mecanismos globais apresentados na tabela 3.2 serão utilizados na descrição da combustão de biomassa e carvão no presente trabalho.

Tabela 3.2 – Mecanismos globais para as reações homogêneas.

Reação	Combustível	Expressão de Taxa
R1	$CH_4 + \frac{1}{2}O_2 \longrightarrow CO + 2H_2$	$\hat{R}_{CH_4} = -A_{CH_4} \exp(-E_{CH_4}/R_u T_g) [CH_4]^{0,3} [O_2]^{1,3}$
R2	$C_6H_6 + \frac{6}{2}O_2 \longrightarrow 6CO + \frac{6}{2}H_2$	$\hat{R}_{C_6H_6} = -A_{C_6H_6} \exp(-E_{C_6H_6}/R_u T_g) [C_6H_6]^{0,1} [O_2]^{1,85}$
R3	$CO + \frac{1}{2}O_2 \longrightarrow CO_2$	$\hat{R}_{CO} = -A_{CO} \exp(-E_{CO}/R_u T_g) [CO]^{0,00} [O_2]^{0,25} [H_2O]^{0,50}$
R4	$CO_2 \longrightarrow CO + \frac{1}{2}O_2$	$\hat{R}_{CO_2} = -A_{CO_2} \exp(-E_{CO_2}/R_u T_g) [CO_2]^{1,00}$
R5	$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \longrightarrow H_2O$	$\hat{R}_{H_2} = -A_{H_2} \exp(-E_{H_2}/R_u T_g) [H_2] [O_2]$

Tabela 3.3 – Constantes para as reações apresentadas na tabela 3.2.

Parâmetros das constantes de taxa		Referência
$A_{CH_4} = 4,00 \times 10^9 \text{ (kmol m}^{-3}\text{)}^0 \text{ s}^{-1}$	$E_{CH_4}/R_u = 24,40 \times 10^3 \text{ (K)}$	Westbrook e Dryer (1984)
$A_{C_6H_6} = 2,30 \times 10^9 \text{ (kmol m}^{-3}\text{)}^{-0,75} \text{ s}^{-1}$	$E_{C_6H_6}/R_u = 15,00 \times 10^3 \text{ (K)}$	
$A_{CO} = 2,24 \times 10^{12} \text{ (kmol m}^{-3}\text{)}^{0,25} \text{ s}^{-1}$	$E_{CO}/R_u = 20,13 \times 10^3 \text{ (K)}$	
$A_{CO_2} = 5,00 \times 10^8 \text{ (kmol m}^{-3}\text{)}^0 \text{ s}^{-1}$	$E_{CO_2}/R_u = 20,13 \times 10^3 \text{ (K)}$	
$A_{H_2} = 9,87 \times 10^8 \text{ (kmol m}^{-3}\text{)}^{-1} \text{ s}^{-1}$	$E_{H_2}/R_u = 37,28 \times 10^2 \text{ (K)}$	

As taxas líquidas de geração, ou destruição, das espécies CH_4 , C_6H_6 , O_2 , CO_2 , CO , H_2O e H_2 , dadas respectivamente por $\dot{\omega}_{g,CH_4}$, $\dot{\omega}_{g,C_6H_6}$, $\dot{\omega}_{g,O_2}$, $\dot{\omega}_{g,CO_2}$, $\dot{\omega}_{g,CO}$, $\dot{\omega}_{g,H_2O}$ e $\dot{\omega}_{g,H_2}$,

são apresentadas na tabela 3.4. O parâmetro $\nu_{ESP,R}$ nas expressões representa os coeficientes estequiométricos, no qual “ESP” indica espécie e “R” indica a reação.

O termo de fonte de reação química para a equação da energia será calculado em função do calor de combustão das reações R1-R5, $\sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_{g,k} h_k = -\sum_{i=1}^{N_{RT}} \Delta \bar{h}_i \hat{R}_i$. Estes $\Delta \bar{h}_i$ são os calores de combustão obtidos das entalpias de formação $\bar{h}_{g,k}^{0,298}$ das espécies envolvidas nas reações, como pode ser verificado na tabela 3.5.

Tabela 3.4 – Taxa líquida de reação de espécies para as reações R1-R5 em $\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$.

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_{g,CH_4} &= +(\hat{R}_{CH_4} \nu_{CH_4,R1}) W_{g,CH_4} \\ \dot{\omega}_{g,C_6H_6} &= +(\hat{R}_{C_6H_6} \nu_{C_6H_6,R2}) W_{g,C_6H_6} \\ \dot{\omega}_{g,O_2} &= +(\hat{R}_{C_6H_6} \nu_{O_2,R2} + \hat{R}_{CH_4} \nu_{O_2,R1} + \hat{R}_{CO} \nu_{O_2,R3} + \hat{R}_{H_2} \nu_{O_2,R5}) W_{g,O_2} - (\hat{R}_{CO_2} \nu_{O_2,R4}) W_{g,O_2} \\ \dot{\omega}_{g,CO_2} &= +(\hat{R}_{CO_2} \nu_{CO_2,R4}) W_{g,CO_2} - (\hat{R}_{CO} \nu_{CO_2,R3}) W_{g,CO_2} \\ \dot{\omega}_{g,CO} &= +(\hat{R}_{CO} \nu_{CO,R3}) W_{g,CO} - (\hat{R}_{C_6H_6} \nu_{CO,R2} + \hat{R}_{CH_4} \nu_{CO,R1} + \hat{R}_{CO_2} \nu_{CO,R4}) W_{g,CO} \\ \dot{\omega}_{g,H_2O} &= -(\hat{R}_{H_2} \nu_{H_2O,R5}) W_{g,H_2O} \\ \dot{\omega}_{g,H_2} &= +(\hat{R}_{H_2} \nu_{H_2,R5}) W_{g,H_2} - (\hat{R}_{CH_4} \nu_{H_2,R1} M_{H_2} + \hat{R}_{C_6H_6} \nu_{H_2,R2}) W_{g,H_2} \end{aligned}$$

Tabela 3.5 – Calor de combustão, em J kmol^{-1} , para as reações R1-R5.

$$\begin{aligned} \Delta \bar{h}_1 &= (\nu_{CH_4,R1} \bar{h}_{g,CH_4}^{0,298} + \nu_{O_2,R1} \bar{h}_{g,O_2}^{0,298}) - (\nu_{CO,R1} \bar{h}_{g,CO}^{0,298} + \nu_{H_2,R1} \bar{h}_{g,H_2}^{0,298}) \\ \Delta \bar{h}_2 &= (\nu_{C_6H_6,R2} \bar{h}_{g,C_6H_6}^{0,298} + \nu_{O_2,R2} \bar{h}_{g,O_2}^{0,298}) - (\nu_{CO,R2} \bar{h}_{g,CO}^{0,298} + \nu_{H_2,R2} \bar{h}_{g,H_2}^{0,298}) \\ \Delta \bar{h}_3 &= (\nu_{CO,R3} \bar{h}_{g,CO}^{0,298} + \nu_{CO_2,R3} \bar{h}_{g,CO_2}^{0,298}) - (\nu_{O_2,R3} \bar{h}_{g,O_2}^{0,298}) \\ \Delta \bar{h}_4 &= (\nu_{CO_2,R4} \bar{h}_{g,CO_2}^{0,298}) - (\nu_{CO,R4} \bar{h}_{g,CO}^{0,298} + \nu_{O_2,R4} \bar{h}_{g,O_2}^{0,298}) \\ \Delta \bar{h}_5 &= (\nu_{H_2,R5} \bar{h}_{g,H_2}^{0,298} + \nu_{O_2,R5} \bar{h}_{g,O_2}^{0,298}) - (\nu_{H_2O,R5} \bar{h}_{g,H_2O}^{0,298}) \end{aligned}$$

3.4.2 – Mecanismos de Reações heterogêneas

Segundo Turns (2002) uma reação heterogênea é aquela que envolve espécies químicas em diferentes estados físicos. A reação de oxidação de madeira ou carvão são exemplos de reações heterogêneas. Na fase de pirólise a partícula emite gases combustíveis que reagem com oxigênio na fase gasosa (reações homogêneas). Especificamente, na queima de carvão e biomassa, reações heterogêneas ocorrem entre gases reagentes (oxidação ou gaseificação) e espécies químicas da fase condensada. Sendo o carbono a espécie majoritária, as reações desta natureza se restringem a este composto, independente do reagente da fase gasosa.

Em sólidos porosos, onde a área interna definida pelos canais geralmente é muito maior que sua superfície externa, gases reagentes podem fluir e reagir no interior destes canais (Cremasco, 2002). As reações heterogêneas são eminentemente reações de superfície, por isso são normalmente expressas em $\text{kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$.

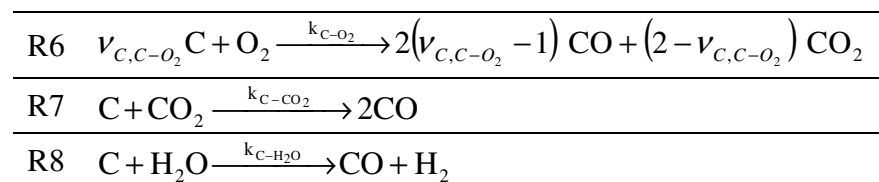
Os produtos principais das reações heterogêneas do carbono com O_2 são CO e CO_2 , cuja estequiometria pode ser representada pela reação exotérmica R6 apresentada na tabela 3.6. Nesta reação CO e CO_2 são reconhecidos como produtos primários. Para o carvão a razão de produto CO/CO_2 , nomeada de η , será correlacionada através da relação de Tognotti *et al.* (1990): $\eta = 70e^{-3070/T_s}$. Já para a madeira será assumido $\eta = 4,3e^{-3390/T_s}$, valor tomado de Thunman *et al.* (2002).

De η pode-se calcular o coeficiente estequiométrico do carbono: $\nu_{C,C-O_2} = 2\left(\frac{\eta+1}{\eta+2}\right)$, e deste coeficiente pode-se inferir que quanto maior a temperatura maior a produção de CO em relação CO_2 , de tal forma que para temperaturas elevadas CO é o produto principal. Em contrapartida, para temperaturas moderadas CO_2 torna-se o produto principal.

No interior de uma partícula em combustão além das reações já descritas também ocorrem reações heterogêneas do carbono com CO_2 e H_2O , referenciadas de (R7) e (R8), respectivamente, na tabela 3.6. Tais reações são endotérmicas e chamadas na literatura de reações de gaseificação. Estas reações são muito mais lentas que a reação C- O_2 , por isso só devem contribuir de maneira significativa para o consumo de carbono em atmosferas de baixo teor de oxigênio.

Os mecanismos globais apresentados na tabela 3.6 serão utilizados na descrição da combustão de biomassa e carvão no presente trabalho. Com estes mecanismos espera-se ter uma visão aproximada dos fenômenos associados à combustão para faixas de pressão e temperatura de interesse prático, uma vez que tais mecanismos de reação são incapazes de descrever rigorosamente as reações fundamentais de oxidação/gaseificação.

Tabela 3.6 - Mecanismos Globais de Reação Heterogênea.



As expressões de taxa intrínseca das reações da tabela 3.6 são apresentadas nas tabelas 2.7 e 2.8. A taxa líquida de consumo do resíduo carbônico e os termos de fonte para

as reações homogêneas de O₂, CO, CO₂, H₂O e H₂ são dados, respectivamente, por $\dot{\omega}_\mu$, $\dot{\omega}_{O_2}$, $\dot{\omega}_{CO}$, $\dot{\omega}_{CO_2}$, $\dot{\omega}_{H_2O}$ e $\dot{\omega}_{H_2}$. Estas taxas são apresentadas na tabela 3.9. O parâmetro $\nu_{ESP,R}$ representa os coeficientes estequiométricos, no qual “ESP” indica espécie e “R” indica as reações C-O₂, C-CO₂ e C-H₂O. O parâmetro S representa a área superficial reativa do resíduo carbônico por unidade de volume, m^2m^{-3} .

Tabela 3.7 - Taxas das reações heterogêneas para carvão ($kmol\ m^{-2}s^{-1}$).

Expressão de taxa intrínseca ($m\ s^{-1}$)×concentração ($kmol\ m^{-3}$)	Fonte
$\hat{R}_{C-O_2} = k_{C-O_2} C_{O_2} = 1046 \times 10^2 T_s e^{-21578/T_s} C_{O_2}$	Smith (1978)
$\hat{R}_{C-CO_2} = k_{C-CO_2} C_{CO_2}^{0.5} = 8593 \times 10^{-4} T_s^{0.5} e^{-25376/T_s} C_{CO_2}^{0.5}$	Robert e Harris (2000)
$\hat{R}_{C-H_2O} = k_{C-H_2O} C_{H_2O}^{0.5} = 8593 \times 10^{-3} T_s^{0.5} e^{-27781/T_s} C_{H_2O}^{0.5}$	Robert e Harris (2000)

Tabela 3.8- Taxas das reações heterogêneas para madeira ($kmol\ m^{-2}s^{-1}$).

Expressão de taxa intrínseca ($m\ s^{-1}$)×concentração ($kmol\ m^{-3}$)	Fonte
$\hat{R}_{C-O_2} = k_{C-O_2} C_{O_2} = 1,715 T_s e^{-9000/T_s} C_{O_2}$	Thunman et al. (2002)
$\hat{R}_{C-CO_2} = k_{C-CO_2} C_{CO_2} = 3,42 T_s e^{-15600/T_s} C_{CO_2}$	
$\hat{R}_{C-H_2O} = k_{C-H_2O} C_{H_2O}^{0.5} = 3,42 T_s e^{-15600/T_s} C_{H_2O}^{0.5}$	

Tabela 3.9 – Taxa líquida de reação para as reações heterogêneas ($kg\ m^{-3}s^{-1}$).

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_\mu &= -(\nu_{C,C-O_2} \hat{R}_{C-O_2} + \nu_{C,C-CO_2} \hat{R}_{C-CO_2} + \nu_{C,C-H_2O} \hat{R}_{C-H_2O}) W_{s,c} S \\ \dot{\omega}_{s,O_2} &= -(\nu_{O_2,C-O_2} \hat{R}_{C-O_2}) W_{g,O_2} S \\ \dot{\omega}_{s,CO} &= +(\nu_{CO,C-O_2} \hat{R}_{C-O_2} + \nu_{CO,C-CO_2} \hat{R}_{C-CO_2} + \nu_{CO,C-H_2O} \hat{R}_{C-H_2O}) W_{g,CO} S \\ \dot{\omega}_{s,CO_2} &= +(\nu_{CO_2,C-O_2} \hat{R}_{C-O_2} - \nu_{CO_2,C-CO_2} \hat{R}_{C-CO_2}) W_{g,CO_2} S \\ \dot{\omega}_{s,H_2O} &= -(\nu_{H_2O,C-H_2O} \hat{R}_{C-H_2O}) W_{g,H_2O} S \\ \dot{\omega}_{s,H_2} &= +(\nu_{H_2,C-H_2O} \hat{R}_{C-H_2O}) W_{g,H_2} S \end{aligned}$$

As reações de superfície também consomem ou produzem energia. O balanço de calor de reação para reação R1 e os calores de reação das reações R2 e R3 são dados na tabela 3.10.

Tabela 3.10 - Calor de reação para as reações C-O₂, C-CO₂ e C-H₂O.

Reação	Calor de reação	Referência
C-O ₂	$\Delta H_{C-O_2} = \frac{2(v_{C,C-O_2} - 1)}{v_{C,C-O_2}} \Delta H_{CO} + \frac{2 - v_{C,C-O_2}}{v_{C,C-O_2}} \Delta H_{CO_2}$	Borman e Ragland (1998)
	$\Delta H_{CO} = +9,2 \text{ MJ/kg C}$	
	$\Delta H_{CO_2} = +32,8 \text{ MJ/kg C}$	
C-CO ₂	$\Delta H_{C-CO_2} = -14,4 \text{ MJ/kg C}$	
C-H ₂ O	$\Delta H_{C-H_2O} = -10,9 \text{ MJ/kg C}$	

3.5 – MODELOS DE SECAGEM E PIRÓLISE.

Secagem

Considerando o exposto na revisão bibliográfica o modelo de secagem de taxa cinética será utilizado no presente trabalho. Os parâmetros do modelo são tomados de Bryden e Hagge (2003), ver tabela 3.11.

Tabela 3.11 - Modelo de secagem.

<p>Umidade $\xrightarrow{k_{\text{sec}}}$ Vapor d'água</p> <p>$\dot{\omega}_{\text{sec}} = 0, \quad T_s < 95^\circ \text{C}$</p> <p>$\dot{\omega}_{\text{sec}} = k_{\text{sec}} \rho_M, \quad T_s > 95^\circ \text{C}$</p> <p>$k_{\text{sec}} = 5,13 \times 10^{10} \exp[-88000/(R_u T_s)], \quad H_{\text{sec}} = -2,44 \text{ MJ kg}^{-1}$</p>
--

Na tabela 3.11 $\dot{\omega}_{\text{sec}}$ representa a taxa de evaporação de água, dada em $\text{kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$, e o parâmetro H_{sec} é a entalpia de vaporização da água.

Pirólise

Dois tipos de modelos serão considerados para modelar a taxa de degradação térmica do sólido. O modelo de taxa cinética única e o modelo de superposição dos constituintes da biomassa. Os dois modelos e as suas constantes de taxa são apresentados na tabela 3.12. Nesta tabela, ρ_v^A representa a massa específica aparente do material volátil (kg/m^3) e ρ_i referencia as massas específicas dos constituintes da biomassa (kg/m^3).

Parâmetros representativos para o modelo de taxa cinética única e para o modelo de superposição dos constituintes da biomassa são apresentados nas tabelas 2.13 e 2.14.

Tabela 3.12 - Modelos de pirólise e constantes de taxa.

Modelo	Taxa de devolatilização ($\text{kg}/\text{m}^3 \text{ s}$)	Constante de Taxa (s^{-1})
Modelo de taxa cinética única	$\dot{\omega}_m = -\rho_V^A k_{pir}$	$k_{pir} = A_{pir} \exp[-E_{pir}/(R_u T_s)]$
Modelo de superposição dos constituintes da Biomassa	$\dot{\omega}_1 = -\rho_1 k_1$ (Hemicelulose) $\dot{\omega}_2 = -\rho_2 k_2$ (Celulose) $\dot{\omega}_3 = -\rho_3 k_3$ (Lignina) $\dot{\omega}_m = \dot{\omega}_1 + \dot{\omega}_2 + \dot{\omega}_3$ (Biomassa)	$k_i = A_i \exp[-E_i/(R_u T_s)]$

Tabela 3.13 - Parâmetros para o modelo de taxa cinética única (Born & Ragland, 1998).

Combustível	$A_{pir} (\text{s}^{-1})$	$E_{pir}/R_u (K)$
Carvão Betuminoso	280	5940
Lignita	700	5690
Madeira	$1,9 \times 10^{12}$	21500

Tabela 3.14 - Parâmetros para o modelo de superposição (Beldereok, 2007).

Tipo de madeira	Hemicelulose		Celulose		Lignina	
	$A_1 (\text{s}^{-1})$	$E_1 (J/mol)$	$A_2 (\text{s}^{-1})$	$E_2 (J/mol)$	$A_3 (\text{s}^{-1})$	$E_3 (J/mol)$
<i>Softwood</i>	$5,9 \times 10^6$	$9,65 \times 10^4$	$1,9 \times 10^{11}$	$1,57 \times 10^5$	$2,6 \times 10^2$	$6,50 \times 10^4$
<i>Hardwood</i>	$4,9 \times 10^9$	$1,27 \times 10^5$	$1,9 \times 10^{11}$	$1,57 \times 10^5$	$2,7 \times 10^2$	$6,54 \times 10^4$

3.6 – MODELO MATEMÁTICO DE EVOLUÇÃO DA ESTRUTURA POROSA.

3.6.1 – Caracterização da Estrutura Porosa do Sólido.

Uma partícula de carvão ou biomassa pode ser considerada como uma estrutura porosa com canais internos de tamanhos e formas diferentes. Para efeito de modelagem, uma estrutura porosa idealizada, composta por dois tamanhos diferentes de poros, referenciados de macro-poros e micro-poros, será considerada no presente trabalho, conforme figura 3.1. Nessa estrutura os macro-poros são muito maiores que os micro-poros. Assume-se que os micro-poros forneceram área superficial para as reações químicas e os macro-poros são ao caminho preferencial para escoamento dos gases, como idealizado em Biggs e Agarwal (1996).

De maneira original, propõe-se neste estudo a divisão local de materiais e tamanhos de poros para que se possa descrever de maneira clara a evolução de massa durante a secagem, a pirólise e as reações heterogêneas, como apresentado na figura 3.1. De tal divisão resultam X_C e X_V , que são frações totais de volume.

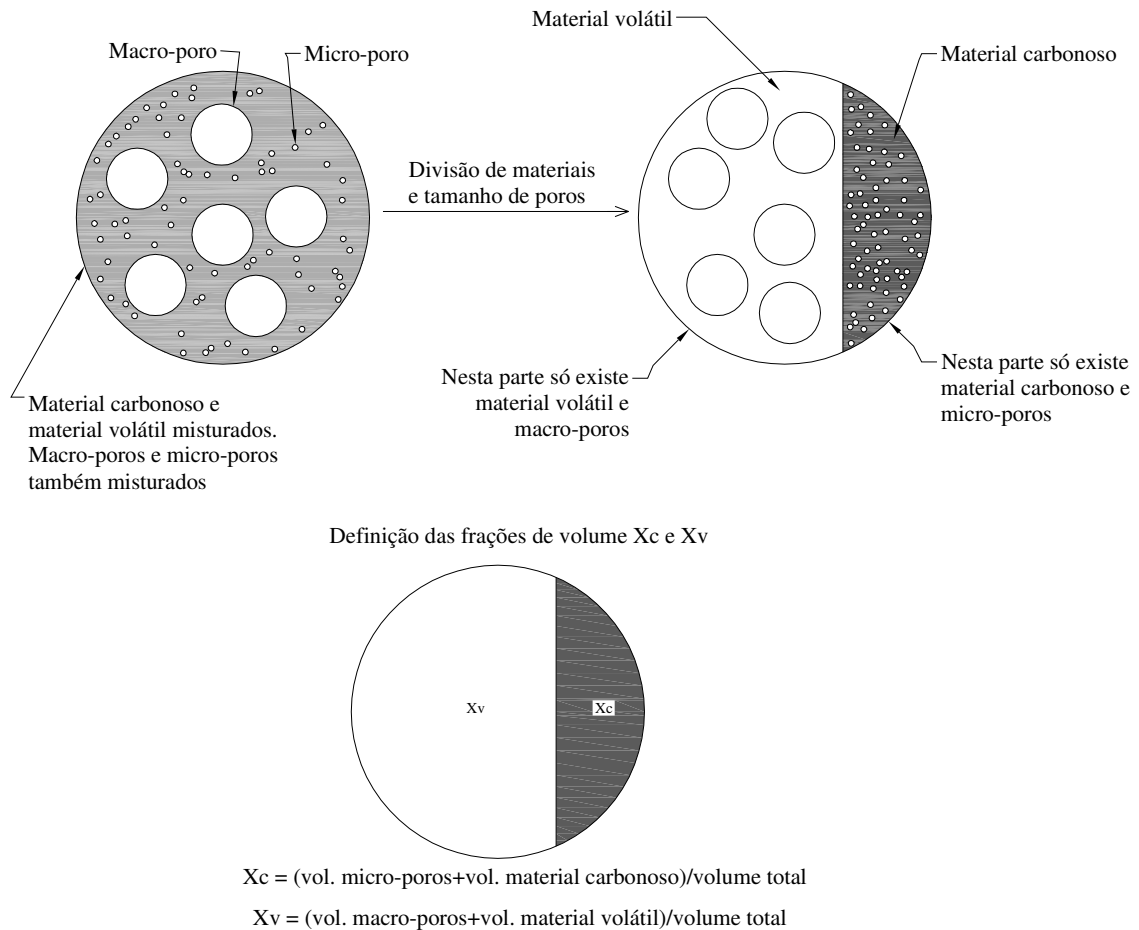


Figura 3.1 - Matriz porosa bimodal idealizada e definição das frações de volume X_V e X_C .

Porosidade

A fração de volume de vazios em um sólido é chamada de porosidade, definida como:

$$\varepsilon \equiv V_g / V_T \quad (3.14)$$

Onde: V_g é o volume de vazios que pode ser ocupado por gás na estrutura porosa e V_T é o volume total (volume de sólido + volume de vazios). O volume dos vazios a partir desta parte do texto também será referenciado como volume de gás. Este volume pode ser decomposto como:

$$V_g = V_m + V_\mu \quad (3.15)$$

onde V_m e V_μ são os volumes dos macro-poros e dos micro-poros, respectivamente.

Considerando V_m^{FPi} o volume que os macro-poros devem ocupar no final da pirólise, que, a partir da definição de X_V , pode ser escrito como: $V_m^{FPi} = X_V V_T$. O volume de base para cálculo dos micro-poros pode ser posto igual a $(V_T - V_m^{FPi})$. Assim a macro-porosidade e a micro-porosidade podem ser definidas pelas equações (3.16) e (3.17), respectivamente.

$$\varepsilon_m \equiv V_m / V_T \quad (3.16)$$

$$\varepsilon_\mu \equiv V_\mu / (V_T - V_m^{FPi}) \quad (3.17)$$

Dividindo a equação (3.15) pelo volume total V_T e considerando as equações (3.14), (3.16) e (3.17), pode-se colocar a porosidade em função da macro-porosidade e da micro-porosidade:

$$\varepsilon = \varepsilon_m + \varepsilon_\mu (1 - \varepsilon_m^{FPi}), \quad (3.18)$$

onde $\varepsilon_m^{FPi} \equiv V_m^{FPi} / V_T$ ou $\varepsilon_m^{FPi} \equiv X_V$.

Área superficial específica

A área superficial específica (m^2/m^3) é uma das principais características do meio poroso, definida como:

$$S = \frac{\text{Área_superficial}}{V_T} \quad (3.19)$$

Duas áreas superficiais específicas serão necessárias para caracterizar a estrutura porosa. Área superficial específica dos micro-poros, S_μ , e a área superficial específica dos macro-poros, S_m .

Segundo Biggs & Agarwall (1996), numa estrutura porosa bimodal os macro-poros agem como condutos para transferência de massa e micro-poros fornecem área superficial para as reações químicas. Com base nisso pode-se associar as áreas supracitadas aos fenômenos que ocorrem durante a combustão.

A área superficial específica dos micro-poros, S_μ , será posta como a área reativa da partícula e de troca de calor. A modificação S_μ com as reações heterogêneas será calculada, a partir de um valor inicial, com o modelo de poro aleatório de Bhatia e Perlmutter (1980), equação (3.20a). Neste modelo a competição relativa entre formação e destruição de área superficial, os efeitos opostos de crescimento e fusão de poros, são controlados pelo parâmetro estrutural ψ que pode ser determinado do ajuste a áreas superficiais específicas medidas (Ma, 2006). A Figura 3.2 mostra a variação de S_μ com X_{conv} para diferentes valores ψ .

$$S_\mu = S_{\mu,0} (1 - X_{conv}) \sqrt{1 - \psi \ln(1 - X_{conv})} \quad (3.20a)$$

onde X_{conv} é a conversão de material carbônico e ψ é um parâmetro estrutural.

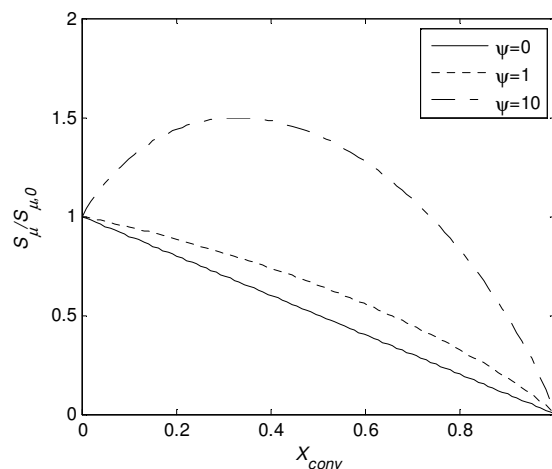


Figura 3.2 - Variação da razão de área superficial com a conversão de material.

Considerando distribuição homogênea de poros cilíndricos, cujo número permanece inalterado durante a pirólise, com comprimento bem maior que diâmetro, pode-se calcular a área superficial específica dos macro-poros, S_m , como:

$$S_m = \frac{n_{poros} (\pi d_m L_{poro})}{(V_m / \varepsilon_m)} = \frac{n_{poros} \pi d_m L_{poro}}{\left(n_{poros} \frac{\pi d_m^2}{4} L_{poro} / \varepsilon_m \right)} = \frac{4\varepsilon_m}{d_m} \rightarrow S_m = \frac{4\varepsilon_m}{d_m} \quad (3.20b)$$

onde n_{poros} é o número de macro-poros, d_m é o diâmetro dos macro-poros e L_{poro} é o comprimento dos macro-poros. Na equação acima tanto ε_m quanto d_m variam durante a pirólise.

Se os micro-poros se conectarem aos macro-poros, o aumento destes deve reduzir a área superficial dos macro-poros como:

$$S_m = \frac{4\varepsilon_m}{d_m} (1 - \varepsilon_\mu) \quad (3.20c)$$

A troca de calor entre o sólido e o gás deve ocorrer através de toda a área superficial disponível. Com o crescimento dos micro-poros, no final da combustão, a fusão de poros deve reduzir a área de troca de calor global. Além disso, caso o material tenha cinza a área final de troca de calor do sólido deve ser a deste material. Com base no exposto propõe-se que a área de troca de calor entre o sólido e o fluido seja calculada com uma combinação de S_μ , S_m e S_{CINZA} , pela equação:

$$S_t = S_m + S_\mu + S_{CINZA} \quad (3.20c)$$

onde S_{CINZA} é a área superficial específica associada à cinza.

Diâmetro dos poros

Para finalizar, a estrutura porosa consumível será caracterizada por dois tamanhos de poros. Os diâmetros dos macro-poros e dos micro-poros serão representados,

respectivamente, por d_μ e d_m . Como aproximação considera-se que inicialmente ambos os diâmetros apresentam tamanho uniforme sobre todo o sólido (Perkins & Sahajwalla, 2005).

Conforme Wang e Bhatia (2001) a superfície interna do sólido é predominantemente aquela dos micro-poros, local onde as reações heterogêneas se desenvolvem, por isso pode-se assumir que d_μ varia com a conversão de acordo com a equação:

$$d_\mu = \frac{4\varepsilon_\mu}{S_\mu} \quad (3.21a)$$

A variação do diâmetro dos macro-poros durante a conversão de material volátil, a partir de um valor inicial, pode ser calculada da razão do volume dos macro-poros em um momento qualquer, V_m , e seu volume inicial, $V_{m,0}$:

$$\frac{V_m}{V_{m,0}} = \frac{V_T \varepsilon_m}{V_T \varepsilon_{m,0}} = \frac{n_{poros} (\pi d_m^2 / 4) L_{poro}}{n_{poros} (\pi d_{m,0}^2 / 4) L_{poro}} \rightarrow d_m = d_{m,0} \sqrt{\frac{\varepsilon_m}{\varepsilon_{m,0}}} \quad (3.21b)$$

3.6.2 – Definição do volume efetivamente ocupado pelo material sólido.

O volume efetivamente ocupado pelo sólido será calculado da seguinte forma:

$$V_T - V_g = V_T - (V_m + V_\mu) \quad (3.22)$$

O volume total será decomposto em duas partes, $V_T = X_V V_T + X_C V_T$. Com base nas definições pode-se concluir que em $X_V V_T$ está o material sólido volátil e o volume dos macro-poros e em $X_C V_T$ está o material sólido carbônico e o volume dos micro-poros. Além disso, da figura 3.1 sabemos que $X_V + X_C = 1$.

Dividindo a equação (3.22) por V_T e introduzindo no resultado as frações de volume, resulta a seguinte equação

$$(1-\varepsilon)V_T = (X_v - \varepsilon_m)V_T + [X_c - \varepsilon_\mu(1 - \varepsilon_m^{FPi})] V_T \quad (3.23)$$

A partir da equação (3.23) os volumes dos materiais sólidos podem ser definidos:

$$V_T^S \equiv (1-\varepsilon)V_T \quad (\text{volume total de material sólido}) \quad (3.24)$$

$$V_v^S \equiv (X_v - \varepsilon_m)V_T \quad (\text{volume de material sólido volátil}) \quad (3.25)$$

$$V_c^S \equiv [X_c - \varepsilon_\mu(1 - \varepsilon_m^{FPi})] V_T \quad (\text{volume de material sólido carbônico}) \quad (3.26)$$

Segundo Veras (1997), para altas taxas de aquecimento o rendimento de material volátil é maior que o previsto pela análise aproximada. Para contabilizar este efeito, as frações X_v e X_c podem ser alteradas durante a simulação, como mostrado na figura 3.3.

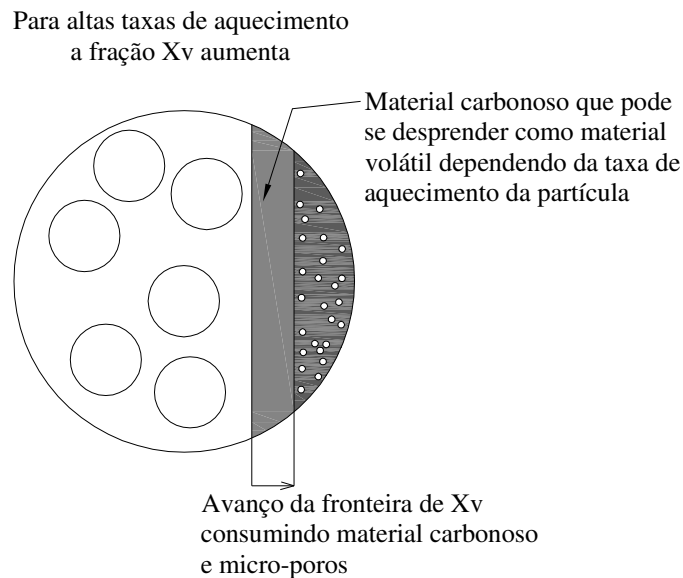


Figura 3.3 - Alteração de X_v e X_c devido altas taxas de aquecimento.

3.6.3 – Cálculo da massa específica intrínseca dos componentes do meio sólido.

A massa específica intrínseca do sólido é baseada no volume V_T^S , equação (3.24), e não no volume total, V_T . Esta propriedade do sólido será referenciada de ρ_s^I . A massa específica aparente do sólido, ρ_s^A , está relacionada à ρ_s^I como:

$$\rho_s^A = \rho_s^l(1 - \varepsilon) \quad (3.27)$$

A massa específica aparente varia com a porosidade e é definida no volume total, V_T . Para um material homogêneo pode-se utilizar a massa da partícula, m_p , e V_T para calcular a massa específica aparente inicial do sólido como:

$$\rho_s^{A,0} = \frac{m_p}{V_T} \quad (3.28)$$

No presente modelo pretende-se calcular a evolução do material sólido com base nas massas específicas intrínsecas ρ_V^l e ρ_C^l , de material volátil e de material carbônico, respectivamente, conforme a seguinte equação:

$$\underbrace{\rho_s^l(V_V^S + V_C^S)}_{m_p} = \underbrace{\rho_V^l V_V^S}_{m_V} + \underbrace{\rho_C^l V_C^S}_{m_C} \quad (3.29)$$

onde m_V e m_C são as massas de material volátil e de material carbônico, respectivamente. Assume-se que ρ_V^l e ρ_C^l não variam com a conversão de material sólido.

O valor de ρ_s^l pode ser calculado com base na composição do combustível através da correlação proposta em Merrick (1993b), equação (3.30), que é baseada no conceito de contribuições aditivas para carbono, hidrogênio, oxigênio, nitrogênio e enxofre, em base seca e livre de cinzas.

$$\frac{1}{\rho_s^l} = \sum_{i=1}^5 \alpha_i Y_i / W_{s,i} \quad (3.30)$$

onde Y_i são as frações de massa de carbono, hidrogênio, oxigênio, nitrogênio e enxofre. Os $W_{s,i}$ são os respectivos pesos atômicos dos elementos. E α_i são coeficientes dos elementos dados na Tabela 3.15.

Tabela 3.15 - Coeficientes da equação (3.30) (Merrick, 1993b).

	C	H	O	N	S
α_i (m ³ kmol ⁻¹)	0,00530	0,00577	0,00346	0,00669	0,00384

Deve se observar que a porosidade inicial do sólido pode ser calculada com base em $\rho_S^{A,0}$ e ρ_S^I como: $\varepsilon^0 = 1 - \rho_S^{A,0} / \rho_S^I$.

A massa específica intrínseca do resíduo carbônico pode ser aproximada como a massa específica do carbono puro. Na literatura este valor geralmente é aproximado por $\rho_C^I = 2200 \text{ kg/m}^3$ (Peter & Bruch, 2001), e será empregado no decorrer deste trabalho.

Com relação à massa específica intrínseca do material volátil, fica difícil de estimar ou calcular seu valor com a equação (3.30). No entanto um valor pode ser calculado facilmente a partir de parâmetros da análise imediata, $m_V = Y_V \rho_S^{A,0} V_T = \rho_V^I (X_V - \varepsilon_m) V_T$, como:

$$\rho_V^I = \frac{Y_V}{(X_V - \varepsilon_m)} \rho_S^{A,0} \quad (3.31)$$

onde Y_V é a fração de material volátil de um combustível sólido e $\rho_S^{A,0}$ é a massa específica aparente do combustível para o momento inicial. Deve-se lembrar que ρ_V^I será mantido constante com a conversão de material volátil.

3.6.4 – Evolução da massa específica intrínseca do sólido

Substituindo os volumes dados pelas equações (3.24), (3.25) e (3.26) em (3.29), a massa local de sólido, $m_S = \rho_S^I (1 - \varepsilon) V_T$, pode ser posta em função de ρ_V^I , ρ_C^I , ε_m e ε_μ , como segue:

$$\rho_S^I (1 - \varepsilon) V_T = \rho_V^I (X_V - \varepsilon_m) V_T + \rho_C^I [X_C - \varepsilon_\mu (1 - \varepsilon_m^{FPi})] V_T \quad (3.32)$$

Para X_V e X_C constantes, variações de ε_m e ε_μ provocam alteração na massa do sólido. Supondo que a macro-porosidade e a micro-porosidade variam devido à pirólise e oxidação do resíduo carbônico, respectivamente, o final da pirólise acontecerá quando a macro-porosidade alcançar o valor $\varepsilon_m = X_V$, pois neste caso $V_V^S = 0$. O final da oxidação ocorrerá quando $\varepsilon_\mu (1 - \varepsilon_m^{FPi}) = X_C$. Como posto, fica totalmente explícito que m_S varia com a porosidade, ou seja, a partícula se degradará devido o aumento da porosidade.

Deve-se notar que o aumento da porosidade pode ocorrer distribuídamente por toda a partícula, acarretando numa redução da massa específica uniforme. Este tipo de comportamento é notado em partículas pequenas, que sofrem perda de massa aproximadamente de forma isotérmica. De outra forma, o crescimento da porosidade pode ocorrer numa frente que avança para o centro da partícula. Este comportamento é típico de partículas termicamente espessas. Algumas das possíveis configurações de perda de massa devido às reações heterogêneas são apresentadas na figura 3.4. Todas as formas de perda de massa apresentadas podem ser simuladas pelo modelo proposto sem que seja necessário qualquer ajuste para que isto ocorra. A forma de conversão de massa será função das condições de contorno, tamanho de partícula, propriedades termofísicas, entre outras.

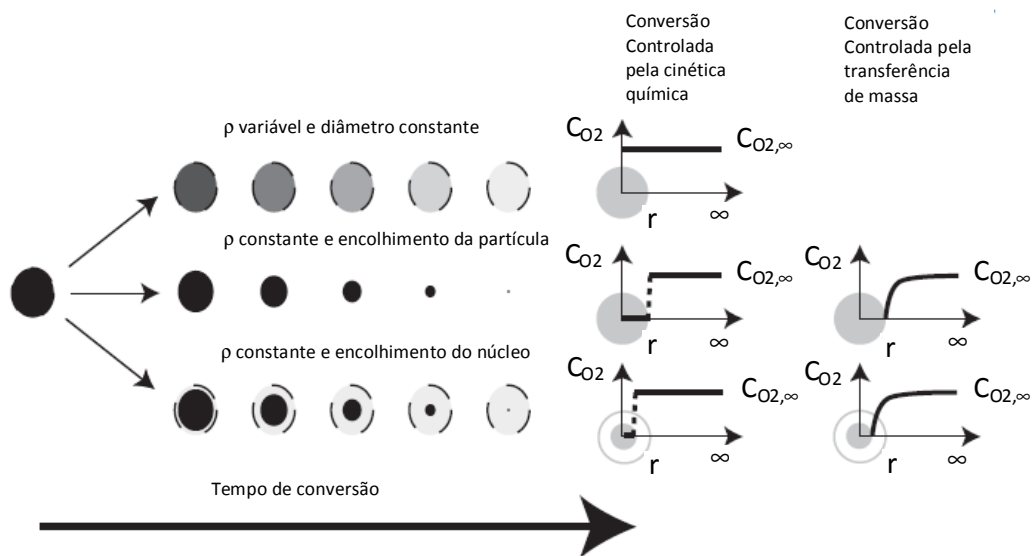
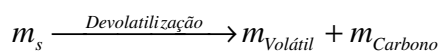


Figura 3.4 - Conversão de coque com o tempo para casos simplificados, os maiores valores de massa específica estão associados ao tom mais escuro (Adaptado de Thunman, 2002).

Além do exposto, é importante ressaltar que o modelo proposto para a combustão prevê a evolução simultânea de material volátil e de material carbônico. A evolução destes materiais deve seguir uma ordem, pois o material carbônico só fica disponível na medida em que o combustível sólido se degrada termicamente emitindo voláteis e formando o resíduo carbônico, conforme esquema a seguir:



No presente estudo é assumido que as proporções de $m_{Volátil}$ e $m_{Carbono}$ são conhecidas previamente. Para que o esquema de conversão de massa seja obedecido, basta considerar que $X_{conc,c} \leq X_{conc,v}$, onde $X_{conc,c}$ e $X_{conc,v}$ representam as conversões locais de material volátil e carbônico, respectivamente. Assim, assegura-se que a destruição da estrutura sólida, desconsiderando a cinza, se dá devido ao consumo de $m_{Carbono}$. Com isso, a saída de material volátil aumenta a porosidade da partícula sem alterar seu tamanho.

3.6.5 – Cálculo da macro-porosidade e micro-porosidade da partícula.

A porosidade inicial do sólido pode ser calculada por suas massas específicas como $\varepsilon^0 = 1 - \rho_s^{A,0} / \rho_s^I$. Com base numa estimativa de ε_μ^0 os valores de X_V , X_C e ε_m^0 podem ser calculados como será apresentado a seguir.

Prosseguindo, da análise imediata sabe-se a seguinte relação:

$$m_C = \rho_s^{A,0} Y_C = \rho_C^I [X_C - \varepsilon_\mu^0 (1 - X_V)] \quad (3.33)$$

desta tira-se:

$$X_C + \varepsilon_\mu^0 X_V = \frac{\rho_s^{A,0}}{\rho_C^I} Y_C + \varepsilon_\mu^0 \quad (3.34)$$

A partir de $X_C + X_V = 1$ e da equação (3.34) determina-se X_C e X_V :

$$\begin{bmatrix} 1 & \varepsilon_\mu^0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} X_C \\ X_V \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y_C \rho_s^{A,0} / \rho_C^I + \varepsilon_\mu^0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.35)$$

Para fechar o sistema tem-se:

$$\varepsilon_m^0 = \varepsilon^0 - \varepsilon_\mu^0 (1 - X_V) \quad (3.36)$$

No final da pirólise a macro-porosidade deve se igualar a fração de volume ocupado pelo material volátil: $\varepsilon_m = X_v$. No final da combustão da partícula $\varepsilon_\mu = 1$.

Como discutido, todos os parâmetros necessários para uso do modelo proposto estão determinados para uso na simulação.

Evolução da porosidade com a conversão de massa.

Com base na equação (3.32), a equação de conservação da massa do sólido pode ser escrita como:

$$\frac{\partial \rho_s^A}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} [\rho_s^I (1 - \varepsilon)] = \frac{\partial}{\partial t} [\rho_v^I (X_v - \varepsilon_m)] + \frac{\partial}{\partial t} \{ \rho_c^I [X_c - \varepsilon_\mu (1 - X_v)] \} \quad (3.37)$$

Para X_v e X_c constantes, a equação (3.37) pode ser simplificada para:

$$\frac{\partial \rho_s^A}{\partial t} = -\rho_s^I \frac{d\varepsilon}{dt} = -\rho_v^I \frac{d\varepsilon_m}{dt} - \rho_c^I \frac{d\varepsilon_\mu}{dt} \quad (3.38)$$

De acordo com Biggs e Agarwal (1996) pode-se associar o aumento da macro-porosidade com a pirólise, enquanto que a variação da micro-porosidade pode ser relacionada com a oxidação do coque. Com base no exposto e na equação (3.38), pode-se descrever a evolução da macro-porosidade e micro-porosidade como:

$$\frac{d\varepsilon_m}{dt} = -\dot{\omega}_m / \rho_v^I \quad (3.39)$$

$$\frac{d\varepsilon_\mu}{dt} = -\dot{\omega}_\mu / \rho_c^I \quad (3.40)$$

onde $\dot{\omega}_m$ e $\dot{\omega}_\mu$ são as taxas de consumo de massa devido à pirólise e as reações heterogêneas do coque, respectivamente.

Valores iniciais das equações (3.39) e (3.40) já foram discutidos anteriormente. As equações (3.39) e (3.40) deverão ser resolvidas para cada ponto nodal do meio poroso.

As conversões de material volátil, $X_{vol,i}$, e de material carbônico, $X_{car,i}$, para um volume de controle i , podem ser calculadas do seguinte modo:

$$X_{vol,i} = \frac{\varepsilon_{m,i} - \varepsilon_{m,i}^0}{X_{V,i} - \varepsilon_{m,i}^0} \quad (3.41)$$

$$X_{car,i} = \frac{\varepsilon_{\mu,i} - \varepsilon_{\mu,i}^0}{1 - \varepsilon_{\mu,i}^0} \quad (3.42)$$

onde $\varepsilon_{m,i}^0$ e $\varepsilon_{\mu,i}^0$ representam os valores iniciais de macro-porosidade e de micro-porosidade, respectivamente. É interessante observar que o termo $X_{car,i}$ pode ser utilizado como parâmetro de parada da simulação.

Os valores globais de conversão podem ser obtidos a partir de média volumétrica:

$$X_{vol,G} = \frac{\sum_{i=1}^{Nvol} X_{vol,i} V_{T,i}}{\sum_{i=1}^{Nvol} V_{T,i}} \quad (3.43)$$

$$X_{car,G} = \frac{\sum_{i=1}^{Nvol} X_{car,i} V_{T,i}}{\sum_{i=1}^{Nvol} V_{T,i}} \quad (3.44)$$

onde $V_{T,i}$ é o volume de controle associado ao nó i .

Forma alternativa de calcular a evolução da porosidade com a conversão de massa.

Como as massas específicas ρ_V^I e ρ_C^I são assumidas constantes, existe uma proporcionalidade entre massa e volume, ou seja, cada Δm perdido está associada a um ΔV . Por isso, pode-se optar por calcular a evolução da porosidade em função da perda de massa da seguinte forma:

$$\varepsilon_m = \eta_V \varepsilon_m^0 + (1 - \eta_V) \varepsilon_m^{FPi} \quad (3.45)$$

$$\varepsilon_{\mu} = \eta_C \varepsilon_{\mu}^0 + (1 - \eta_C) \varepsilon_{\mu}^F \quad (3.46)$$

onde $\eta_V = m_V / m_V^0$ e $\eta_C = m_C / m_C^0$. E m_V e m_C representam a massa local de material volátil e de resíduo carbônico, respectivamente, no sólido em um instante qualquer. O sobrescrito “0”, em m_V^0 e m_C^0 , indica instante inicial.

As evoluções de material volátil e de material carbônico podem ser calculadas como:

$$\frac{1}{V_T} \frac{dm_V}{dt} = \dot{\omega}_m \quad (3.47)$$

$$\frac{1}{V_T} \frac{dm_C}{dt} = \dot{\omega}_{\mu} \quad (3.48)$$

Deve-se notar que as conversões de massa ainda podem ser calculadas pelas equações (3.41) e (3.42).

3.6.6 – Modelo de evolução da estrutura porosa considerando que a massa da partícula contém umidade.

Como a umidade contribui para o aumento da massa específica da partícula, preenchendo os espaços vazios do sólido, e não altera a macro-porosidade nem a micro-porosidade, propõe-se que a umidade seja contabilizada como apresentado abaixo:

$$\rho_s^I (V_V^S + V_C^S + V_U^S) = \rho_V^I V_V^S + \rho_C^I V_C^S + \rho_U^I V_U^S \quad (3.49)$$

onde $V_U^S = X_U V_T$ e X_U é a fração de volume da partícula ocupada pela umidade.

Com base na equação (3.49), a massa específica pode ser escrita em função da porosidade do meio:

$$\rho_s^l(1-\varepsilon) = \rho_v^l(X_v - \varepsilon_m) + \rho_c^l[X_c - \varepsilon_\mu(1 - X_v)] + \rho_U^l X_U \quad (3.50)$$

Na equação (3.49) a porosidade do sólido seco foi referenciada de ε_s . Esta porosidade é exatamente a da equação (3.18), $\varepsilon_s = \varepsilon_m + \varepsilon_\mu(1 - \varepsilon_m^{FPi})$, sua nomenclatura foi modificada para indicar que ela não é mais a porosidade principal, ou total. A porosidade principal continua sendo referenciada de ε , mas agora é definida como:

$$\varepsilon \equiv \varepsilon_s - X_U \quad (3.51)$$

Como ε_s representa a fração de vazios do sólido, então $\varepsilon_s \geq \varepsilon$, ou seja, a fração de volume ocupada pela água não pode ser maior que a fração de espaços vazios do sólido. Sendo a umidade o primeiro material a escapar da partícula sólida num ambiente de combustão, quando $X_U = 0 \Rightarrow \varepsilon = \varepsilon_s$ localmente a equação (3.50) retoma a forma da equação (3.32).

A equação (3.50) mostra como a massa específica aparente da madeira $\rho_s^A = \rho_s^l(1 - \varepsilon)$ varia com a porosidade e com o conteúdo de umidade do sólido.

A secagem será contabilizada através da redução da fração de volume X_U , da seguinte forma:

$$X_U = \frac{m_U}{\rho_U^l V_T} \quad (3.52)$$

onde m_U é a massa de umidade local no sólido em um instante qualquer. Pela equação (3.52), quando $m_U = 0$ o sólido estará seco.

Algumas quantidades devem ser alteradas para inclusão da umidade. A determinação de X_c , X_v e ρ_v^l considerando sólido úmido passa a ser:

$$\begin{bmatrix} 1 & \varepsilon_\mu^0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} X_c \\ X_v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y_c(1 - Y_U)\rho_s^{A,0} / \rho_c^l + \varepsilon_\mu^0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.53)$$

$$\rho_V^I = \frac{Y_V(1-Y_U)}{(X_V - \varepsilon_m)} \rho_S^{A,0} \quad (3.54)$$

Nas equações (3.53) e (3.54): $\rho_S^{A,0} = \rho_U^{A,0} + \rho_V^{A,0} + \rho_C^{A,0}$ e $Y_C + Y_V = 1$.

3.6.7 – Modelo de evolução da estrutura porosa considerando que a massa da partícula contém cinza.

A cinza é considerada inerte, com ponto de fusão muito elevado. Sua massa específica é considerada constante, por isso $\partial \rho_{CINZA} / \partial t = 0$.

Para inclusão da cinza pode-se proceder exatamente como no caso da umidade.

Logo, a massa do sólido pode ser apresentada como:

$$m_S^0 = m_V^0 + m_C^0 + m_U^0 + m_{CINZA}^0 = \overbrace{m_S^0 Y_V (1 - Y_U - Y_{CINZA})}^{m_V^0} + \overbrace{m_S^0 Y_C (1 - Y_U - Y_{CINZA})}^{m_C^0} + \overbrace{m_S^0 Y_U}^{m_U^0} + \overbrace{m_S^0 Y_{CINZA}}^{m_{CINZA}^0} \quad (3.55a)$$

onde $Y_C + Y_V = 1$. E Y_C , Y_V , Y_U e Y_{CINZA} são as frações de massa de carbono fixo, de material volátil, de umidade e de cinza, respectivamente.

A equação (3.55a) pode ser escrita em termos de massa específica aparente:

$$\rho_S^{A,0} = \overbrace{\rho_S^{A,0} Y_V (1 - Y_U - Y_{CINZA})}^{\rho_V^{A,0}} + \overbrace{\rho_S^{A,0} Y_C (1 - Y_U - Y_{CINZA})}^{\rho_C^{A,0}} + \overbrace{\rho_S^{A,0} Y_U}^{\rho_U^{A,0}} + \overbrace{\rho_S^{A,0} Y_{CINZA}}^{\rho_{CINZA}^{A,0}} \quad (3.55b)$$

A massa específica aparente e a intrínseca da cinza se relacionam como:

$$m_S^0 Y_{CINZA} = \rho_S^{A,0} V_T Y_{CINZA} = \rho_{CINZA}^I V_{CINZA}^S \quad (3.56)$$

Definindo a fração de volume de cinza como $X_{CINZA}^S \equiv V_{CINZA}^S / V_T$, então a equação anterior pode ser escrita como:

$$\rho_{CINZA}^I X_{CINZA}^S = \rho_S^{A,0} Y_{CINZA} \quad (3.57)$$

A fração de volume de cinza pode ser calculada como: $X_{CINZA}^S = \frac{\rho_S^A}{\rho_{CINZA}^I} Y_{CINZA}$.

Com a inclusão da cinza, no momento inicial, as massas específicas devem se relacionar como:

$$m_{CINZA} = \rho_S^A V_T Y_{CINZA} \quad \rightarrow \quad \rho_{CINZA}^I \frac{V_{CINZA}^S}{V_T} = \rho_S^{A,0} Y_{CINZA} \quad (3.58a)$$

$$m_U = \rho_S^A V_T Y_U \quad \rightarrow \quad \rho_U^I \frac{V_U^S}{V_T} = \rho_S^{A,0} Y_U \quad (3.58b)$$

$$m_V^0 = \rho_S^{A,0} V_T Y_V (1 - Y_{CINZA}) \quad \rightarrow \quad \rho_V^I \frac{V_V^S}{V_T} = \rho_S^{A,0} Y_V (1 - Y_U - Y_{CINZA}) \quad (3.58c)$$

$$m_C^0 = \rho_S^{A,0} V_T Y_C (1 - Y_{CINZA}) \quad \rightarrow \quad \rho_C^I \frac{V_C^S}{V_T} = \rho_S^{A,0} Y_C (1 - Y_U - Y_{CINZA}) \quad (3.58d)$$

Considerando $\rho_S^I (1 - \varepsilon) V_T = \rho_{CINZA}^I V_{CINZA}^S + \rho_U^I V_U^S + \rho_V^I V_V^S + \rho_C^I V_C^S$ e as equações (3.58a)- (3.58d):

$$\rho_S^I (1 - \varepsilon) = \underbrace{\rho_{CINZA}^I \frac{V_{CINZA}^S}{V_T}}_{X_{CINZA}^S} + \underbrace{\rho_U^I \frac{V_U^S}{V_T}}_{X_U^S} + \underbrace{\rho_V^I \frac{V_V^S}{V_T}}_{(X_V - \varepsilon_m)} + \rho_C^I \frac{V_C^S}{V_T} \quad (3.59)$$

$[X_C - \varepsilon_\mu (1 - \varepsilon_m^{FPi})]$

o que resulta na seguinte relação de massas específicas e frações de volume:

$$\rho_S^I (1 - \varepsilon) = \rho_{CINZA}^I X_{CINZA}^S + \rho_U^I X_U^S + \rho_V^I (X_V - \varepsilon_m) + \rho_C^I [X_C - \varepsilon_\mu (1 - \varepsilon_m^{FPi})] \quad (3.60)$$

As frações de volume se relacionam como:

$$(1 - \varepsilon) = X_{CINZA}^S + X_U^S + \overbrace{X_V + X_C}^1 - \overbrace{[\varepsilon_m + \varepsilon_\mu (1 - \varepsilon_m^{FPi})]}^{\varepsilon_s} \quad (3.61)$$

Assim: $\varepsilon = \varepsilon_s - X_{CINZA}^S - X_U^S$

No momento final da combustão $X_U^S = 0$ e $\varepsilon_s = 1$:

$$\rho'_S(1 - \varepsilon) = \rho'_{CINZA} X_{CINZA}^S = \rho'_{CINZA}(1 - \varepsilon) \rightarrow \rho'_S = \rho'_{CINZA} \quad (3.62)$$

Como esperado, a massa específica intrínseca do sólido será igual à massa específica intrínseca da cinza no momento final de combustão.

Algumas quantidades devem mudar de cálculo para inclusão da cinza. A determinação de X_C e X_V considerando cinza passa a ser feita como:

$$\begin{bmatrix} 1 & \varepsilon_\mu^0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} X_C \\ X_V \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y_C(1 - Y_U - Y_{CINZA})\rho_S^{A,0} / \rho'_C + \varepsilon_\mu^0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.63)$$

A massa específica intrínseca do material volátil deve passar a ser calculada como:

$$\rho'_V = \frac{Y_V(1 - Y_U - Y_{CINZA})}{(X_V - \varepsilon_m)} \rho_S^{A,0} \quad (3.64)$$

Nas equações (3.63) e (3.64): $\rho_S^{A,0} = \rho_{CINZA}^{A,0} + \rho_V^{A,0} + \rho_C^{A,0} + \rho_U^{A,0}$ e $Y_C + Y_V = 1$.

No final da secagem $X_U^S = 0$, no final da pirólise $\varepsilon_m^F = X_V$ e no final da combustão da partícula $\varepsilon_\mu^F = 1$ e $\varepsilon_s = 1$, o que resulta em: $\varepsilon^F = 1 - X_{CINZA}^S$: Um resíduo poroso de cinza resta no final da combustão.

3.7 – PROPRIEDADES DE TRANSPORTE E TERMOFÍSICAS

3.7.1 – Propriedades de Transporte e Termofísicas da Fase Gasosa

As propriedades de transporte e termofísicas serão estimadas como função da temperatura e composição da mistura.

A massa específica da mistura de gases, a temperatura e pressão são relacionadas através da equação de estado para gases ideais:

$$\rho = \frac{p\bar{W}_g}{R_u T_g} \quad (3.65)$$

O peso molecular da mistura de gases será obtido a partir da composição dos gases:

$$\bar{W}_g = \left(\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k / W_{g,k} \right)^{-1} \quad (3.66)$$

A entalpia específica será obtida como:

$$h = \sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k \bar{h}_k W_{g,k} \quad (3.67)$$

Onde a entalpia molar de cada componente \bar{h}_i é função da temperatura:

$$\bar{h}_k = \bar{h}_{g,k}^{0,298} + \int_{298}^T \bar{c}_{p,k} dT \quad (3.68)$$

O calor específico à pressão constante da mistura pode ser obtido como:

$$c_{p,g} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k \bar{c}_{p,k} W_{g,k} \quad (3.69)$$

O calor específico das equações (3.68) e (3.69) de espécies individuais será obtido em função da temperatura:

$$\bar{c}_{p,k} / R_u = a_{0,k} + a_{1,k} T_g + a_{2,k} T_g^2 + a_{3,k} T_g^3 + a_{4,k} T_g^4 \quad (3.70)$$

Os coeficientes da equação (3.70) para as espécies consideradas neste trabalho foram obtidos de: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/version30/files30/thermo30.dat

A entalpia sensível, presente na equação (3.68), dada por $\bar{h}_{g,k}^s = \int_{298}^T \bar{c}_{p,k} dT$, será obtida pela integração da equação de $\bar{c}_{p,k}$.

A viscosidade e a condutividade térmica de um componente puro podem ser calculadas como (Bird *et al.*, 2002):

$$\mu_k = \frac{2,6693 \times 10^{-6} \sqrt{W_{g,k} T_g}}{\sigma^2 \Omega_\mu} \quad (3.71)$$

$$k_k = \left(c_{p,g} + \frac{5 R_u}{4 W_{g,k}} \right) \mu_k \quad (3.72)$$

A viscosidade e a condutividade térmica da mistura de gases serão estimadas com base nos componentes da mistura. Conforme Bird *et al.* (2002), no caso de uma mistura a baixa pressão (<20 atm), as equações (3.73) e (3.74) podem ser utilizadas para o cálculo da viscosidade e condutividade térmica da mistura, respectivamente.

$$\mu_g = \frac{\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k \mu_k}{\sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j \Theta_{kj}} \quad (3.73)$$

$$k_g = \frac{\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k k_k}{\sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j \Theta_{kj}} \quad (3.74)$$

$$\text{onde } \Theta_{kj} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{W_{g,k}}{W_{g,j}} \right)^{\frac{1}{2}} \left[1 + \sqrt{\frac{\mu_i}{\mu_j}} \left(\frac{W_{g,j}}{W_{g,k}} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^2 \quad (3.75)$$

A difusão no seio da fase gasosa (*bulk*) e a difusão Knudsen podem contribuir para o transporte de massa dentro da estrutura porosa. Segundo Cremasco (2002) a difusão Knudsen é importante se o tamanho dos poros for da ordem do caminho livre médio do difundente, situação na qual a colisão dos gases com as paredes dos poros é mais significativa de que a colisão entre moléculas. O efeito combinado dos dois mecanismos de difusão descritos pode ser condensado em um coeficiente de difusão efetivo, $D_{i,eff}$, expresso como:

$$\frac{1}{D_{k,eff}} = \frac{\tau}{\varepsilon} \left(\frac{1}{D_{km}} + \frac{1}{D_{K,k}} \right) \quad (3.76)$$

Onde: D_{km} representa o coeficiente de difusão no seio da fase gasosa da espécie k e $D_{K,k}$ é o coeficiente de difusão Knudsen.

O coeficiente de difusão no seio da fase gasosa do componente k na mistura pode ser calculado da seguinte forma (Turns, 2000):

$$D_{km} = (1 - X_k) \left(\sum_{\substack{j=2 \\ j \neq k}}^{N_{sp}} \frac{X_j}{D_{kj}} \right)^{-1} \quad (3.77)$$

O índice j presente na equação representa as demais espécies presentes na mistura.

A difusividade binária presente na equação (3.77) será calculada pela equação de Chapman-Enskog, expressa por (Bird *et al.*, 2001):

$$D_{kj} = 1,858 \times 10^{-3} \frac{T_g^{3/2}}{p \sigma_{kj}^2 \Omega_D} \left(\frac{1}{W_{g,k}} + \frac{1}{W_{g,j}} \right) \quad (3.78)$$

Onde: $\sigma_{kj} = (\sigma_k + \sigma_j)/2$, o diâmetro de colisão σ_k , dado em Å, é função da energia potencial de atração/repulsão entre duas moléculas, seu valor será tomado da literatura.

O coeficiente de difusão Knudsen será calculado através da seguinte equação (Cremasco, 2002):

$$D_{K,k} = \frac{d_p}{3} u_{m,k} \quad (3.79)$$

onde d_p é diâmetro médio do poro e $u_{m,k}$ é a velocidade média das moléculas de uma espécie k nos poros que, a partir das suposições da teoria cinética dos gases, pode ser

calculada como (Cremasco, 2002): $u_{m,k} = \left[\frac{(8R_u T_g)}{(\pi W_{g,k})} \right]^{0.5}$. A porosidade, ε , é introduzida de modo que o fluxo de gases seja baseado na seção transversal local total do sólido. A tortuosidade, τ , contabiliza o efeito do caminho tortuoso do gás na matriz sólida, o efeito de variação da seção transversal dos poros individuais e vários outros graus de anisotropia e heterogeneidade da estrutura porosa.

Para finalizar, vale ressaltar que as equações (3.71), (3.72) e (3.78) possuem base teórica e empírica. Segundo Bird *et al.* (2002) a teoria de Chapman-Enskog dá expressões para propriedades de transporte em função da energia potencial intermolecular. No entanto uma forma funcional teórica para energia potencial intermolecular para moléculas reais não é conhecida. Contudo, para moléculas apolares uma expressão empírica é dada pelo potencial de Leonard-Jones (6-12). Então com base neste potencial e na teoria de Chapman-Enskog é possível contabilizar o efeito da interação entre moléculas reais através de um parâmetro chamado de integral de colisão, obtido da soma de todos os eventos de colisão possíveis. A integral de colisão está associada à energia máxima de atração entre duas moléculas e expressa a dependência do diâmetro de colisão com a temperatura, da qual é inversamente proporcional (Cremasco, 2002). As integrais de colisão para gases apolares tanto para a viscosidade como para a difusividade, conforme apresentado em Bird *et al.* (2002), podem ser calculadas da seguinte forma:

$$\Omega_\mu = A(T^*)^{-B} + C[\exp(-DT^*)] + E[\exp(-FT^*)] \quad (3.80)$$

$$\Omega_D = \frac{A}{(T^*)^B} + \frac{C}{\exp(DT^*)} + \frac{E}{\exp(FT^*)} + \frac{G}{\exp(HT^*)} \quad (3.81)$$

O parâmetro $T^* = T_g (\varepsilon_{AB} / k_B)^{-1}$ é uma temperatura adimensional. Onde k_B é a constante de Boltzmann e $\varepsilon_{AB} = \sqrt{\varepsilon_A \varepsilon_B}$ é a energia máxima de atração entre duas moléculas.

Tabela 3.16 - Constantes das equações de Ω_μ e Ω_D .

Equação	A	B	C	D	E	F	G	H
Ω_μ	1,16145	0,14874	0,52487	0,77320	2,16718	2,43787	-	-
Ω_D	1,06036	0,15610	0,19300	0,47635	1,03587	1,52996	1,76474	3,89411

3.7.2 – Propriedades do Meio Poroso e Termofísicas da Fase Sólida

As propriedades do meio poroso e termofísicas para o meio sólido serão apresentadas a seguir.

Caso a condutividade do combustível sólido virgem (madeira ou carvão) seja conhecida, a condutividade térmica do combustível sólido pode ser calculada em função da conversão local de material como:

$$k_{cs} = \eta k_{sv} + (1 - \eta) k_{rc} \quad (3.82)$$

onde os subscritos sv e rc se referem ao sólido virgem (madeira ou carvão) e ao resíduo carbônico, respectivamente. E $\eta = m_s / m_{s,0}$, sendo m_s a massa local seca em um instante qualquer e $m_{s,0}$ a massa local seca no instante inicial.

Para a equação (3.82) a condutividade térmica do resíduo carbônico, da madeira e do carvão, pode ser tomada igual a do carbono puro. Segundo Thunman (2002) esta condutividade, em W/mK, pode ser calculada em função da temperatura pela equação:

$$k_{rc} = 1,47 + T_s \cdot 1,1 \times 10^{-3} \quad (3.83)$$

A condutividade térmica do combustível sólido também pode ser calculada em função da conversão do sólido com a equação proposta por Merrick (1993c):

$$k_{cs} = (\rho_s^{I*} / 4511)^{3,5} T^{0,5} \quad (3.84a)$$

A massa específica que aparece na equação (3.84) deve ser calculada com a equação (3.30) e sua variação com a conversão de massa, em base seca e isenta da cinza, pode ser calculada com os parâmetros do modelo proposto:

$$\rho_s^{I*} = \rho_v^I (X_v - \varepsilon_m) / (1 - \varepsilon_s) + \rho_c^I [X_c - \varepsilon_\mu (1 - X_v)] / (1 - \varepsilon_s) \quad (3.84b)$$

O efeito da cinza e da água na condutividade térmica será contabilizado como:

$$k_{cond} = \eta_{cs} k_{cs} + \eta_{cinza} k_{cinza} + \eta_u k_u$$

onde $\eta_{cs} = \frac{m_{cs}}{m_s}$, $\eta_{cinza} = \frac{m_{cinza}}{m_s}$ e $\eta_u = \frac{m_u}{m_s}$. As massas de sólido e de combustível sólido são dadas como $m_s = m_{cs} + m_{cinza} + m_u$ e $m_{cs} = m_v + m_c$, respectivamente. As condutividades térmicas da umidade e da cinza serão calculadas, respectivamente, pelas equações $k_u = -0,487 + 5,887 \times 10^{-3} T - 7,38 \times 10^{-6} T^2$ e $k_{cinza} = 6,18 \times 10^{-4} T + 1,2$.

Tanto o carvão quanto a biomassa geralmente queimam em altas temperaturas, onde o aquecimento devido à transferência radiativa pode ser muito importante. O efeito da transferência de calor radiativa pode ser contabilizado na equação da energia do sólido através do aumento de sua condutividade, por uma condutividade radiativa, como posto na equação (3.85). Esta aproximação, aplicável se o meio for opticamente espesso, é conhecida como “Aproximação de Rosseland” ou “Aproximação Difusa” e é representada pela equação (3.86).

$$k_s = k_{cond} + k_{rad} \quad (3.85)$$

$$k_{rad} = 4\sigma\epsilon_{rad}d_{p,g}T_s^3 \quad (3.86)$$

onde σ é constante de Stefan-Boltzmann, $d_{p,g}$ é o tamanho dos maiores poros e ϵ_{rad} é a emissividade da partícula: $\epsilon_{rad} = (1 - \eta_{cinza})\epsilon_{rad}^{cs} + \eta_{cinza}\epsilon_{rad}^{cinza}$, $\epsilon_{rad}^{cs} = \left(1 - \frac{m_{cs}}{m_{cs,0}}\right)\epsilon_{rad}^{RC} + \frac{m_{cs}}{m_{cs,0}}\epsilon_{rad}^{SV}$. Nestas equações ϵ_{rad}^{SV} , ϵ_{rad}^{RC} e ϵ_{rad}^{cinza} são as emissividades do sólido virgem, do resíduo carbônico e da cinza, respectivamente.

O calor específico do carvão, da biomassa, do coque de biomassa e de carvão, em (kJ/kgK), em base seca e isenta de cinzas, serão calculados com a equação proposta por Merrick (1983):

$$c_{p,cs} = \left(R_u / \bar{W}_s\right) \left[g_1 (380T_s^{-1}) + 2g_1 (1800T_s^{-1}) \right] \quad (3.87)$$

onde $g_1(X) = (X^2 e^X)(e^X - 1)^{-2}$ e o parâmetro \bar{W}_s representa o peso atômico médio do sólido, calculado através da equação:

$$1/\bar{W}_s = \sum_{k=1}^5 Y_k/W_{s,k} \quad (3.88)$$

sendo Y_k as frações de massa de carbono, hidrogênio, oxigênio, nitrogênio e enxofre, em base seca, e $W_{s,k}$ são os respectivos pesos atômicos dos elementos.

A equação (3.87) pode ser utilizada tanto para o combustível sólido virgem (carvão ou biomassa) quanto para o resíduo carbônico variando apenas \bar{W}_s . O limite de $c_{p,s}$ para $T_s \rightarrow \infty$ é $3R_u \bar{W}_s^{-1}$, o que segundo Merrick (1983) está de acordo com os princípios físico-químicos. Merrick (1983) obteve boa concordância com a equação (3.87), cerca de 10%, entre valores preditos e experimentais para carvões de várias classes. Já para faixa de 0-800°C, considerando coque de carvão e grafite, a concordância entre dados experimentais e preditos foi de aproximadamente 5%. Hong Lu (2006) utilizou a equação (3.87) em simulações de pirólise e combustão de madeira. Para madeira utilizou $\bar{W}_s = 7,72 \text{ kg/kmol}$ e para o resíduo carbônico $\bar{W}_s = 11,3 \text{ kg/kmol}$.

A variação do $c_{p,cs}$ com a conversão de massa será contabilizada com a variação de \bar{W}_s :

$$\bar{W}_s = \frac{m_{cs}}{m_{cs,0}} \bar{W}_{s,i} + \left(1 - \frac{m_{cs}}{m_{cs,0}}\right) \bar{W}_{s,f} \quad (3.89)$$

onde o valor inicial de \bar{W}_s será calculado da composição inicial do combustível, equação (3.88), e o valor final será posto como $\bar{W}_s = 12$.

O calor específico do sólido, considerando o efeito da cinza e da umidade, será contabilizado por

$$c_{p,s} = \eta_{cs} c_{p,cs} + \eta_{cinza} c_{p,cinza} + \eta_u c_{p,u} \quad (3.90)$$

onde $c_{p,cinza}$ e $c_{p,u}$ são os calores específicos da cinza e da umidade, respectivamente. Estes calores específicos serão calculados das equações $c_{p,u} = 4182 + 0,36(T - 273)$ e $c_{p,cinza} = 593,3 + 0,586T$.

A permeabilidade é uma das principais propriedades do meio poroso. Para biomassa a permeabilidade geralmente é calculada através da ponderação da permeabilidade do material sólido virgem e do resíduo carbônico, como apresentado:

$$K = \eta K_B + (1 - \eta) K_C \quad (3.91)$$

Para biomassa (madeira), valores usuais das permeabilidades são: $K_B = 10^{-2} \text{ darcy}$ e $K_C = 1 \text{ darcy}$ (Bryden & Hagge, 2003).

Para o carvão é comum colocar sua permeabilidade em função dos diâmetros dos macro-poros e dos micro-poros (Wang & Bhatia, 2001; Perkins & Sahajwalla, 2005), equação (3.92). Segundo Krishna e Wesselingh (1996) esta equação é baseada em escoamento de Poiseuille desenvolvido em poro cilíndrico.

$$K = \frac{\varepsilon_m}{\tau} \left(\frac{d_m^2}{32} \right) + \frac{\varepsilon_\mu (1 - \varepsilon_m)}{\tau} \left(\frac{d_\mu^2}{32} \right) \quad (3.92)$$

onde τ representa a tortuosidade do meio poroso. No presente estudo a permeabilidade será posta em função do diâmetro d_p e da porosidade total, ε , na forma

$$K = \frac{\varepsilon}{\tau} \left(\frac{d_p^2}{32} \right) \quad (3.93)$$

A tortuosidade será aproximada como $\tau = 1/\varepsilon$ (De Souza-Santos, 2004).

Finalizando este capítulo, é interessante verificar que no modelo proposto a difusividade de calor, $\alpha_s = k_s / [(1 - \varepsilon) \rho_s' c_{p,s}]$, é calculada totalmente em função da composição do combustível, obtida da análise elementar e imediata, e varia com a conversão de material sólido e com a temperatura. A permeabilidade e a porosidade também foram postas em função da conversão de massa. Os principais parâmetros que diferenciam os combustíveis são as constantes das taxas de consumo de combustível devido pirólise e reações heterogêneas.

4 – DESENVOLVIMENTO DO MODELO NUMÉRICO

O objetivo de um método numérico, especificamente o que será utilizado no presente trabalho, é resolver uma ou mais equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes por expressões algébricas que envolvem a função incógnita (MALISKA, 2004). Neste capítulo serão descritos os passos necessários para se alcançar objetivo supracitado. Os procedimentos utilizados para o “acoplamento pressão-velocidade”, “acoplamento entre energia fase gás - energia fase sólido” e “acoplamento energia - espécies químicas” também serão detalhados.

MÉTODOS NUMÉRICOS

A modelagem da combustão iniciou nas décadas de quarenta e cinquenta do século XX, mas com avanços limitados pela capacidade de computação e das técnicas de medida (Ragland & Borman, 1998). Os mesmos autores afirmam que resultados mais confiáveis ocorreram a partir das décadas de 1960 e 1970, em parte devido ao avanço dos computadores. Atualmente modelos teóricos bastante complexos podem ser resolvidos com as ferramentas computacionais à disposição da maioria dos centros de pesquisa e de universidades. Esta nova área do conhecimento que consiste na análise de sistemas, por computadores, envolvendo escoamento de fluidos, transferência de calor e fenômenos associados passou a ser referenciado como Dinâmica dos Fluidos Computacional (*Computational Fluid Dynamics* – CFD, Versteeg & Malalasekera, 1995). A Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC) pode ser vista como parte integrante do desenvolvimento científico e tecnológico ao lado da teoria e da experimentação. A comunidade científica brasileira se refere a esta área do conhecimento como CFD, da abreviação original do inglês.

Praticamente todos os métodos numéricos utilizados em dinâmica dos fluidos computacional podem ser derivados a partir do método dos resíduos ponderados (Patankar, 1980). O conceito do método é simples e parte da consideração da forma geral de uma equação diferencial:

$$L(\phi) = 0 \tag{iv.i}$$

Uma solução aproximada de ϕ dada por $\tilde{\phi}$ é proposta com um resíduo definido por:

$$R = L(\tilde{\phi}) \quad (\text{iv.ii})$$

O método de resíduos ponderados objetiva a minimização do resíduo tal que:

$$\int_V WRdV = 0 \quad (\text{iv.iii})$$

Onde: W é uma função peso e a integral é realizada sobre o domínio de interesse.

Através da seleção de diferentes W , diferentes métodos podem ser definidos.

Na aproximação de Galerkin, utilizada no Método de Elementos Finitos (MEF), a função peso é assumida igual à função de forma, ou de interpolação, do elemento finito (Zienkiewicz, 2000). Tradicionalmente o MEF utiliza malhas não estruturadas e sistemas de coordenadas locais. O MEF tem uma base matemática rigorosa e se mostra bastante apto para a solução de problemas difusivos e convectivos dominantes.

A função peso unitária, $W=1$, caracteriza o método de volumes finitos (MVF). Por dar significado físico à matemática e por ser conservativo em nível discreto o método de volumes de controle cresceu em popularidade e ainda é o método mais utilizado em pacotes numéricos com penetração industrial (Maliska, 2004). Descrição completa do método pode ser obtida em Maliska (2004), Versteeg e Malalasekera (1995) e Patankar (1980).

O método de volumes de controle baseado em elementos finitos (*Control Volume based Finite Element Method - CVFEM*) combina e estende os conceitos já mencionados do método de elementos finitos e do método de volumes finitos (Saabas e Baliga, 1994). O CVFEM utiliza malhas de volumes finitos não-estruturadas, construídas frequentemente pelo método das medianas a partir de malhas de elementos finitos triangulares. Além disso, por se tratar de um método de volumes finitos os princípios de conservação em termos de volumes elementares são garantidos. Trabalhos pioneiros com este método são os de Baliga e Patankar (1980), Prakash e Patankar (1985), Masson *et al.* (1994) e Saabas e Baliga (1994).

De acordo com Saabas (1991) a formulação do CVFEM envolve cinco passos básicos:

1. discretização do domínio em elementos e discretização em volumes de controle associados com os nós dos elementos;
2. definição de funções de interpolação baseadas nos elementos para as variáveis dependentes;
3. derivação de equações discretizadas, que se constituem aproximações algébricas das equações diferenciais governantes;
4. montagem elemento por elemento das equações no domínio discreto;
5. definição de um processo para resolver as equações algébricas resultantes.

Um dos grandes desafios enfrentados para a consolidação do CVFEM foi a solução segregada do acoplamento pressão-velocidade. Em Baliga e Patankar (1983), por exemplo, foi apresentada a primeira proposta de solução do acoplamento pressão-velocidade para o CVFEM, baseada na solução segregada, ou seja, separada e sequencial das equações de conservação da quantidade de movimento e massa. O método utilizava dois tipos de malhas de elementos, uma mais grossa que a outra, para evitar o aparecimento de campos oscilatórios de pressão durante o processo iterativo de solução. A pressão e a velocidade eram armazenadas, e calculadas, em dois conjuntos diferentes de elementos, chamados, respectivamente de macro e micro elementos. Segundo Prakash e Patankar (1985) este método tornava o tratamento do acoplamento pressão-velocidade bastante complexo e o uso de diferentes famílias de volumes de controle para as equações de conservação de quantidade de movimento e conservação da massa não garantiam os princípios de conservação sobre os mesmo volumes de controle para todas as variáveis transportadas. Como o método utiliza uma malha mais grossa para a pressão, o método perdia muito em precisão para problemas com saltos de pressão (Prakash & Patankar, 1985).

A proposta atualmente utilizada em CVFEM para a solução segregada do problema do acoplamento pressão-velocidade foi dada em Prakash & Patankar (1985). O modelo proposto evitava o aparecimento de campos de pressão oscilatórios quando o arranjo co-localizado de variáveis era utilizado, comuns ao método de Baliga & Patankar (1983). Resumidamente, para prevenir a ocorrência de campos de pressão oscilatórios no CVFEM, Prakash & Patankar (1985) seguiram a proposição de Rhie & Chow (1983), onde fluxo de massa era avaliado utilizando as componentes de velocidade calculadas por interpolação das equações algébricas de conservação de quantidade de movimento. Em adição, os

gradientes de pressão eram avaliados nos elementos, em detrimento aos volumes de controle. Com estas medidas a pressão e a velocidade podiam ser armazenadas nos mesmos pontos nodais e as equações de conservação de quantidade de movimento e continuidade de massa, resolvidas sequencialmente, podiam ser tornadas discretas usando o mesmo conjunto de volumes de controle.

Muita pesquisa também foi realizada visando melhorias no CVFEM, particularmente com relação às funções de interpolação utilizadas na avaliação do termo convectivo (Baliga & Patankar, 1980; Baliga & Patankar, 1983; Baliga *et al.*, 1983; Prakash e Patankar, 1985; Hookey *et al.*, 1988; Hookey & Baliga, 1988; e Masson *et al.*, 1994). As funções de interpolação são fundamentais para que o método numérico seja bem sucedido, pois para realização das integrações sobre os volumes de controle é necessário o conhecimento aproximado da variação das incógnitas sobre o domínio de cálculo.

A primeira função de interpolação proposta para modelar o termo convectivo, no CVFEM, foi apresentada em Baliga e Patankar (1980). Esta função de interpolação era baseada na solução particular de uma equação de convecção-difusão unidimensional sobre um elemento de interesse e respondia automaticamente ao número de Peclet do elemento, que é um indicador da razão entre convecção e difusão no elemento. Esta função foi chamada pelos autores de *Flow Oriented interpolation* - FLO. Conforme Saabas e Baliga (1994) a função FLO evita o aparecimento de instabilidades numéricas para problemas convectivos dominantes e, segundo Patankar (1980), o alinhamento do sistema coordenado local com escoamento médio sobre o elemento contribuía para a redução da difusão numérica. Nos primeiros artigos sobre o CVFEM os autores recomendavam o uso da função FLO para cálculo da variação das incógnitas nos termos de difusão.

Com o objetivo de melhorar o CVFEM, para escoamentos onde os termos de fonte fossem importantes, Prakash (1986) propôs uma função FLO que considerava explicitamente os efeitos dos termos de fonte nas interpolações. Esta função foi referenciada pelo autor como *Flow Oriented interpolation with Sources effects* - FLOS. A função foi testada para o caso do escoamento induzido no interior de uma cavidade quadrada, o caso do escoamento induzido entre cilindros concêntricos e o caso de convecção natural no interior de uma cavidade quadrada. Segundo o autor, a função FLOS conduzia a resultados mais precisos que outras funções similares. Adicionalmente, seu uso, na equação de conservação da massa, permitia que a velocidade e a pressão fossem computadas nos mesmos pontos nodais. Nesta época, muitos esforços foram empreendidos

na busca de funções de interpolação gerais que respondessem pelos efeitos difusivos, convectivos e de fonte.

No trabalho de Saabas e Baliga (1994), apresentou-se um estudo detalhado sobre esquemas de interpolação. Os autores verificaram que mesmo em casos onde os efeitos dos termos de fonte eram importantes a função FLOS não fornecia resultados melhores que a função FLO. Além disso, os autores recomendaram o uso da função de interpolação linear para avaliação do termo difusivo e o uso da função FLO somente no cálculo do termo convectivo. Com isso, a ideia do uso de uma única função de interpolação para tratar de todos os termos da equação de convecção difusão foi praticamente abandonada no CVFEM e a forma final da função FLO, utilizada apenas no termo convectivo, foi consolidada.

Mais recentemente, em Abbassi *et al.* (2003), foi relatado que a função de interpolação FLO não deveria ser utilizada em casos de escoamentos laminares. Segundo os autores a melhor escolha seria o esquema de interpolação linear nos termos convectivos, apesar desta função não levar em conta a natureza parabólica de tal termo. O estudo apresentado por Abbassi *et al.* (2003) não poderia ser conclusivo, uma vez que apenas um número reduzido de problemas foi estudado.

Além do escoamento de fluidos em meios abertos o CVFEM já foi utilizado na predição de escoamento em meios conjugados. Foram Costa *et al.* (2004) que mostraram que o CVFEM, desenvolvido primariamente para predição de escoamentos em domínios abertos, podia ser utilizado sem nenhuma modificação especial para a solução do problema de escoamentos em meios conjugados. Segundo os autores, se as equações de Brinkman-Forchheimer forem utilizadas, a continuidade de massa e a conservação de quantidade de movimento através da interface entre os domínios serão satisfeitas de modo direto no CVFEM, sem qualquer tratamento adicional.

Para maiores informações, revisões completas do CVFEM para escoamento de fluidos viscosos, em domínios de formas irregulares, bidimensionais (plano e axissimétrico) e tridimensionais estão disponíveis nos trabalhos de Hookey (1989), Masson *et al.* (1994), Saabas e Baliga (1994).

4.1 – DIVISÃO DE OPERADORES

Em combustão, oxidante e combustível são rapidamente convertidos em produtos. Nesta região do domínio, os termos de fonte de espécies químicas e de calor são predominantes nas respectivas equações de conservação. Esse domínio do termo de fonte e

sua rápida variação temporal dificultam muito a solução das equações de conservação de interesse prático. Pelo exposto, uma técnica numérica que dê ênfase para a característica do acoplamento entre espécies e energia é necessária. A partir de uma revisão na literatura verificou-se que a técnica de divisão de operações pode ser aplicada na solução de problemas com forte acoplamento entre calor e massa. Com a divisão de operadores o problema original é dividido em passos fracionados, que podem ser mais facilmente manipuláveis, uma vez que em cada passo fracionado uma técnica numérica diferente pode ser utilizada. Segundo Orlandi (1999) um dos trabalhos pioneiros na proposição desse método é o de Yanenko (1971). Outras variantes de divisão de operadores estão disponíveis na literatura, com destaque para aquela sugerida por Strang (1968).

Sportisse (2000) sugere que em problemas que apresentam algum grau de rigidez, o operador rígido para este caso deve ser avaliado depois na sequência de divisão para aumentar a precisão relativa do método. Com base nisto, para o caso de combustão propõe-se utilizar um passo fracionado de transporte devido convecção e difusão, $\phi_{\text{transp},t0}^{\text{reação},t0} \xrightarrow{\text{transporte}} \phi_{\text{transp},t0+\Delta t}^{\text{reação},t0}$, seguido por um passo fracionado de reação química, o operador rígido neste caso, $\phi_{\text{transp},t0+\Delta t}^{\text{reação},t0} \xrightarrow{\text{reação}} \phi_{\text{transp},t0+\Delta t}^{\text{reação},t0+\Delta t}$. Esta proposta será chamada de **Aproximação Sequencial Não Iterativa (ASNI)** e pode ser colocada simplesmente como:

$$\phi_{\text{transp},t0}^{\text{reação},t0} \xrightarrow{\text{transporte}} \phi_{\text{transp},t0+\Delta t}^{\text{reação},t0} \xrightarrow{\text{reação}} \phi_{\text{transp},t0+\Delta t}^{\text{reação},t0+\Delta t}$$

Para o caso que se pretende simular as equações podem ser postas como:

Passo fracionado 1, obtenção de $\phi_{\text{transp},t0+\Delta t}^{\text{reação},t0}$ a partir de $\phi_{\text{transp},t0}^{\text{reação},t0}$:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\epsilon \rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k) = \nabla \cdot (\epsilon \mathbf{J}_k) \quad (\text{iv.iv})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\epsilon \rho T_g) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} T_g) = \nabla \cdot \left(\epsilon \frac{k_g}{c_{p,g}} \nabla T_g \right) - \frac{\epsilon \nabla \cdot (\sum_{k=1}^{N_{sp}} h_k \mathbf{J}_k)}{c_{p,g}} - \frac{h S_t (T_s - T_g)}{c_{p,g}} \quad (\text{iv.v})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [(1 - \epsilon) \rho_s' T_s] = \nabla \cdot \left[(1 - \epsilon) \frac{k_s}{c_{p,s}} \nabla (T_s) \right] + \frac{Q_{rad}}{c_{p,s}} - \frac{h S_t (T_g - T_s)}{c_{p,s}} + \frac{S_{TS}}{c_{p,s}} \quad (\text{iv.vi})$$

Passo fracionado 2, obtenção $\phi_{\text{transp},t0+\Delta t}^{\text{reação},t0+\Delta t}$ a partir de $\phi_{\text{transp},t0+\Delta t}^{\text{reação},t0}$:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \rho Y_i) = \varepsilon \dot{\omega}_{g,k} \quad (\text{iv.vii})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \rho T_g) = - \frac{\varepsilon \sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_{g,k} h_k}{c_{p,g}} \quad (\text{iv.viii})$$

Deve-se observar que em todas as equações do passo fracionado 2 as variáveis só se modificam com o tempo, ou seja, são diferenciais ordinárias.

As equações do passo fracionado 1 (com termo de convecção, difusão e fontes, exceto de reação química) serão resolvidas implicitamente com a discretização do CVFEM. As equações do passo fracionado 2 (com termo de fonte de reação química) serão resolvidas com o método de Runge-Kutta explícito de quarta ordem. Tendo conhecimento que a escala de tempo que caracteriza a reação química é bem menor que a escala de tempo que caracteriza tanto difusão como convecção, no passo fracionado 2 ϕ passará de $\phi_{\text{transp},t0+\Delta t}^{\text{reação},t0}$ para $\phi_{\text{transp},t0+\Delta t}^{\text{reação},t0+\Delta t}$ através de uma série de sub-passos de Δt , representados por $\Delta t/n$, onde “n” será um número inteiro maior que a unidade. O passo $\Delta t/n$ deverá ser pequeno o suficiente para estabilizar e garantir precisão a solução numérica.

Segundo Hayashi (2005), para o tipo de divisão de operadores apresentada anteriormente, o método de divisão de operadores apresenta precisão de primeira ordem e é incondicionalmente estável se as partes divididas forem matrizes definidas e não negativas.

A seguir será apresentada a metodologia numérica de solução das equações diferenciais parciais.

4.2 – FORMA GERAL DAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO

A equação de conservação de um escalar qualquer ϕ , incluído os termos associados ao meio poroso, pode ser representada pela equação (4.1). Tal equação é definida sobre o domínio $\Omega \subset R^2$, limitado pela superfície $\partial\Omega$, conforme ilustra a figura 4.1.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\beta_3 \rho \phi) + \nabla \cdot (\beta_1 \rho \mathbf{u}^m \phi) = \nabla \cdot (\beta_2 \Gamma^\phi \nabla \phi) + S^\phi \quad (4.1)$$

Onde: t é o tempo, \mathbf{u}^m é o vetor velocidade, ρ é a massa específica, Γ_ϕ é o coeficiente difusivo, S^ϕ representa o termo fonte, que engloba todos os termos que não podem ser

acomodados no termo convectivo e nem no difusivo. Os termos β_2 e β_1 foram introduzidos para contabilizar a porosidade e a omissão do termo convectivo da equação (4.1) necessária para representação de todas as equações de conservação.

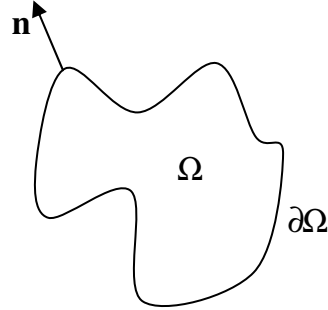


Figura 4.1 - Ilustração esquemática do domínio Ω , de sua superfície $\partial\Omega$ e do vetor \mathbf{n} , apontado para fora de Ω e normal ao contorno $\partial\Omega$.

Somente condições de contorno do tipo Dirichlet e do tipo Neumann serão consideradas para solução da equação (4.1), respectivamente dadas por:

$$\begin{aligned} \phi &= \phi_0 & \text{em} & \partial\Omega_d \\ \nabla\phi \cdot \mathbf{n} &= \left(\frac{\partial\phi}{\partial n}\right)_0 & \text{em} & \partial\Omega_n \end{aligned}$$

Onde: $\partial\Omega = \partial\Omega_d \cup \partial\Omega_n$, $\partial\Omega_d \cap \partial\Omega_n = \emptyset$. Os valores ϕ_0 e $\left(\frac{\partial\phi}{\partial n}\right)_0$ são conhecidos

As formas específicas da equação (4.1) são apresentadas na tabela 4.1.

Tabela 4.1 - Formas da equação de conservação de ϕ .

Equação	β_1	β_2	β_3	ϕ	Γ_ϕ	ρ	S_ϕ
Continuidade	1	1	ε	1	0	ρ	$\varepsilon \sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_{s,k}$
Momentum -x	$1/\varepsilon^2$	$1/\varepsilon$	$1/\varepsilon$	u	μ_e	ρ	S_{mom}^x
Momentum -y	$1/\varepsilon^2$	$1/\varepsilon$	$1/\varepsilon$	v	μ_e	ρ	S_{mom}^y
Energia fase gasosa	1	ε	ε	T_g	$k_g/c_{p,g}$	ρ	$S_f^T/c_{p,g}$
Energia fase sólida	0	$(1-\varepsilon)$	$(1-\varepsilon)$	T_s	$k_s/c_{p,s}$	ρ_s^l	$S_s^T/c_{p,s}$
Espécies químicas	1	ε	ε	Y_k	D_{eff}	ρ	0

Os termos de fonte das equações de conservação de quantidade de movimento são:

$$S_{mom}^x = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_g \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{r^a} \frac{\partial}{\partial y} \left(r^a \mu_g \frac{\partial v}{\partial x} \right) + (\rho - \rho_0) g_x + D_x$$

$$S_{mom}^y = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_g \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{1}{r^a} \frac{\partial}{\partial y} \left(r^a \mu_g \frac{\partial v}{\partial y} \right) - a \frac{2\mu v}{r^2} + D_y$$

O termo $(\rho - \rho_0)g_x$, em S_{mom}^x , representa o empuxo decorrente da variação de massa específica. Neste termo o parâmetro ρ_0 representa uma massa específica de referência e g_x é a aceleração da gravidade, considerada somente na direção x (ou z).

As componentes de arrasto da matriz sólida, em S_{mom}^x e S_{mom}^y , são dadas como:

$$D_x = -\left(\frac{\mu_g}{K} + \frac{1,75}{\sqrt{150}} \frac{\rho}{\sqrt{K}} \frac{|\mathbf{u}|}{\varepsilon^{3/2}} \right) u_x \quad \text{e} \quad D_y = -\left(\frac{\mu_g}{K} + \frac{1,75}{\sqrt{150}} \frac{\rho}{\sqrt{K}} \frac{|\mathbf{u}|}{\varepsilon^{3/2}} \right) u_y$$

Termo de fonte da equação de conservação da energia da fase gasosa:

$$S_f^T = -\varepsilon \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^{N_{sp}} h_k \mathbf{J}_k \right) - h S_t (T_s - T_g)$$

Termo de fonte da equação de conservação da energia da fase sólida:

$$S_s^T = -h S_t (T_g - T_s) + Q_{rad} + S_{TS}$$

Para o sistema coordenado cartesiano $a = 0$, e para o sistema cilíndrico $a = 1$ e nos índices trocar x por z e y por r.

4.3 – DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL

As localizações discretas nas quais as variáveis são calculadas são definidas por uma malha numérica que é essencialmente uma representação discreta do domínio geométrico no qual o problema é resolvido (Ferziger & Peric, 2002). Um dos tipos de malhas numéricas mais versáteis é a não-estruturada, pois pode ser aplicada a geometrias complexas, possibilita refinamentos locais e os elementos, ou volumes de controle, podem

ter qualquer forma. Como principais características das malhas não-estruturadas citam-se; a localização (i) e conexão (ii) dos nós vizinhos devem ser especificadas de forma explícita.

Baseado nos trabalhos Baliga e Patankar (1980), Prakash e Patankar (1985), Masson *et al.* (1994), Saabas e Baliga (1994), Costa *et al.* (2004) o CVFEM utilizado neste trabalho emprega malhas não-estruturadas, construídas com base em elementos triangulares de três nós, geralmente gerados por triangulação de Delaunay. A malha de volumes de controle é obtida a partir da malha de elementos através do método das medianas, que consiste basicamente na definição de subvolumes de controle, internos aos elementos, através da ligação de pontos localizados no baricentro dos elementos aos pontos médios das faces dos elementos (figura 4.2(a)). O volume de controle poligonal é então formado pela união de vários subvolumes de controle que compartilham um mesmo nó. É neste nó central que as variáveis dependentes são armazenadas (figura 4.2(b)). Pelo modo como os volumes são formados, isto é, centrados nos nós, os pontos nodais podem ser considerados entes geométricos representativos dos volumes finitos. Um aspecto desejável do método das medianas é que os elementos triangulares são divididos em três subtriângulos de áreas idênticas.



Figura 4.2 - Elemento triangular e volume de controle obtido pelo método das medianas.

A rotação da seção plana bidimensional (2π radianos) em torno do eixo de simetria resulta na discretização do domínio de cálculo axissimétrico, com elementos toroidais de seção transversal triangular e volumes de controle toroidais de seção transversal poligonal. No presente trabalho os elementos e os volumes toroidais serão referenciados simplesmente como elementos e volumes de controle, respectivamente.

4.4 – FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO

No CVFEM os procedimentos de interpolação são realizados, tradicionalmente, sobre a malha de elementos finitos. As funções de interpolação geralmente são expressas em termos de um sistema de coordenadas local (x,y) , baseado no elemento, e devem permitir o conhecimento de ϕ e suas derivadas dentro do elemento triangular a partir do conhecimento de ϕ nos vértices dos elementos. Tanto quanto as variáveis dependentes, propriedades termofísicas e termos de fonte nos elementos finitos também devem ser obtidos no interior dos elementos, via interpolação. Três tipos de função de interpolação serão utilizadas neste trabalho. Duas funções de interpolação são tradicionalmente utilizadas no CVFEM, são elas: a função de interpolação linear e a função interpolação FLO (exponencial). Neste trabalho é proposto uma nova função de interpolação (Cunha et al. 2010). Para isso as funções de interpolação supracitadas são expressas em termos de suas funções de base.

4.4.1 – Função de Interpolação Linear

Uma maneira de se obter os valores de ϕ no elemento é através de interpolação linear. Esta função é geralmente utilizada na aproximação dos termos difusivos, por representar de maneira adequada a natureza elíptica de tal termo e apresentar uma aproximação de segunda ordem dos valores nodais de ϕ (Ferziger & Peric, 2002). A função de Interpolação Linear, LI, pode ser escrita como:

$$\phi_L = A^L X + B^L Y + C^L \quad (4.2)$$

Parâmetros geométricos e os valores de ϕ nos três pontos nodais do elemento são utilizados para determinação das constantes da equação da seguinte forma:

$$A^L = [Y_{23}\phi_1 + Y_{31}\phi_2 + Y_{12}\phi_3] / D^L \quad (4.3)$$

$$B^L = [X_{32}\phi_1 + X_{13}\phi_2 + X_{21}\phi_3] / D^L \quad (4.4)$$

$$C^L = [(X_2Y_3 - X_3Y_2)\phi_1 + (X_3Y_1 - X_1Y_3)\phi_2 + (X_1Y_2 - X_2Y_1)\phi_3]/D^L \quad (4.5)$$

$$D^L = X_2Y_3 - X_3Y_2 + X_3Y_1 - X_1Y_3 + X_1Y_2 - X_2Y_1 \quad (4.6)$$

Onde: $Y_{ij} = Y_i - Y_j$ e $X_{ij} = X_i - X_j$

As derivadas de ϕ são dadas por: $\frac{\partial \phi_L}{\partial X} = A^L$ e $\frac{\partial \phi_L}{\partial Y} = B^L$.

Além da forma dada pela equação (4.2) a função de interpolação linear também pode ser apresentada em termos de suas funções de base da seguinte maneira:

$$\phi_L = N_1^L \phi_1 + N_2^L \phi_2 + N_3^L \phi_3 \quad (4.7)$$

$$\text{Com : } N_1^L = [Y_{23}X + X_{32}Y + (X_2Y_3 - X_3Y_2)]/D^L \quad (4.8)$$

$$N_2^L = [Y_{31}X + X_{13}Y + (X_3Y_1 - X_1Y_3)]/D^L \quad (4.9)$$

$$N_3^L = [Y_{12}X + X_{21}Y + (X_1Y_2 - X_2Y_1)]/D^L \quad (4.10)$$

Onde: N_1^L , N_2^L e N_3^L são as funções de base, ou neste caso de forma do elemento.

4.4.2 – Função de Interpolação FLO (FLOw Oriented interpolation)

A função de interpolação conhecida como *FLOw Oriented interpolation* (FLO) foi originalmente proposta por Baliga e Patankar (1980), é baseada na solução particular de uma equação de convecção-difusão sobre um elemento de interesse e responde automaticamente ao número de Peclet do elemento, que neste caso é um indicador da razão entre convecção e difusão no elemento. A função é baseada num sistema de coordenadas local (x,y) posicionado no interior do elemento, figura 4.2(a), cuja direção X é alinhada com o escoamento médio do elemento. Conforme Saabas e Baliga (1994) esta função evita aparecimento de instabilidades numéricas para problemas convectivos dominantes. Além disso, segundo Patankar (1980), o alinhamento do sistema coordenado com escoamento

médio contribui para a redução da difusão numérica. O esquema de interpolação FLO é tradicionalmente apresentado da seguinte forma:

$$\phi_F = A^F \xi + B^F Y + C^F \quad (4.11)$$

A variável ξ é definida como:

$$\xi = \frac{\Gamma_\phi}{\rho U_{Pe}} \left\{ \exp \left[\frac{Pe(X - X_{\max})}{X_{\max} - X_{\min}} \right] - 1 \right\}$$

O número de Peclet do elemento é definido como $Pe = \rho U_{Pe} (X_{\max} - X_{\min}) / \Gamma_\phi$, nesta expressão $X_{\max} = \max(X_1, X_2, X_3)$ e $X_{\min} = \min(X_1, X_2, X_3)$.

Ao invés de se utilizar U_{Pe} igual à velocidade média do elemento, $|\vec{u}_{av}| = u_{av} = \sqrt{u_m^2 + v_m^2}$, como é feito tradicionalmente na metodologia CVFEM, neste trabalho o parâmetro U_{Pe} levará em consideração o possível efeito do comprimento médio do elemento na direção do escoamento em Pe , sendo avaliado da seguinte forma:

$$U_{Pe} = u_{av} A_{tri} / A_{ret} \quad (4.12)$$

onde A_{tri} é a área do elemento triangular e $A_{ret} = (X_{\max} - X_{\min})(Y_{\max} - Y_{\min})$, com $Y_{\max} = \max(Y_1, Y_2, Y_3)$ e $Y_{\min} = \min(Y_1, Y_2, Y_3)$. A base para o cálculo de U_{Pe} pela equação (4.12) será apresentada no próximo tópico.

Deve-se notar que a função de interpolação FLO não garante continuidade de ϕ através dos contornos dos elementos, exceto nos nós. Entretanto, em qualquer elemento a função FLO torna-se linear e contínua para $Pe \rightarrow 0$ (Saabas & Baliga, 1994).

Como no caso da função linear, os valores de ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3 dos pontos nodais podem ser utilizados para determinação das constantes da equação (4.11):

$$A^F = [Y_{23}\phi_1 + Y_{31}\phi_2 + Y_{12}\phi_3] / D^F \quad (4.13)$$

$$B^F = [\xi_{32}\phi_1 + \xi_{13}\phi_2 + \xi_{21}\phi_3] / D^F \quad (4.14)$$

$$C^F = [(\xi_2 Y_3 - \xi_3 Y_2)\phi_1 + (\xi_3 Y_1 - \xi_1 Y_3)\phi_2 + (\xi_1 Y_2 - \xi_2 Y_1)\phi_3] / D^F \quad (4.15)$$

$$D^F = \xi_1 Y_2 + \xi_2 Y_3 + \xi_3 Y_1 - Y_1 \xi_2 - Y_2 \xi_3 - Y_3 \xi_1 \quad (4.16)$$

onde, $Y_{ij} = Y_i - Y_j$ e $\xi_{ij} = \xi_i - \xi_j$.

A função de interpolação FLO também pode ser apresentada em termos de suas funções de base da seguinte forma

$$\phi_F = N_1^F \phi_1 + N_2^F \phi_2 + N_3^F \phi_3, \quad (4.17)$$

onde $N_1^F = [Y_{23}\xi + \xi_{32}Y + (\xi_2 Y_3 - \xi_3 Y_2)] / D^F$, (4.18)

$$N_2^F = [Y_{31}\xi + \xi_{13}Y + (\xi_3 Y_1 - \xi_1 Y_3)] / D^F , \quad (4.19)$$

$$e N_3^F = [Y_{12}\xi + \xi_{21}Y + (\xi_1 Y_2 - \xi_2 Y_1)] / D^F \quad (4.20)$$

O vetor velocidade e a sua magnitude são calculados como:

$$\vec{u}_{av} = u_m \mathbf{i} + v_m \mathbf{j} \quad (4.21)$$

$$|\vec{u}_{av}| = u_{av} = \sqrt{u_m^2 + v_m^2} \quad (4.22)$$

onde u_m e v_m são as componentes de velocidade média do elemento nas direções x e y, respectivamente, obtidas por média aritmética das velocidades nodais:

$$u_m = \frac{1}{3}(u_1 + u_2 + u_3) \text{ e } v_m = \frac{1}{3}(v_1 + v_2 + v_3).$$

As coordenadas locais, orientadas pelo escoamento, são calculadas como:

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \frac{1}{u_{av}} \begin{bmatrix} u_m & v_m \\ -v_m & u_m \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x - x_o \\ y - y_o \end{pmatrix}$$

onde x_o e y_o são as coordenadas do ponto “o” do elemento 123 no sistema global.

A derivada de ϕ_F em relação à “y” é obtida diretamente: $\frac{\partial \phi_F}{\partial Y} = B^F$. Já a derivada de ϕ_F em relação à “x” é dada como $\frac{\partial \phi_F}{\partial X} = A^F \frac{\partial \xi}{\partial X}$. Através da introdução da expressão de ξ na derivada $\frac{\partial \xi}{\partial X}$ e depois de alguma manipulação algébrica encontra-se $\frac{\partial \phi_F}{\partial X} = A^F \left(\frac{\rho U_{Fv}}{\Gamma_\phi} \xi + 1 \right)$.

4.4.3 – Função de Interpolação Mista (Proposta)

Antes de anunciar a proposta de função de interpolação mista alguns argumentos serão apresentados em seu favor.

Considerando a equação de convecção-difusão dada: $\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}^m \phi) = \nabla \cdot (\Gamma^\phi \nabla \phi)$, quando se utiliza o CVFEM, ou qualquer outro método numérico, é necessário aproximar a variação de ϕ no domínio de interesse para que se possa proceder com a integração da equação de convecção-difusão. No termo de difusão, ϕ geralmente é calculado através de interpolação linear. Contudo, quando é utilizada uma função linear para aproximar a variação de ϕ no termo convectivo as soluções, quando obtidas, apresentam oscilações de ϕ no domínio que se amplificam na medida em que o número de Peclet aumenta. Por conta disto, ϕ é aproximado no termo de convecção através de função dita *upwind*, que respondem pela natureza parabólica do termo convectivo e produzem soluções estáveis para qualquer número de Peclet.

Além de ϕ o produto $\rho \mathbf{u}^m$ também precisa ser interpolado. No caso de ρ ser constante e ϕ representar a massa, quando $\phi=1$, somente a velocidade necessita de interpolação. Em Prakash e Patankar (1985) é sugerido, como primeira aproximação, que a velocidade \mathbf{u}^m seja interpolada linearmente. Porém, se \mathbf{u}^m for interpolada linearmente na equação da conservação da massa, por coerência, esta também deve ser interpolada de igual modo na equação da conservação de quantidade de movimento e desta maneira para qualquer ϕ . Será, contudo, a interpolação linear de \mathbf{u}^m é a mais coerente?

Considerando a equação de conservação de quantidade de movimento em regime permanente $\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}^m) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u})$, propositalmente as velocidades são denotadas de forma diferente, enfatizando que \mathbf{u}^m é responsável pelo transporte enquanto \mathbf{u} é a quantidade transportada. A partir desta diferenciação surge uma inconsistência. Prakash e Patankar (1985) sugeriram interpolação linear de \mathbf{u}^m , mas como já foi mencionado \mathbf{u} deve ser interpolada por uma função de natureza *upwind* para se evitar oscilação de \mathbf{u} no domínio. Contudo, no termo convectivo da equação de momentum, não é possível diferenciar \mathbf{u}^m de \mathbf{u} , pois as duas são essencialmente de mesma natureza. Para minimizar, ou mesmo eliminar, a inconsistência verificada com relação à interpolação de velocidade, propõe-se neste trabalho um novo procedimento de interpolação, que consiste na definição das componentes da velocidade de convecção de massa como uma combinação das velocidades obtidas pelas funções de interpolação FLO (*upwind*) e LI:

$$u^m = \alpha_p u^F + (1 - \alpha_p) u^L \quad (4.23)$$

Fazendo as substituições das funções de interpolação linear e exponencial em termos de suas funções de base, equações (4.7) e (4.17). As funções de interpolação podem ser combinadas em termos de suas funções de base. O fator α_p pode ser utilizado para ponderar as contribuições das funções na avaliação de u^m no elemento. Ambas as funções de base serão calculadas com base no sistema de coordenadas do elemento. Deste modo as componentes de velocidade podem ser obtidas como:

$$u^m = N_1^m u_1 + N_2^m u_2 + N_3^m u_3 \quad (4.24)$$

onde $N_1^m = \alpha_p N_1^F + (1 - \alpha_p) N_1^L$, $N_2^m = \alpha_p N_2^F + (1 - \alpha_p) N_2^L$ e $N_3^m = \alpha_p N_3^F + (1 - \alpha_p) N_3^L$

Considerando a equação de conservação de quantidade de movimento, se $\alpha_p = 1$ a função de interpolação FLO será utilizada tanto para interpolar \mathbf{u}^m quanto \mathbf{u} . Já para $\alpha_p = 0$ a \mathbf{u}^m é interpolada linearmente, como proposto por Prakash e Patankar (1985). O uso de $\alpha_p = 1$ não produz soluções melhores que $\alpha_p = 0$ se o número de Peclet no elemento finito for grande para o CVFEM posto atualmente. Depois de alguma

investigação (Cunha et al., 2010) verificou-se que se a avaliação ∇p no volume de controle, a partir de ∇p nos elementos, fosse melhorada, os resultados melhorariam consideravelmente para $\alpha_p = 1$. Continuando a investigação, também foi constatado que se o comprimento de base para o cálculo do número de Peclet fosse o comprimento médio do elemento, os resultados para $\alpha_p = 1$ seriam ainda melhores. Com base em diversas simulações, constatou-se que os melhores resultados para o cálculo do campo de escoamento eram obtidos quando $0,5 < \alpha_p \leq 1$, indicando que a função linear não é exatamente a melhor escolha ($\alpha_p = 0$). Sempre que possível deve-se utilizar α_p mais próximo da unidade, como será mostrado na seção de validação do presente trabalho.

4.4.4 – Interpolação das Propriedades Termofísicas.

Assim como as variáveis dependentes, todas as propriedades termofísicas serão inicialmente avaliadas sobre os pontos nodais. No caso do termo de fluxo de convecção-difusão, a massa específica e o coeficiente de difusão serão calculados nos pontos de integração através de interpolação linear. Já no caso do termo transiente e de fonte as propriedades podem ser armazenadas nos volumes de controle, figura 4.3(a), ou nos elementos, figura 4.3(b).

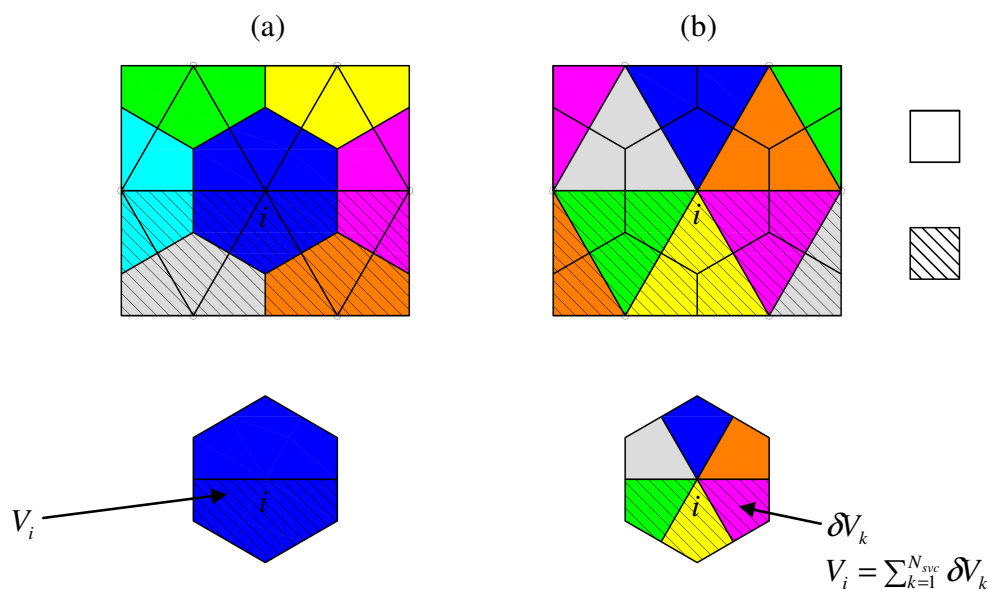


Figura 4.3 - Armazenamento das propriedades: (a) nos volumes e (b) nos elementos.

O armazenamento das propriedades nos volumes de controle, como ilustrado na figura 4.3(a), exige um procedimento de média apropriado para avaliação das descontinuidades destas nas interfaces entre os domínios aberto e poroso. Nesta situação a média harmônica é recomendada por alguns autores (Patankar, 1980), que alegam coerência física principalmente no caso unidimensional. Porém, de acordo com Maliska (2004), uma boa alternativa no método CVFEM é o armazenamento das propriedades nos elementos, figura 4.3(b). Desta forma, o volume de controle poderá ser composto de materiais diversos, mas nas interfaces não existirão materiais distintos.

A proposta de armazenamento das propriedades nos elementos será adotada neste trabalho. Será assumido que o valor das propriedades avaliadas na origem do sistema de coordenadas local prevalece sobre o elemento e os valores das propriedades nos volumes de controle serão então obtidos através da seguinte equação:

$$\bar{\gamma}_i = \frac{1}{V_i} \sum_{k=1}^{N_{svc}} (\gamma_k^i \delta V_k^i) \quad (4.25)$$

onde $\bar{\gamma}_i$ é uma propriedade média no volume de controle centrado no nó i , γ_k^i é o valor da propriedade armazenada em um elemento k , N_{svc} é o número de elementos que compartilham o nó i , δV_k^i é o subvolume de controle associado ao nó i e V_i é o volume associado ao nó i . A permeabilidade absoluta, a porosidade e a massa específica do sólido são algumas das propriedades que serão armazenadas nos elementos e calculadas nos volumes pela equação (4.25).

Comprimento característico para o elemento triangular (Proposta)

Para definição de um novo comprimento característico (Cunha & Veras, 2010) para uso no CVFEM será considerada a linha de corrente de um escoamento e a discretização com elementos triangulares do domínio adjacente a esta linha, como apresentado na figura 4.4. Adicionalmente, será traçada uma segunda linha de corrente formada por segmentos, cujo comprimento corresponderá ao valor médio dos segmentos internos ao elemento triangular na direção do escoamento. Verifica-se que o comprimento da linha de corrente formada pelos comprimentos médios possui aproximadamente o mesmo comprimento da linha de corrente contínua, logo o emprego destes comprimentos para o cálculo no número de Peclet parece ser mais consistente do que o comprimento utilizado tradicionalmente no

CVFEM (os $L_{x,i}$ apresentados junto aos elementos na figura 4.4). Além disso, a soma dos comprimentos $L_{m,i}$ se aproxima mais do comprimento da linha de corrente do que a soma dos comprimentos $L_{x,i}$. Por isso, no presente trabalho os $L_{m,i}$ serão tomados como comprimento característico para o elemento triangular.

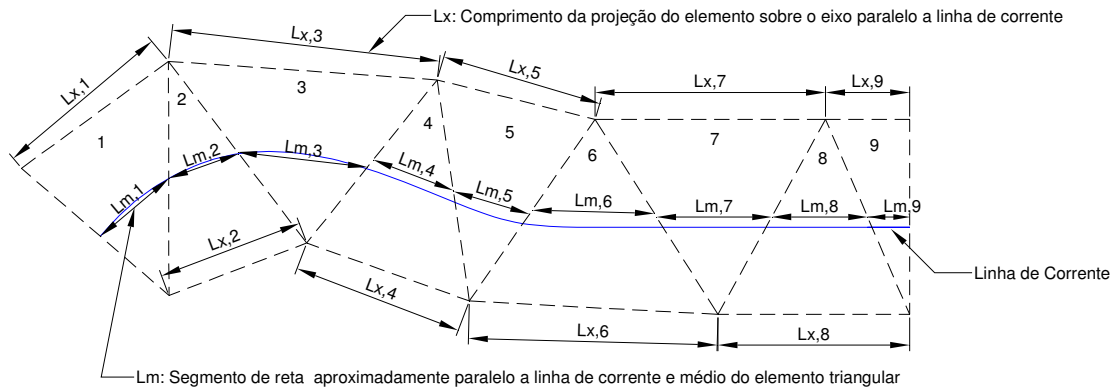


Figura 4.4 - Linhas de corrente, discretização do espaço próximo e linha de corrente aproximada. $L_{m,i}$: comprimento médio proposto. $L_{x,i}$: comprimento tradicionalmente utilizado no CVFEM.

Baseado no elemento triangular apresentado na figura 4.4, a metodologia de cálculo do comprimento médio do elemento é apresentada a seguir.

Na figura 4.5 um mesmo elemento triangular é apresentado três vezes, numa mesma posição, mas são consideradas diferentes direções para o vetor velocidade. Um sistema local de coordenadas é posicionado no centroide do elemento, com a componente-x alinhada com a velocidade. Os comprimentos das projeções do elemento sobre eixos X e Y, L_x e L_y , respectivamente, também são mostradas na figura 4.5.

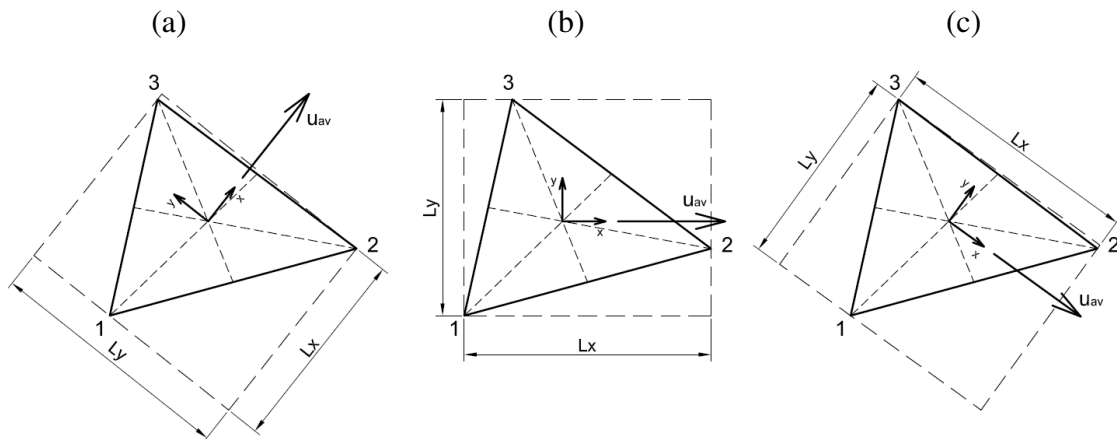


Figura 4.5 - Elemento triangular.

Isolando o elemento da figura 4.5(b), pode-se considerar que a área do elemento triangular é formada por uma infinidade de segmentos de reta paralelos a velocidade média, tais como os segmentos mostrados na figura 4.6(a). Apesar desta infinidade de segmentos, para cada direção do vetor velocidade pode-se calcular um comprimento médio correspondente.

Como os comprimentos dos segmentos de reta variam linearmente no interior do elemento triangular, o segmento correspondente ao comprimento médio pode ser calculado exatamente através da média aritmética de dois comprimentos, um inicial e outro final. Com o objetivo de definir estes comprimentos, o segmento de maior comprimento do triângulo é destacado na figura 4.6(a) e rotulado de $2L_m$. Neste caso específico, que é o mais geral, tal segmento de reta divide o triângulo em duas partes. Tomando $2L_m$ como comprimento inicial para os dois subtriângulos, nota-se que para ambos este comprimento se reduz linearmente até o limite em que é nulo. Assim, o comprimento médio de cada subtriângulo é obtido simplesmente pela divisão do comprimento $2L_m$ por dois, ou seja, o comprimento médio dos segmentos é igual à L_m e este comprimento obviamente também é o comprimento médio do triângulo principal.

Para qualquer elemento triangular o segmento de maior comprimento, $2L_m$, pode ser facilmente calculado do seguinte modo: Os subtriângulos apresentados na figura 4.6(a) podem ser posicionados de maneira a formar um paralelogramo definido pelos parâmetros $2L_m$ e L_y , figura 4.6(b). Fica evidente que a área do triângulo é exatamente igual à metade da área do paralelogramo: $A_{tri} = (2L_m L_y) / 2$.

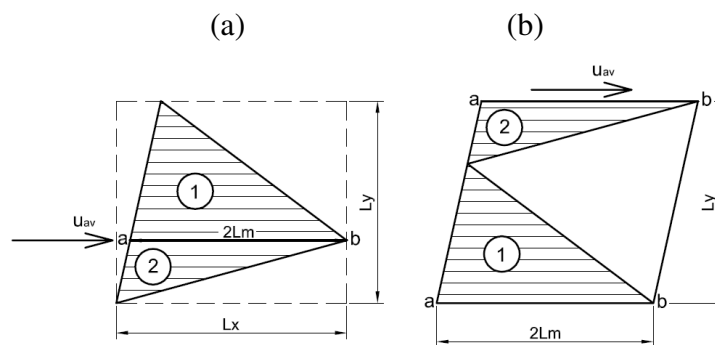


Figura 4.6 - Definição do comprimento $2L_m$ e reposicionamento dos subtriângulos 1 e 2.

Assim o comprimento do segmento de maior comprimento interno ao triângulo pode ser calculado como:

$$2L_m = (2A_{tri})/L_Y \quad (4.26)$$

Pode-se combinar a equação (4.26) com a equação da área do retângulo definido pelos comprimentos L_X e L_Y , linha tracejada na figura 4.6(a), $A_{ret} \equiv L_Y L_X$, obtendo finalmente a seguinte equação para cálculo do comprimento médio do elemento triangular:

$$L_m = L_X (A_{tri}/A_{ret}) \quad (4.27)$$

Todos os termos das equações (4.26) e (4.27) são conhecidos ou facilmente calculados, como, por exemplo, a área do triângulo e os comprimentos das projeções do elemento sobre eixos X e Y :

$$A_{tri} = \frac{1}{2}(X_1 Y_2 + X_2 Y_3 + X_3 Y_1 - Y_1 X_2 - Y_2 X_3 - X_3 X_1). \quad (4.28)$$

$$L_X = \max(X_1, X_2, X_3) - \min(X_1, X_2, X_3) \quad (4.29)$$

$$L_Y = \max(Y_1, Y_2, Y_3) - \min(Y_1, Y_2, Y_3) \quad (4.30)$$

Os X_i e Y_i representam as coordenadas dos vértices dos elementos triangulares.

Avaliação do Parâmetro U_{Pe}

Com base no comprimento dado na equação (4.27), o número de Peclet pode ser calculado como:

$$Pe_{Lm} = (\rho u_{av} L_m) / \Gamma^\phi \quad (4.31)$$

Definindo $U_{Pe} \equiv \left(\frac{A_{tri}}{A_{ret}}\right) u_{av}$ e substituindo este parâmetro e o comprimento L_m na equação (4.31), o número de Peclet baseado no comprimento médio do elemento pode ser expresso como:

$$Pe_{Lm} = [\rho U_{Pe} (X_{\max} - X_{\min})] / \Gamma^\phi \quad (4.32)$$

Conforme apresentado acima, a redução do comprimento característico, expressa por A_{tri}/A_{ret} , foi introduzida no parâmetro U_{Pe} , que é assumido como uma velocidade média que caracteriza a convecção no elemento triangular e por isso também será utilizado no cálculo da variável ξ , da equação (4.11). Deste modo a metodologia CVFEM é preservada em sua forma original, mudando apenas a maneira de cálculo da velocidade média característica do elemento triangular.

Com base no que foi apresentado pode-se concluir:

- Como L_x representa o comprimento da projeção do elemento sobre o eixo x, então $L_x \geq 2L_m$ o que implica em $A_{tri}/A_{ret} \leq 1/2$;
- A igualdade na expressão $A_{tri}/A_{ret} \leq 1/2$ só ocorrerá se uma das faces do elemento for paralela ou perpendicular à velocidade média, ver figuras 4.7(b) e 4.7(c), neste caso o parâmetro U_{Pe} será igual à metade de u_{av} (isto porque $A_{tri}/A_{ret} = 1/2$), e este será o maior valor da relação A_{tri}/A_{ret} , e também de U_{Pe}/u_{av} . Logo, o número de Peclet baseado no comprimento médio do elemento triangular é no máximo a metade do valor calculado do modo tradicional.

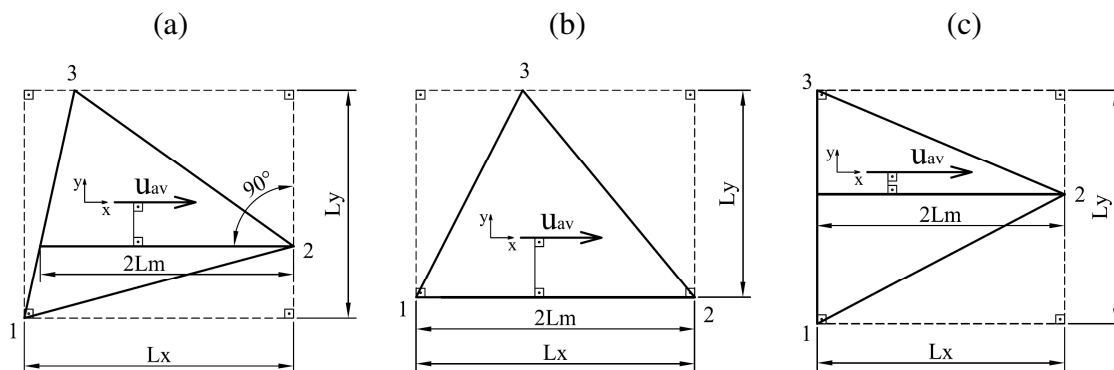


Figura 4.7 - Elemento triangular.

4.5 – INTEGRAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO

Quando se utiliza o método de volumes finitos o domínio contínuo é dividido em subdomínios, ou volumes de controle, e é sobre estes volumes que as integrações das equações diferenciais são realizadas. A integral sobre o domínio completo é obtida a partir da soma das integrais sobre os volumes de controle individuais. Como resultado das

integrações das equações de conservação sobre os subdomínios é obtido um conjunto aproximado de equações algébricas.

Para realização das integrações nos volumes de controle é necessário o uso de funções de interpolação para avaliação das variáveis dependentes, suas derivadas e as propriedades termofísicas nas interfaces dos volumes finitos. Segundo Maliska (2004), deve-se ter exatidão quanto à conservação dos fluxos nas interfaces entre os volumes de controle. O fluxo de uma propriedade para fora de um determinado volume de controle deve ser calculado da mesma forma quando visto como um fluxo entrando no volume de controle vizinho. Para os termos de difusão também deve ser tomado o mesmo cuidado. É desejável utilizar os termos de difusão na forma $\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)$, e avaliar as propriedades físicas no mesmo local adotado para o fluxo, evitando-se a expressão $\Gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \Gamma}{\partial x}$.

Antes da realização das integrações faz-se necessário estabelecer as notações relacionadas aos entes geométricos. Inicia-se pelo cálculo da área plana, A_p , da área superficial associada à normal, A_n , e pelo cálculo do vetor normal unitário, \mathbf{n} , mostrados na figura 4.8. A área A_p^1 é definida no plano r-z do sistema de coordenadas cilíndricas (ou no plano x-y para do sistema de coordenadas cartesianas) e delimitada pelos segmentos 1aoc. A área superficial associada à normal A_n^{ao} é calculada como $A_n^{ao} = L_{ao} s_{ao}$, onde $s_{ao} = \sqrt{x_{ao}^2 + y_{ao}^2}$ e L_{ao} é um comprimento que pode ser $L_{ao} = 2\pi \bar{r}_{ao}$, $\bar{r}_{ao} = (r_a + r_o)/2$, para o caso 2D axissimétrico ou $L_{ao} = 1$ para o caso 2D plano. Uma convenção adotada neste trabalho é que o vetor normal é dirigido para fora, tem sentido de integração anti-horário e é calculado pela equação (4.33). Adicionalmente, cada subvolume associado a um ponto nodal será calculado como $\delta V_1 = A_p^1 \bar{L}_{1aoc}$, $\bar{L}_{1aoc} = \frac{1}{2} \left(\frac{L_1 + L_a + L_o}{3} + \frac{L_1 + L_o + L_c}{3} \right)$.

$$\mathbf{n}A_n^{ao} = L_{ao} y_{ao} \mathbf{i} - L_{ao} x_{ao} \mathbf{j} \quad (4.33)$$

onde $y_{ao} = y_a - y_o$, $x_{ao} = x_a - x_o$

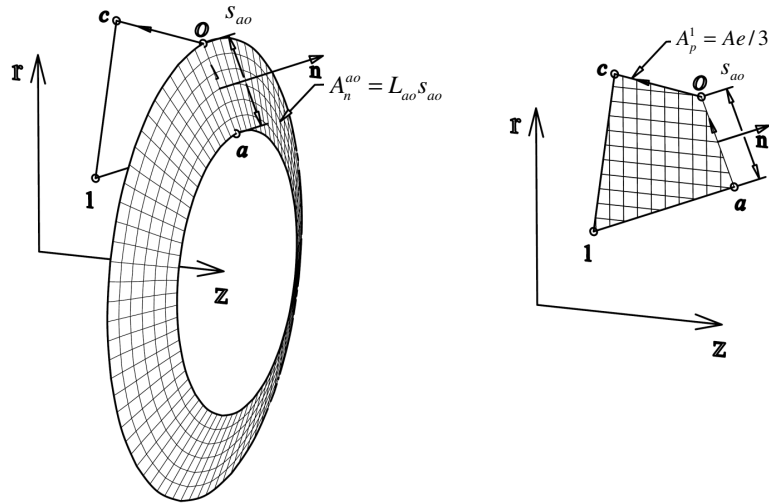


Figura 4.8 - Destaque das áreas A_n e A_p no espaço.

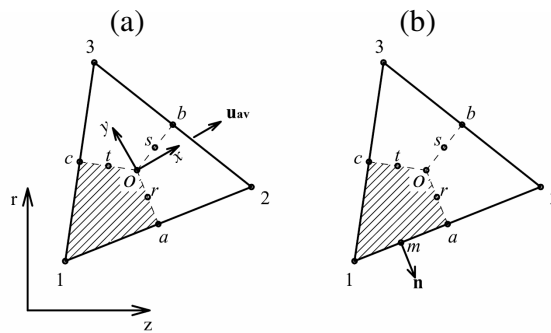


Figura 4.9 - Elemento triangular e notação utilizada na formulação.

4.5.1 – Integração Temporal e Espacial da Equação de Conservação de Um Escalar

As integrações serão realizadas considerando a equação de conservação transiente de ϕ na forma vetorial, equação (4.34), pois esta forma é conservativa e independente do sistema de coordenadas.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot \mathbf{J} = S^\phi \quad (4.34)$$

onde $\mathbf{J} = \mathbf{J}_D + \mathbf{J}_C$ é o fluxo combinado de convecção e difusão. Os fluxos convecção e difusão são dados, respectivamente, por $\mathbf{J}_C = \rho \mathbf{u}^m \phi$ e $\mathbf{J}_D = -\Gamma^\phi \nabla \phi$, e $\mathbf{u}^m = u^m \mathbf{i} + v^m \mathbf{j}$ é o vetor velocidade.

Pode-se integrar a equação (4.34) sobre o passo de tempo Δt e sobre o volume de controle V_i da seguinte forma:

$$\int_{\Delta t V_i} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) dV dt + \int_{\Delta t V_i} \nabla \cdot \mathbf{J} dV dt = \int_{\Delta t V_i} S^\phi dV dt \quad (4.35)$$

Considerando o teorema da divergência de Gauss para transformação da integral volumétrica do fluxo para a integral de superfície, tem-se:

$$\int_{\Delta t V_i} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) dV dt + \int_{\Delta t A_{ni}} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA_n dt = \int_{\Delta t V_i} S^\phi dV dt \quad (4.36)$$

Onde: A_{ni} é a área superficial do volume de controle V_i .

Para facilitar o desenvolvimento dos cálculos, as integrais da equação (4.36) serão operadas separadamente, no final, os termos resultantes serão reunidos em uma única equação algébrica.

As aproximações serão iniciadas pelo termo transiente. Neste caso é assumido que a massa no interior do volume de controle, M , e o escalar ϕ prevalecem no volume de controle V_i , deste modo o esquema de primeira ordem *backward Euler* pode ser utilizado (Versteeg & Malalasekera, 1995), resultando na seguinte equação aproximada:

$$\int_{\Delta t V_i} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) dV dt = M_i^1 \phi_i^1 - M_i^0 \phi_i^0 \quad (4.37)$$

onde $M_i = \sum_{k=1}^{N_{svc}} \rho_k \delta V_k$ é a massa no volume de controle, obtida a partir da soma das contribuições dos k subvolumes de controle δV_k . Os sobrescritos 1 e 0 da equação se referem aos instantes $t + \Delta t$ e t , respectivamente.

Prosseguindo, deve-se assumir o comportamento dos fluxos através das interfaces durante o intervalo de integração temporal. Seguindo o procedimento adotado em Maliska (2004), que é tradicionalmente utilizado na literatura de volumes finitos, será assumido que a variação temporal do fluxo total é de acordo com um determinado perfil do instante t até

o instante $t + \Delta t$, conforme equação abaixo. O fator θ é utilizado entre 0 e 1 para expressar a forma do perfil de tempo.

$$\int_{\Delta t} \oint_{A_{ni}} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA_n dt = \theta \oint_{A_{ni}} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA_n \Delta t + (1 - \theta) \oint_{A_{ni}} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA_n \Delta t \quad (4.38)$$

Este trabalho se baseará na solução segregada das equações de conservação, por isso é necessário adotar um tipo de linearização para os termos convectivos da equação de conservação de quantidade de movimento. Para este fim a aproximação de *Picard* será adotada, o que significa que o fluxo de massa e as propriedades termofísicas serão tratados como conhecidas, utilizadas da iteração imediatamente anterior. Então se pode proceder com a discretização da equação integral do fluxo combinado de convecção-difusão para obtenção de um conjunto de equações algébricas, uma equação para cada nó do domínio. As equações algébricas relacionarão os valores das variáveis dependentes em um nó i , ϕ_i , com os seus nós vizinhos, ϕ_{nb} , e podem ser representadas da seguinte forma:

$$\oint_{A_{ni}} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA_n = a_i \phi_i - \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} \quad (4.39)$$

Considerando o que foi exposto anteriormente, pode-se escrever a equação (4.39) da seguinte forma:

$$\theta \oint_{A_{ni}} \mathbf{J}^1 \cdot \mathbf{n} dA_n \Delta t + (1 - \theta) \oint_{A_{ni}} \mathbf{J}^0 \cdot \mathbf{n} dA_n \Delta t = \left\{ a_i [\theta \phi_i^1 - (1 - \theta) \phi_i^0] - \sum_{nb} a_{nb} [\theta \phi_{nb}^1 + (1 - \theta) \phi_{nb}^0] \right\} \Delta t \quad (4.40)$$

Conforme Patankar (1980) o termo de fonte pode ser linearizado como $S^\phi = S_c + S_p \phi$. Este termo pode ser integrado no espaço se for assumido que o seu valor prevalece sobre o volume de controle V_i . Como na equação do fluxo, equação (4.40), também se considera que o termo de fonte varia no passo de tempo Δt conforme perfil definido pelo parâmetro θ . Deste modo pode-se proceder com a integração no espaço e no tempo:

$$\int_{\Delta t V_i} S dV dt = \int_{\Delta t} [(S_C)_i + (S_P)_i \phi_i] V_i dt = \left\{ \theta [(S_C)_i + (S_P)_i \phi_i]^1 V_i^1 + (1-\theta) [(S_C)_i + (S_P)_i \phi_i]^0 V_i^0 \right\} \Delta t \quad (4.41)$$

Após as integrações e contabilização das contribuições de todos os termos da equação de conservação do escalar, uma equação aproximada é obtida. Esta equação aproximada é algébrica e relaciona o valor de ϕ em um nó i com os seus nós vizinhos, identificados de nb . Desconsiderando o sobrescrito 1, para cada volume de controle i uma equação algébrica poderá ser escrita como:

$$\left[\theta a_i + \frac{1}{\Delta t} M_i - \theta S_P V_i \right] \phi_i = \sum_{nb} a_{nb} \left[\theta \phi_{nb} + (1-\theta) \phi_{nb}^0 \right] + b_i + \left[\frac{1}{\Delta t} M_i^0 - (1-\theta) a_i \right] \phi_i^0 \quad (4.42)$$

onde $b_i = \theta (S_C)_i V_i + (1-\theta) [(S_C)_i^0 + (S_P)_i^0 \phi_i^0] V_i$

Classicamente na literatura três valores diferentes para θ são utilizados. Cada um dos valores expressa um esquema distinto:

- Se for assumido $\theta=0$ é obtido o esquema explícito, o que significa que o fluxo e o termo de fonte são avaliados no passo de tempo antecedente. Neste caso ϕ^0 prevalece sobre o passo de tempo. Este tipo de esquema sofre de instabilidades se o passo de tempo escolhido for maior que um determinado valor. Este esquema converge com um erro de primeira ordem com relação ao tempo.
- Quando é assumido $\theta=1$ é obtido o esquema totalmente implícito, o que significa que o fluxo e o termo de fonte são avaliados no passo de tempo posterior, por isso a solução no tempo irá requerer a solução de um conjunto de equações algébricas. No entanto, não existirão instabilidades para grandes passos de tempo, pois o esquema é incondicionalmente estável. Este esquema também converge com um erro de primeira ordem com relação ao tempo.
- Para $\theta=0,5$, o esquema conhecido como Crank-Nicholson é obtido. Este esquema é implícito, incondicionalmente estável e converge com um erro de segunda ordem com relação ao tempo, porém, é mais dispendioso computacionalmente que os dois esquemas já citados.

Para dar suporte a algumas considerações que serão apresentadas a seguir o esquema totalmente implícito é apresentado, obtido a partir da substituição de $\theta = 1$ na equação (4.42):

$$\left[a_i + \frac{1}{\Delta t} M_i - (S_P V)_i \right] \phi_i = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + (S_C V)_i + \frac{1}{\Delta t} M_i^0 \phi_i^0 \quad (4.43)$$

Segundo Ferziger e Perić (2002) um esquema totalmente implícito com precisão de segunda ordem no tempo, bastante similar ao apresentado na equação acima, pode ser derivado se forem considerados três níveis regressivos de tempo para o cálculo do termo transiente:

$$\int_{\Delta t V_i} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) dV dt \cong 1,5(M\phi)_i - 2(M\phi)_i^0 + 0,5(M\phi)_i^{00} \quad (4.44)$$

Onde: ϕ^{00} se refere ao instante de tempo anterior a ϕ^0 .

Com esta nova aproximação do termo transiente, considerando os mesmos coeficientes da equação (4.43), a equação algébrica do esquema totalmente implícito pode ser reescrita como:

$$\left[a_i + \frac{1,5}{\Delta t} M_i - (S_P V)_i \right] \phi_i = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + (S_C V)_i + \frac{1}{\Delta t} \left[2M_i^0 \phi_i^0 - 0,5M_i^{00} \phi_i^{00} \right] \quad (4.45)$$

Segundo Ferziger e Perić (2002) o esquema representado pela equação (4.44) possui precisão de segunda ordem em relação ao tempo, é incondicionalmente estável e é menos propenso a produzir soluções oscilatórias que o esquema Crank-Nicholson, embora isto possa ocorrer com valores grandes de Δt . Requer tanta memória quanto o esquema Crank-Nicholson, entretanto, tem a vantagem de ser mais fácil de programar no código. Apesar de ser um esquema de segunda ordem pode apresentar menor precisão que o esquema Crank-Nicholson em alguns casos, atribuída à inexistência inicial ϕ^{00} . Adicionalmente, segundo Fletcher (1991) se o avanço da solução acontecer em diferentes taxas no domínio computacional, o esquema Crank-Nicholson frequentemente produz solução oscilatória que, embora estável, não apresenta boa taxa de convergência. Neste

caso o esquema de três níveis de tempo é mais efetivo do que o esquema Crank-Nicholson. Por causa do exposto, considerando estabilidade, economia computacional e precisão, no presente trabalho o esquema totalmente implícito de três níveis de tempo será adotado.

4.5.2 – Integração do Termo de Fluxo Combinado de Convecção-Difusão

A integração do fluxo total, equação (4.39), será realizada sobre as superfícies dos subvolumes de controle que contribuem para a formação do volume de controle centrado no nó 1, figura 4.10. Todos os cálculos serão baseados nos elementos finitos e as integrais sobre os elementos serão representadas por matrizes locais. A integração sobre domínio inteiro é representada por uma matriz global que é obtida somando-se as contribuições de cada elemento, ou seja, de cada matriz local. Este procedimento facilita a obtenção da matriz global e não afeta o princípio de conservação, pois quando a contribuição de todos os elementos for contabilizada a contribuição de todos os volumes de controle também terá sido feita.

A igualdade da equação (4.39) será demonstrada a partir da integração do fluxo sobre a superfície de controle que envolve o volume centrado em 1 da figura 4.2(b):

$$\oint_{A_{ni}} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA_n = \int_a^o \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA_n + \int_o^c \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA_n + \left(\begin{array}{l} \text{contribuição de outros elementos associados ao nó } i \\ + \text{ condições de contorno, se aplicável.} \end{array} \right) \quad (4.46)$$

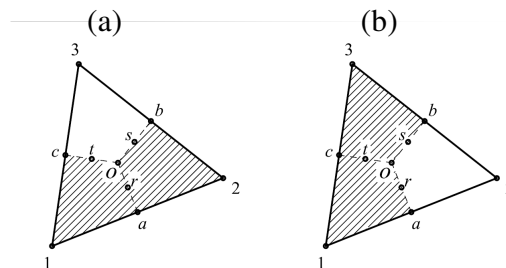


Figura 4.10 - Subvolumes de controle associados aos cálculos dos fluxos.

Na equação (4.46) apenas a contribuição do elemento triangular 123 (isto é, do subvolume de controle 1aoc da figura 4.2(b)) é apresentada explicitamente. Para solução das equações integrais, inicialmente os fluxos convectivos e difusivos serão contabilizados separadamente.

O termo difusivo, de natureza elíptica, será aproximado considerando função de interpolação linear para ϕ , equação (4.2). Desta forma as derivadas serão constantes nos elementos. Além disso, é assumido que o coeficiente difusão Γ^ϕ e o comprimento L no centro da superfície $a-o$ (isto é, no ponto r) prevalecem sobre a superfície de integração. Assim, a seguinte aproximação pode ser adotada:

$$\int_a^o \mathbf{J}_D \cdot \mathbf{n} dA_n \cong \mathbf{J}_D \cdot \mathbf{n} A_n^{oa} \quad (4.47)$$

Realizando o produto escalar de $\mathbf{J}_D = -\Gamma_r^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \mathbf{i} - \Gamma_r^\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \mathbf{j}$ com $\mathbf{n} A_n^{oa} = L_r y_{oa} \mathbf{i} - L_r x_{oa} \mathbf{j}$:

$$\int_a^o \mathbf{J}_D \cdot \mathbf{n} dA_n \cong \mathbf{J}_D \cdot \mathbf{n} A_n^{oa} = -\Gamma_r^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} L_r y_{oa} + \Gamma_r^\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} L_r x_{oa} \quad (4.48)$$

Sabendo que $x_{oa} = x_o - x_a$ e $y_{oa} = y_o - y_a$, e considerando que o sistema de coordenadas local está posicionado em $(x_o, y_o) = (0,0)$, tem-se: $x_{oa} = -x_a$ e $y_{oa} = -y_a$. Além disso, as derivadas são calculadas como: $\frac{\partial \phi}{\partial x} = A^L$ e $\frac{\partial \phi}{\partial y} = B^L$. Após as considerações pode-se escrever:

$$\int_a^o \mathbf{J}_D \cdot \mathbf{n} dA_n \cong (\Gamma_\phi L)_r (A^L y_a - B^L x_a) \quad (4.49)$$

Substituindo os valores de A^L e B^L , dados nas equações (4.3) e (4.4) respectivamente, na equação (4.49), encontra-se:

$$\int_a^o \mathbf{J}_D \cdot \mathbf{n} dA_n \cong - (Y_a Y_{32} - X_a X_{23}) \frac{(L\Gamma_\phi)_r}{D^L} \phi_1 - (Y_a Y_{13} - X_a X_{31}) \frac{(L\Gamma_\phi)_r}{D^L} \phi_2 - (Y_a Y_{21} - X_a X_{12}) \frac{(L\Gamma_\phi)_r}{D^L} \phi_3 \quad (4.50)$$

Devido à natureza parabólica do termo convectivo o uso de funções de interpolação lineares é inapropriado (Maliska, 2004). Por isso, a função de interpolação FLO, de natureza *upwind*, será utilizada para aproximar os valores ϕ nos pontos de integração. As componentes da velocidade de convecção são interpoladas pela equação (4.24). Portanto, o fluxo convectivo pode ser escrito como:

$$\mathbf{J}_C = \rho u^m \phi \mathbf{i} + \rho v^m \phi \mathbf{j} = \rho u^m (N_1^F \phi_1 + N_2^F \phi_2 + N_3^F \phi_3) \mathbf{i} + \rho v^m (N_1^F \phi_1 + N_2^F \phi_2 + N_3^F \phi_3) \mathbf{j} \quad (4.51)$$

Reagrupando os termos, colocando os valores nodais de ϕ em evidência, tem-se:

$$\mathbf{J}_C = J_{Cz} \mathbf{i} + J_{Cr} \mathbf{j} = (f_1 \phi_1 + f_2 \phi_2 + f_3 \phi_3) \mathbf{i} + (g_1 \phi_1 + g_2 \phi_2 + g_3 \phi_3) \mathbf{j} \quad (4.52)$$

onde $f_1 = \rho u^m N_1^F$, $f_2 = \rho u^m N_2^F$, $f_3 = \rho u^m N_3^F$, $g_1 = \rho v^m N_1^F$, $g_2 = \rho v^m N_2^F$ e $g_3 = \rho v^m N_3^F$

Seguindo o que é realizado tradicionalmente em CVFEM, uma aproximação de alta ordem para integração numérica do fluxo convectivo será utilizada: a regra de Simpson. Para uso desta regra é necessário o cálculo do integrando em três pontos diferentes em cada superfície de controle. Conforme Ferziger e Perić (2002), a precisão da integração estará diretamente relacionada à precisão da função de interpolação utilizada. Prosseguindo e utilizando a regra de Simpson, a equação integral do termo convectivo é aproximada da seguinte maneira:

$$\int_a^o \mathbf{J}_C \cdot \mathbf{n} dA_n = -\frac{Y_a}{6} [(J_{Cz} L)_o + 4(J_{Cz} L)_r + (J_{Cz} L)_a] + \frac{X_a}{6} [(J_{Cr} L)_o + 4(J_{Cr} L)_r + (J_{Cr} L)_a] \quad (4.53)$$

Substituindo \mathbf{J}_C dado pela equação (4.52) na equação acima e considerando o seguinte agrupamento de variáveis:

$$f_i^a = \frac{1}{6} [(L \rho f_i)_o + 4(L \rho f_i)_r + (L \rho f_i)_a] \quad \text{e} \quad g_i^a = \frac{1}{6} [(L \rho g_i)_o + 4(L \rho g_i)_r + (L \rho g_i)_a], \quad \text{com} \\ i = 1, 2, 3$$

encontra-se

$$\int_a^o \mathbf{J}_C \cdot \mathbf{n} dA_n = -Y_a (f_1^a \phi_1 + f_2^a \phi_2 + f_3^a \phi_3) + X_a (g_1^a \phi_1 + g_2^a \phi_2 + g_3^a \phi_3) \quad (4.54)$$

Somando (4.50) e (4.54), a integral do fluxo combinado de convecção difusão pode ser obtida:

$$\int_a^o \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA_n = -Y_a (f_1^a \phi_1 + f_2^a \phi_2 + f_3^a \phi_3) + X_a (g_1^a \phi_1 + g_2^a \phi_2 + g_3^a \phi_3) - \frac{1}{D^L} (Y_a Y_{32} - X_a X_{23}) (L\Gamma_\phi)_r \phi_1 - \frac{1}{D^L} (Y_a Y_{13} - X_a X_{31}) (L\Gamma_\phi)_r \phi_2 - \frac{1}{D^L} (Y_a Y_{21} - X_a X_{12}) (L\Gamma_\phi)_r \phi_3$$

Reagrupando as variáveis novamente e introduzido os termos β_1 e β_2 , os termos associados à porosidade, considerados constantes sobre os elementos, tem-se:

$$\int_a^o \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA_n = -A_1^a \phi_1 - A_2^a \phi_2 - A_3^a \phi_3 \quad (4.55)$$

$$\text{onde } A_1^a = \beta_1 (Y_a f_1^a - X_a g_1^a) + \beta_2 \frac{1}{D^L} (L\Gamma_\phi)_r (Y_a Y_{32} - X_a X_{23})$$

$$A_2^a = \beta_1 (Y_a f_2^a - X_a g_2^a) + \beta_2 \frac{1}{D^L} (L\Gamma_\phi)_r (Y_a Y_{13} - X_a X_{31})$$

$$A_3^a = \beta_1 (Y_a f_3^a - X_a g_3^a) + \beta_2 \frac{1}{D^L} (L\Gamma_\phi)_r (Y_a Y_{21} - X_a X_{12})$$

Realizando procedimento de integração similar para o fluxo total através da superfície $o-c$ resulta em:

$$\int_o^c \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA_n = A_1^c \phi_1 + A_2^c \phi_2 + A_3^c \phi_3 \quad (4.56)$$

$$\text{onde } A_1^c = \beta_1 (Y_c f_1^c - X_c g_1^c) + \beta_2 \frac{1}{D^L} (L\Gamma_\phi)_t (Y_c Y_{32} - X_c X_{23})$$

$$A_2^c = \beta_1 (Y_c f_2^c - X_c g_2^c) + \beta_2 \frac{1}{D^L} (L\Gamma_\phi)_t (Y_c Y_{13} - X_c X_{31})$$

$$A_3^c = \beta_1 (Y_c f_3^c - X_c g_3^c) + \beta_2 \frac{1}{D^L} (L\Gamma_\phi)_t (Y_c Y_{21} - X_c X_{12})$$

$$e \quad f_i^c = \frac{1}{6}[(L\rho f_i)_o + 4(L\rho f_i)_t + (L\rho f_i)_c], \quad g_i^c = \frac{1}{6}[(L\rho g_i)_o + 4(L\rho g_i)_t + (L\rho g_i)_c], \quad \text{com} \\ i = 1, 2, 3$$

Somando as equações (4.55) e (4.56) e reagrupando os termos, finalmente pode-se expressar o fluxo combinado de convecção difusão em função dos valores nodais de ϕ :

$$\int_a^o \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA_n + \int_o^c \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA_n = D_1^{aoc} \phi_1 + D_2^{aoc} \phi_2 + D_3^{aoc} \phi_3 \quad (4.57)$$

$$\text{onde} \quad D_1^{aoc} = (A_1^c - A_1^a), \quad D_2^{aoc} = (A_2^c - A_2^a) \text{ e } D_3^{aoc} = (A_3^c - A_3^a)$$

A equação apresentada acima foi obtida com base no elemento 123, porém, outros elementos contribuem de forma similar para a formação do volume de controle centrado em i . Então, acrescentando a contribuição dos outros elementos que partilham o nó i , a equação integral do fluxo para o volume de controle centrado em i pode ser representada por uma equação algébrica escrita como:

$$\oint_{A_{ni}} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA_n = a_i \phi_i - \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} \quad (4.58)$$

onde o subscrito nb referencia os nós vizinhos a i .

4.5.3 – Integração dos Termos de Fonte

Cálculo dos termos de fonte volumétricos médios - Modo tradicional.

A seguir é apresentado o modo tradicional de obtenção do termo de fonte volumétrico a partir do termo de fonte dos elementos, conforme pode ser verificado em Baliga e Patankar (1980), Baliga e Patankar (1983), Baliga *et al.* (1983), Hookey *et al.* (1988) e Hookey e Baliga (1988).

O termo de fonte pode ser linearizado como $S^\phi = S_c + S_p \phi$. A integral deste termo sobre o volume de controle 1 pode ser representada como:

$$\int_{V_1} S^\phi dV = \int_{1aoc} S^\phi dV + (\text{contribuição de outros elementos associados ao nó 1}) \quad (4.59)$$

Na equação acima somente a integral sobre o subvolume de controle 1aoc está sendo mostrada explicitamente, contudo, fica subentendido que outros subvolumes associados a outros elementos também contribuem de igual forma.

Prosseguindo, considerando S^ϕ médio sobre o elemento “k”, representado por $\langle S^\phi \rangle_k^e$, tem-se:

$$\int_{V_1} S^\phi dV = \langle S^\phi \rangle_k^e \delta V_1 + (\text{contribuição de outros elementos associados ao nó i}) \quad (4.60)$$

Onde: δV_1 é o subvolume de controle associado ao nó 1 pertencente ao elemento 123.

O termo de fonte volumétrico associado ao nó 1, $\langle S^\phi \rangle_1^V$, é obtido a partir da soma das contribuições dos M elementos que compõe o volume de controle:

$$\int_{V_1} S^\phi dV = \langle S^\phi \rangle_1^V V_1 = \sum_{k=1}^M \langle S^\phi \rangle_k^e \delta V_k \quad (4.61)$$

Logo, $\langle S_P^\phi \rangle_1^V V_1 = \sum_{k=1}^M \langle S_P^\phi \rangle_k^e \delta V_k$ e $\langle S_C^\phi \rangle_1^V V_1 = \sum_{k=1}^M \langle S_C^\phi \rangle_k^e \delta V_k$

onde $V_1 = \sum_{k=1}^M \delta V_k$ é o volume de controle associado ao nó 1.

Cálculo dos termos de fonte volumétricos médios (Proposta)

A avaliação do termo de fonte volumétrico pela equação (4.61) não considera qualquer acoplamento deste termo com seus vizinhos. Uma equação que considere tal acoplamento pode ser derivada através do balanço entre os termos de fonte associados aos

volumes que partilham a superfície *ao*, ver figura 4.9, subvolumes δV_{1aoc} e δV_{2boa} , e o termo de fonte do elemento, como posto a seguir:

$$\int_{\delta V_{12}} S_1^\phi dV = \int_{\delta V_{12}} S_e^\phi dV \quad (4.62)$$

onde $\delta V_{12} = \delta V_1 \cup \delta V_2$ e S_e^ϕ é o termo de fonte associado ao elemento “e” e S_1^ϕ é o termo de fonte associado ao volume de controle 1.

Do mesmo modo, uma segunda equação pode ser derivada considerando o balanço entre os termos de fonte associados aos volumes que partilham a superfície *oc*, subvolumes δV_1 e δV_3 , e o termo de fonte do elemento

$$\int_{\delta V_{13}} S_1^\phi dV = \int_{\delta V_{13}} S_e^\phi dV \quad (4.63)$$

onde $\delta V_{13} = \delta V_1 \cup \delta V_3$.

Considerando $\langle S^\phi \rangle_k^e$ um termo de fonte médio sobre o elemento “k” e $\langle S^\phi \rangle_1^V$ um termo de fonte médio sobre o volume controle 1, as equações (4.62) e (4.63) podem ser integradas, resultando nas equações (4.64) e (4.65), respectivamente.

$$\langle S^\phi \rangle_1^V \delta V_1 + \langle S^\phi \rangle_2^V \delta V_2 = \langle S^\phi \rangle_k^e \delta V_1 + \langle S^\phi \rangle_k^e \delta V_2 \quad (4.64)$$

$$\langle S^\phi \rangle_1^V \delta V_1 + \langle S^\phi \rangle_3^V \delta V_3 = \langle S^\phi \rangle_k^e \delta V_1 + \langle S_e^\phi \rangle_k^e \delta V_3 \quad (4.65)$$

Somando as equações (4.64) e (4.65), a contribuição do elemento 123 ao termo de fonte associado ao nó 1 é dada como

$$\langle S^\phi \rangle_1^V \delta V_1 + 0,5 \langle S^\phi \rangle_2^V \delta V_2 + 0,5 \langle S^\phi \rangle_3^V \delta V_3 = 0,5 \langle S^\phi \rangle_k^e (\delta V_1 + \delta V_{123}) \quad (4.66)$$

onde $\delta V_{123} = \delta V_1 + \delta V_2 + \delta V_3$

Acrescentando as contribuições dos outros elementos que partilham o nó 1, uma equação algébrica é obtida:

$$a_1 \langle S^\phi \rangle_1^V = \sum_{nb} a_{nb} \langle S^\phi \rangle_{nb}^V + b_1 \quad (4.67)$$

Deve-se notar que em b_1 foram postas as contribuições relativas aos termos de fonte dos elementos. O procedimento descrito para o nó 1 pode ser generalizado para qualquer nó “i” do domínio, resultando em um sistema de equações. A solução de tal sistema fornece os termos de fonte volumétricos a partir dos termos de fonte dos elementos.

A utilização da equação (4.67) é mais onerosa computacionalmente que a utilização da equação (4.61), mas como será apresentado na seção de validação, o bom rendimento da função de interpolação de *momentum* está associado ao uso da equação (4.67) para avaliação dos gradientes de pressão volumétricos.

4.6 – ACOPLAMENTO PRESSÃO -VELOCIDADE.

A solução segregada das equações de conservação da quantidade de movimento e da equação de conservação da massa é dificultada pela inexistência de uma equação para descrever a evolução do campo de pressão. Este problema é bastante discutido na literatura e é conhecido como problema de acoplamento pressão-velocidade (Maliska, 2004). Quando é utilizada a solução segregada geralmente a evolução do campo de pressões é realizada indiretamente através da equação da continuidade, assim pode-se obter um campo de pressões que satisfaça simultaneamente as equações de conservação da quantidade de movimento e conservação da massa. Neste trabalho o problema do acoplamento pressão-velocidade será tratado seguindo os passos descritos em Prakash e Patankar (1985), onde o acoplamento é resolvido utilizando variáveis primitivas (velocidade, pressão, temperatura), co-localizadas, interpoladas sobre os mesmos elementos e a integração da equação de conservação da quantidade de movimento será realizada sobre o mesmo volume de controle para velocidade e pressão.

As equações de conservação da quantidade de movimento podem ser obtidas a partir da equação (4.45), quando ϕ é substituído pelas componentes de velocidades e os gradientes médios de pressão associados ao volume de controle i , $\langle \frac{\partial p}{\partial x} \rangle_i$ e $\langle \frac{\partial p}{\partial y} \rangle_i$, são incluídos nas equações conforme apresentado a seguir:

$$\left[a_i + \frac{1,5}{\Delta t} M_i - (S_P^u V)_i \right] u_i = \sum_{nb} a_{nb} u_{nb} - V_i \langle \frac{\partial p}{\partial x} \rangle_i + (S_C^u V)_i + \frac{1}{\Delta t} [2M_i^0 u_i^0 - 0,5M_i^{00} u_i^{00}] \quad (4.68)$$

$$\left[a_i + \frac{1,5}{\Delta t} M_i - (S_P^v V)_i \right] v_i = \sum_{nb} a_{nb} v_{nb} - V_i \langle \frac{\partial p}{\partial y} \rangle_i + (S_C^v V)_i + \frac{1}{\Delta t} [2M_i^0 v_i^0 - 0,5M_i^{00} v_i^{00}] \quad (4.69)$$

As equações acima podem ser escritas de forma mais compacta como:

$$a_i^u u_i = \sum_{nb} a_{nb} u_{nb} + b_i^u - V_i \langle \frac{\partial p}{\partial x} \rangle_i \quad (4.70)$$

$$a_i^v v_i = \sum_{nb} a_{nb} v_{nb} + b_i^v - V_i \langle \frac{\partial p}{\partial y} \rangle_i \quad (4.71)$$

onde $a_i^u = \left[a_i + \frac{1,5}{\Delta t} M_i - (S_P^u V)_i \right]$ e $b_i^u = (S_C^u V)_i + \frac{1}{\Delta t} [2M_i^0 u_i^0 - 0,5M_i^{00} u_i^{00}]$

$$a_i^v = \left[a_i + \frac{1,5}{\Delta t} M_i - (S_P^v V)_i \right] \text{ e } b_i^v = (S_C^v V)_i + \frac{1}{\Delta t} [2M_i^0 v_i^0 - 0,5M_i^{00} v_i^{00}]$$

Conforme já comentado, um dos meios de acoplar pressão e velocidade é isolando as velocidades das equações (4.70) e (4.71) e utilizando-as no cálculo dos fluxos de massa, gerando deste modo uma equação de Poisson para a pressão, tal como feito em Prakash e Patankar (1985). Para isso as componentes de velocidade são reescritas na seguinte forma:

$$u_i = \hat{u}_i - d_i^u \langle \frac{\partial p}{\partial x} \rangle_i \quad (4.72)$$

$$v_i = \hat{v}_i - d_i^v \langle \frac{\partial p}{\partial y} \rangle_i \quad (4.73)$$

onde $\hat{u}_i = \frac{\sum_{nb} a_{nb} u_{nb} + b_i^u}{a_i^u}$, $\hat{v}_i = \frac{\sum_{nb} a_{nb} v_{nb} + b_i^v}{a_i^v}$, $d_i^u = \frac{V_i}{a_i^u}$ e $d_i^v = \frac{V_i}{a_i^v}$. Notar que as velocidades estão sendo definidas nos nós da malha.

Os gradientes de pressão das equações (4.72) e (4.73) serão avaliados nos elementos e não nos volumes de controle. Por isso, as equações (4.72) e (4.73), para os valores nodais das componentes de velocidade, podem ser modificadas para:

$$u_i = \hat{u}_i - d_i^u \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_e \quad \text{com: } i = 1, 2, 3 \quad (4.74a)$$

$$v_i = \hat{v}_i - d_i^v \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)_e, \quad \text{com: } i = 1, 2, 3 \quad (4.74b)$$

Onde o subscrito e indica que os gradientes de pressão são avaliados sobre os elementos.

Os gradientes de pressão das equações (4.74) serão obtidos a partir da seguinte função de interpolação linear:

$$p = A^p X + B^p Y + C^p \quad (4.75)$$

Os valores A^p , B^p e C^p são dados nas equações (4.3), (4.4) e (4.5), respectivamente. Da equação (4.2) calcula-se: $\left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_e = A^p$ e $\left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)_e = B^p$.

4.6.1 – Equação de Interpolação de Momentum

Para a solução da equação da conservação da massa será utilizada a função de interpolação dada pela equação (4.24), reapresentada em (4.76). O acoplamento entre pressão e velocidade pode ser feito por meio desta função de interpolação, através da utilização dos valores nodais de velocidade dados em (4.74), como apresentado na equação (4.77).

$$u^m = N_1^m u_1 + N_2^m u_2 + N_3^m u_3 \quad (4.76)$$

$$u^m = N_1^m \left[\hat{u}_1 - d_1^u \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_e \right] + N_2^m \left[\hat{u}_2 - d_2^u \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_e \right] + N_3^m \left[\hat{u}_3 - d_3^u \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_e \right] \quad (4.77)$$

$$u^m = N_1^m \hat{u}_1 + N_2^m \hat{u}_2 + N_3^m \hat{u}_3 - \left[N_1^m d_1^u + N_2^m d_2^u + N_3^m d_3^u \right] \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_e \quad (4.78)$$

Reconhecendo que

$$\hat{u} = N_1^m \hat{u}_1 + N_2^m \hat{u}_2 + N_3^m \hat{u}_3 \quad \text{e} \quad d^u = N_1^m d_1^u + N_2^m d_2^u + N_3^m d_3^u$$

A função de interpolação da componente x de velocidade pode ser escrita como

$$u^m = \hat{u} - d^u \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_e \quad (4.79)$$

A função de interpolação na forma (4.89) é comumente referenciada de função de interpolação de *momentum* na literatura e pode ser interpretada como uma equação de *momentum* para a velocidade deslocada para o ponto de integração do fluxo de massa (Murthy, 2002). Este procedimento de interpolação associado à avaliação dos gradientes de pressão nos elementos evita o aparecimento de campos de pressão oscilatórios durante o processo iterativo de solução, pois simula o efeito das malhas deslocadas (Prakash & Patankar, 1985).

Como \hat{u}_i e d_i^u são interpolados com base nas funções N_i^m , isto quer dizer que ambos os termos são interpolados parte linear, parte exponencialmente, dependendo do valor de α_p . A mistura de duas aproximações diferentes para interpolação de uma variável não é algo original. Este tipo de artifício já foi utilizado em outros trabalhos por outros autores, no entanto, no CVFEM as \hat{u}_i e os d_i^u sempre foram interpolados linearmente desde o trabalho pioneiro de Prakash e Patankar (1985). Não se verificou, na literatura, procedimento similar ao que está sendo proposto neste trabalho. Além disso, o método de interpolação proposto só será bem sucedido se utilizado com a avaliação dos gradientes de pressão volumétricos pela equação (4.67).

Prosseguindo, substituindo $\left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_e = A^p = \frac{1}{D^x} (Y_{23} p_1 + Y_{31} p_2 + Y_{12} p_3)$ na equação de u^m , colocando as pressões em evidência e agrupando os termos, finalmente obtém-se:

$$u^m = ff_1 p_1 + ff_2 p_2 + ff_3 p_3 + ff_4 \quad (4.80)$$

onde $ff_1 = -\frac{d^u}{D^L} Y_{23}$, $ff_2 = -\frac{d^u}{D^L} Y_{31}$, $ff_3 = -\frac{d^u}{D^L} Y_{12}$, $ff_4 = \hat{u}$

Da mesma forma pode-se encontrar v^m combinando:

$$v^m = \hat{v} - d^v \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)_e \text{ e } \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)_e = B^p = \frac{1}{D^L} [X_{32} p_1 + X_{13} p_2 + X_{21} p_3]$$

onde $\hat{v} = N_1^m \hat{v}_1 + N_2^m \hat{v}_2 + N_3^m \hat{v}_3$ e $d^v = N_1^m d_1^v + N_2^m d_2^v + N_3^m d_3^v$,

A equação de v^m tomará a seguinte forma final:

$$v^m = gg_1 p_1 + gg_2 p_2 + gg_3 p_3 + gg_4 \quad (4.81)$$

onde $gg_1 = -\frac{d^v}{D^L} X_{32}$, $gg_2 = -\frac{d^v}{D^L} X_{13}$, $gg_3 = -\frac{d^v}{D^L} X_{21}$, $gg_4 = \hat{v}$

4.6.2 – Solução da Equação da Conservação da Massa

A equação integral da conservação da massa será resolvida considerando o volume de controle i, figura 4.9, esquema totalmente implícito, três níveis regressivos de tempo para o cálculo do termo transiente, da seguinte maneira:

$$\int_{\Delta t \Delta V} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV dt + \int_{\Delta t A_{ni}} \oint \rho \mathbf{u}^m \cdot \mathbf{n} dA_n dt \cong (1,5M_i - 2M_i^0 + 0,5M_i^{00}) + \int_{A_{ni}} \oint \rho \mathbf{u}^m \cdot \mathbf{n} dA_n \Delta t$$

ou $\frac{1}{\Delta t} (1,5M_i - 2M_i^0 + 0,5M_i^{00}) + \int_{A_{ni}} \oint \rho \mathbf{u}^m \cdot \mathbf{n} dA_n = 0 \quad (4.82)$

De posse das componentes de velocidade, equações (4.80) e (4.81), e considerando a seguinte decomposição da equação integral do fluxo de massa:

$$\oint_{A_{ni}} \rho \mathbf{u}^m \cdot \mathbf{n} dA_n = + \left(\int_a^o \rho \mathbf{u}^m \cdot \mathbf{n} dA_n + \int_o^c \rho \mathbf{u}^m \cdot \mathbf{n} dA_n \right) + (\text{contribuições similares de outros elementos associados ao nó } i) + (\text{condições de contorno, se aplicável}) \quad (4.83)$$

A equação do fluxo de massa pode ser resolvida, utilizando regra de Simpson, da seguinte forma:

$$\int_a^o \rho \mathbf{u}^m \cdot \mathbf{n} dA_n + \int_o^c \rho \mathbf{u}^m \cdot \mathbf{n} dA_n = \underbrace{-\frac{Y_a}{6} [(L\rho u)_o + 4(L\rho u)_r + (L\rho u)_a]}_I + \underbrace{+\frac{X_a}{6} [(L\rho v)_o + 4(L\rho v)_r + (L\rho v)_a]}_{II} + \underbrace{+\frac{Y_c}{6} [(L\rho u)_o + 4(L\rho u)_t + (L\rho u)_c]}_{III} - \underbrace{\frac{X_c}{6} [(L\rho v)_o + 4(L\rho v)_t + (L\rho v)_c]}_{IV} \quad (4.84)$$

A partir das equações de u^m e v^m , os termos da equação (4.84) podem ser escritos como:

$$-\frac{Y_a}{6} [(L\rho u)_o + 4(L\rho u)_r + (L\rho u)_a] = -ff_1^a Y_a p_1 - ff_2^a Y_a p_2 - ff_3^a Y_a p_3 - Y_a ff_4^a \quad (I)$$

$$+\frac{X_a}{6} [(L\rho v)_o + 4(L\rho v)_r + (L\rho v)_a] = +gg_1^a X_a p_1 + gg_2^a X_a p_2 + gg_3^a X_a p_3 + gg_4^a X_a \quad (II)$$

$$+\frac{Y_c}{6} [(L\rho u)_o + 4(L\rho u)_t + (L\rho u)_c] = +ff_1^c Y_c p_1 + ff_2^c Y_c p_2 + ff_3^c Y_c p_3 + ff_4^c Y_c \quad (III)$$

$$-\frac{X_c}{6} [(L\rho v)_o + 4(L\rho v)_t + (L\rho v)_c] = -gg_1^c X_c p_1 - gg_2^c X_c p_2 - gg_3^c X_c p_3 - gg_4^c X_c \quad (IV)$$

$$\text{onde } ff_i^a = \frac{1}{6} [(L\rho ff_i)_a + 4(L\rho ff_i)_r + (L\rho ff_i)_o], \quad gg_i^a = \frac{1}{6} [(L\rho gg_i)_a + 4(L\rho gg_i)_r + (L\rho gg_i)_o]$$

$$ff_i^c = \frac{1}{6} [(L\rho ff_i)_c + 4(L\rho ff_i)_t + (L\rho ff_i)_o], \quad gg_i^c = \frac{1}{6} [(L\rho gg_i)_c + 4(L\rho gg_i)_t + (L\rho gg_i)_o],$$

com $i = 1, 2, 3, 4$

Substituindo os termos dados acima na equação da conservação da massa e isolando as pressões, tem-se

$$\int_a^o \rho \mathbf{u}^m \cdot \mathbf{n} dA_n + \int_o^c \rho \mathbf{u}^m \cdot \mathbf{n} dA_n = (A_1^c - A_1^a) p_1 + (A_2^c - A_2^a) p_2 + (A_3^c - A_3^a) p_3 + (A_4^c - A_4^a) \quad (4.85)$$

onde

$$A_1^a = (\overline{ff}_1^a Y_a - g g_1^a X_a), \quad A_2^a = (\overline{ff}_2^a Y_a - g g_2^a X_a), \quad A_3^a = (\overline{ff}_3^a Y_a - g g_3^a X_a), \quad A_4^a = (\overline{ff}_4^a Y_a - g g_4^a X_a),$$

$$A_1^c = (\overline{ff}_1^c Y_c - g g_1^c X_c), \quad A_2^c = (\overline{ff}_2^c Y_c - g g_2^c X_c), \quad A_3^c = (\overline{ff}_3^c Y_c - g g_3^c X_c), \quad A_4^c = (\overline{ff}_4^c Y_c - g g_4^c X_c)$$

Reagrupando novamente os termos, finalmente o fluxo de massa através das superfícies *ao* e *oc* pode ser escrito em função das pressões nodais como:

$$\int_a^o \rho \mathbf{u}^m \cdot \mathbf{n} dA_n + \int_o^c \rho \mathbf{u}^m \cdot \mathbf{n} dA_n = D_1^{ca} p_1 + D_2^{ca} p_2 + D_3^{ca} p_3 + D_4^{ca} \quad (4.86)$$

onde $D_1^{ca} = (A_1^c - A_1^a)$, $D_2^{ca} = (A_2^c - A_2^a)$, $D_3^{ca} = (A_3^c - A_3^a)$, $D_4^{ca} = (A_4^c - A_4^a)$

Acrescentando a contribuição das outras superfícies associadas aos outros elementos que partilham o nó *i* e introduzindo as contribuições do divergente das pseudo-velocidades em um vetor b_i^p , a integral do fluxo de massa relacionada a cada nó do domínio pode ser escrita na forma algébrica como:

$$\oint_{A_{ni}} \rho \mathbf{u}^m \cdot \mathbf{n} dA_n = a_i^p p_i - \sum_{nb} a_{nb}^p p_{nb} - b_i^p \quad (4.87)$$

onde *nb* faz referência aos nós vizinhos a *i*.

Finalmente, pode-se substituir a equação (4.87) na equação (4.82) para obtenção da equação algébrica da pressão:

$$a_i^p p_i = \sum_{nb} a_{nb}^p p_{nb} + b_i \quad (4.88)$$

onde $b_i = b_i^p - \frac{1}{\Delta t} (1,5M_i - 2M_i^0 + 0,5M_i^{00})$

4.7 – CONDIÇÕES DE CONTORNO

Todas as equações algébricas foram desenvolvidas para os nós internos do domínio, para que estas possam ser resolvidas são necessárias equações para os volumes que estão nas fronteiras. Para a obtenção destas equações duas situações serão consideradas, uma onde o valor de ϕ é especificado, condição de Dirichlet, e outra onde a derivada de ϕ é conhecida, condição de Neumann.

A condição de Dirichlet pode ser expressa como:

$$\phi = \phi_0 \quad \text{em} \quad \partial\Omega_d,$$

Onde: ϕ_0 é uma distribuição especificada de ϕ sobre uma parte do contorno do domínio, destacada de $\partial\Omega_d$.

Para imposição da condição de Dirichlet, os nós “ i ” de contorno, localizados em $\partial\Omega_d$, terão os coeficientes correspondentes da equação algébrica de ϕ sobrescritos como:

$$a_i^\phi = 1; \quad a_{nb}^\phi = 0; \quad b_i^\phi = \phi_0$$

No caso da condição de Neumann, a derivada de ϕ normal ao contorno é especificada sobre uma parte do contorno do domínio, identificada de $\partial\Omega_n$. Esta condição pode ser escrita explicitamente como:

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} = \left(\frac{\partial\phi}{\partial n}\right)_0 \quad \text{em} \quad \partial\Omega_n,$$

Onde: \mathbf{n} é o vetor normal unitário.

O fluxo de convecção-difusão através de $\partial\Omega_n$ pode ser expresso como:

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{n} = (\rho \mathbf{u}^m \phi - \Gamma_\phi \nabla \phi) \cdot \mathbf{n} \quad (4.89)$$

ou $\mathbf{J} \cdot \mathbf{n} = \rho u_n^m \phi - \Gamma_\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_0$ em $\partial \Omega_n$,

onde u_n^m é a componente de velocidade normal a $\partial \Omega_n$, dada por: $u_n^m = u^m \left(\frac{Y_{a1}}{s_{1a}} \right) - v^m \left(\frac{X_{a1}}{s_{1a}} \right)$ e s_{1a} é o comprimento do contorno $1a$.

A contribuição da superfície $1-a$ para a equação (4.46), referente ao nó 1, é:

$$\int_1^a \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA_n = \int_1^a \left[\rho u_n^m \phi L - \Gamma_\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_0 L \right] ds \quad (4.90)$$

Considerando a variação linear de $\left[\rho u_n^m \phi L - \Gamma_\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_0 L \right]$ entre os nós 1 e 2, este termo pode ser aproximado no ponto m como:

$$\left[\rho u_n^m \phi L - \Gamma_\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_0 L \right]_m = 0,75 \left[\rho u_n^m \phi L - \Gamma_\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_0 L \right]_1 + 0,25 \left[\rho u_n^m \phi L - \Gamma_\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_0 L \right]_2 \quad (4.91)$$

Será assumido que o fluxo de difusão avaliado em m prevalece sobre todo o contorno $1a$. Deste modo a integral do fluxo de convecção-difusão pode ser aproximada como

$$\int_1^a \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA_n = \left\{ 0,75 \left[\rho u_n^m \phi L - \Gamma_\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_0 L \right]_1 + 0,25 \left[\rho u_n^m \phi L - \Gamma_\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_0 L \right]_2 \right\} s_{1a} \quad (4.92)$$

Condição de Contorno de Fluxo de Massa

O transporte de massa através das superfícies dos contornos deve ser incluído na equação da conservação da massa para o volume de controle que envolve o correspondente nó de contorno. Considerando que o segmento 1-2 do elemento mostrado na figura (4.9), pertence ao contorno, o fluxo de massa através da superfície $1-a$ assume a seguinte forma:

$$\int_1^a \rho u_n^m dA_n = \int_1^a \rho u_n^m L ds \quad (4.93)$$

A solução da equação acima pode ser obtida a partir da equação (4.92) se for considerado $\Gamma_\phi = 0$ e $\phi = 1$, assim:

$$\int_1^a \rho u_n^m dA_n = \{0,75[\rho u_n^m L]_1 + 0,25[\rho u_n^m L]_2\} s_{1a} \quad (4.94)$$

No caso do fluxo de saída de massa, onde as componentes de velocidade não são prescritas, os valores das componentes de velocidade podem ser estimados como os mais recentemente calculados. Assim, as condições de contorno podem ser atualizadas durante o processo iterativo até a convergência global do método numérico.

Um procedimento especial é utilizado nos nós pertencentes ao contorno com velocidades prescritas (tais como fluxo de entrada de massa e parede sólida). Neste caso, seguindo procedimento descrito em Prakash e Patankar (1985), para os nós de contorno os coeficientes de pressão, d_i'' , são considerados nulos e as pseudo-velocidades, \hat{u}_i , são consideradas iguais às velocidades dos contornos.

4.8 – ALGORITMO DE SOLUÇÃO DO ACOPLAMENTO P – V: PRESSÃO-VELOCIDADE.

Em cada passo de tempo um algoritmo iterativo de ajuste sequencial das variáveis será utilizado para resolver o conjunto acoplado de equações não lineares para u , v , p . O algoritmo que será utilizado no presente trabalho é baseado no *Enhanced Sequential Solution Algorithm - ESSA* de Afshar e Baliga (1993), com algumas modificações.

O algoritmo de solução consiste basicamente na repetição de laços iterativos internos e externos. Em cada laço externo os coeficientes das equações discretizadas são calculados e armazenados. Seguindo, um laço interno é realizado, no qual as soluções das equações discretizadas são feitas sequencialmente, sem recálculo dos coeficientes das equações. Segundo Afshar e Baliga (1993) o laço interno aumenta o acoplamento entre as equações antes de atualizar as não linearidades presentes nos coeficientes.

A modificação no algoritmo *ESSA* proposta neste trabalho consiste na introdução de um cálculo das componentes de velocidade no laço interno, antes do cálculo das

pseudo-velocidades. Este cálculo é proposto porque os coeficientes das equações algébricas sozinhos já contribuem para a convergência das velocidades, não existindo a necessidade de aguardar o cálculo do campo de pressões para que as velocidades sejam calculadas. Além disso, também foi verificado em algumas simulações que este cálculo da velocidade aumenta o acoplamento entre pressão e velocidade, possibilitando o uso de maiores fatores de sub-relaxação para atualização das componentes de velocidade. Evidentemente depois da primeira iteração interna, como os coeficientes das equações algébricas não são recalculados, a convergência é reduzida a cada iteração, até se anular. Por isso, o uso de um número grande de iterações internas deve ser utilizado com cautela, sob pena de aumento do tempo de CPU.

Os algoritmos de solução propostos por Saabas e Baliga (1994) e Afshar e Baliga (1993) são apresentados junto com o algoritmo proposto no presente trabalho. Deve-se verificar que algoritmo de Saabas e Baliga (1994) é adaptação do algoritmo SIMPLER de Patankar (1980), onde não é considerada a primeira correção de pressão. E também se deve atentar que o algoritmo *ESSA* apresentado na tabela 4.2 não é exatamente igual ao proposto em Afshar e Baliga (1993), mas de uma adaptação do original para uso com o CVFEM.

Na figura 4.11, no campo onde é indicada a estimativa inicial das variáveis também é realizada a atribuição de valores para ρ , μ , Γ_ϕ , S_u , S_v e S_ϕ . O campo de procedimento de solução iterativo é apresentado detalhadamente na tabela 4.2.

Tabela 4.2 - Algoritmos de acoplamento pressão-velocidade.

Algoritmo de Saabas e Baliga (1994)	Afshar e Baliga (1993)	Algoritmo Proposto no Presente Trabalho
1. Estimativa inicial das variáveis;	1. Estimativa inicial das variáveis.	1. Estimativa inicial das variáveis.
	Início do laço externo	Início do laço externo
2. Cálculo e montagem dos coeficientes das equações de momentum, equações (4.70) e (4.71), sem contribuição dos termos de gradiente de pressão.	2. Cálculo e montagem dos coeficientes das equações de momentum, equações (4.70) e (4.71). Sem contribuição dos termos de gradiente de pressão. Cálculo e montagem dos coeficientes da equação da pressão, equação (4.88). Cálculo dos coeficientes d^u e d^v . Inclusão das contribuições das condições de contorno, armazenamento destes coeficientes para uso no laço interno.	2. Cálculo e montagem dos coeficientes das equações de momentum, equações (4.70) e (4.71). Sem contribuição dos termos de gradiente de pressão. Cálculo e montagem dos coeficientes da equação da pressão, equação (4.88). Cálculo dos coeficientes d^u e d^v . Inclusão das contribuições das condições de contorno, armazenamento destes coeficientes para uso no laço interno.
	Início do laço interno	Início do laço interno
		*Cálculo do campo de velocidades a partir das velocidades mais recentemente calculadas e sub-relaxação das velocidades encontradas.
3. Cálculo das pseudo-velocidades e dos coeficientes d^u e d^v , e ajuste destes valores para os nós onde as velocidades são conhecidas.	3. Cálculo das pseudo-velocidades e ajuste destes valores para os nós onde as velocidades são conhecidas.	3. Cálculo das pseudo-velocidades e ajuste destes valores para os nós onde as velocidades são conhecidas.
4. Cálculo dos coeficientes da equação pressão e cálculo do campo pressão.	4. Cálculo do campo de pressão.	4. Cálculo do campo de pressão.
5. Cálculo das velocidades a partir das pressões obtidas no passo anterior.	5. Cálculo das velocidades a partir das pressões obtidas no passo anterior.	5. Cálculo das velocidades a partir das pressões obtidas no passo anterior.
6. Checar convergência e retornar ao passo 2 com as equações sub-relaxadas se necessário.	6. Checar convergência e número máximo de laços internos, retornar ao passo 2 se necessário, de outro modo sair do laço interno.	6. Checar convergência e o número máximo de laços internos, retornar ao passo 2 se necessário, de outro modo sair do laço interno.
	Fim do laço interno	Fim do laço interno
	7. Checar a convergência do laço externo, e retornar ao passo 2 se necessário com as velocidades sub-relaxadas, de outro modo sair do laço externo.	7. Checar a convergência do laço externo, e retornar ao passo 2 se necessário com as velocidades sub-relaxadas, de outro modo sair do laço externo.
	Fim do laço externo	Fim do laço externo

*Cálculo do campo de velocidades $(\mathbf{u})^N = (u_i)^N \mathbf{i} + (v_i)^N \mathbf{j}$ a partir das velocidades mais

recentemente calculadas $(\mathbf{u})^A = (u_i)^A \mathbf{i} + (v_i)^A \mathbf{j}$ é realizado da seguinte forma:

$$(u_i)^N = \frac{1}{a_i} \left[\sum_{nb} a_{nb} u_{nb}^A + b_i - V_i \left\langle \frac{\partial p}{\partial x} \right\rangle_i \right], \quad (v_i)^N = \frac{1}{a_i} \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{nb}^A + b_i - V_i \left\langle \frac{\partial p}{\partial y} \right\rangle_i \right] \quad e$$

$$\mathbf{u} = \alpha_{sr} (\mathbf{u})^N + (1 - \alpha_{sr}) (\mathbf{u})^A$$

O cálculo da velocidade é realizado de forma similar a uma iteração de Jacobi.

No presente trabalho somente os sistemas de equações das componentes de velocidade serão resolvidos iterativamente. Devido às não linearidades deste conjunto de equações é necessário utilizar um controle de atualização de u , v . Isto será feito através do fator de sub-relaxação α_{sr} que reduzirá as alterações de u e v produzidas em cada iteração. Neste esquema o valor das variáveis u e v são dependentes dos novos valores calculados, u_N e v_N , e dos valores calculados na iteração anterior, u_A e v_A :

$$u = \alpha_{sr} u_N + (1 - \alpha_{sr}) u_A \quad (4.98a)$$

$$v = \alpha_{sr} v_N + (1 - \alpha_{sr}) v_A \quad (4.98b)$$

A convergência dos cálculos será medida através da redução das variáveis $\mathcal{E}_{erro,u}$ e $\mathcal{E}_{erro,v}$, chamadas de resíduo de cálculo, definidas nas equações (4.99a) e (4.99b), respectivamente. A convergência será considerada alcançada quando as variáveis $\mathcal{E}_{erro,u}$ e $\mathcal{E}_{erro,v}$ forem menores que um determinado valor pré-estabelecido.

$$\mathcal{E}_{erro,u} = \sqrt{\sum_{i=1}^{N_{vol}} (u_{N,i} - u_{A,i})^2} \quad (4.99a)$$

$$\mathcal{E}_{erro,v} = \sqrt{\sum_{i=1}^{N_{vol}} (v_{N,i} - v_{A,i})^2} \quad (4.99b)$$

onde N_{vol} indica o número total de volumes de controle da malha.

Todos os sistemas de equações utilizados no presente trabalho podem ser postos na forma comum: $[A^\phi]\phi = B^\phi$. Onde $[A^\phi]$ é uma matriz $N_{vol} \times N_{vol}$, que quase sempre é esparsa, o que significa que possui muitos zeros. O procedimento de montagem da matriz $[A^\phi]$ programado no código numérico leva em consideração este aspecto. A vantagem de se trabalhar apenas com os elementos não nulos está no armazenamento e manipulação dos elementos das matrizes.

Com exceção das equações das componentes de velocidade, as demais equações algébricas serão resolvidas através de métodos de solução direta. Esta medida foi tomada para minimizar a possibilidade de divergência dos cálculos.

Para acelerar o cálculo do sistema de equações de pressão, $[A^p] p = B^p$, a matriz $[A^p]$ será decomposta antes do laço interno: $[L][U]p = B^p$ e as partes armazenadas. No laço interno somente B^p modifica e este será recalculado a cada iteração interna. Deste modo o sistema de equações da pressão no laço interno será resolvido simplesmente através de substituições sucessivas para obtenção de $D^p = [L]^{-1} B^p$ e depois de $p = [U]^{-1} D^p$.

4.9 – ALGORITMO DE SOLUÇÃO DO ACOPLAMENTO $T_g - T_s$: ENERGIA FASE GÁS – ENERGIA FASE SÓLIDA.

A hipótese de não equilíbrio entre a fase sólida e a gasosa obriga a solução de duas equações de energia, uma para o meio gasoso e outra para o meio sólido, no meio poroso. Ambas as equações podem cobrir o domínio completo. Tratando o problema desta forma não é necessária a imposição de condições de contorno entre os meios. No entanto, estas duas equações são acopladas no meio poroso. Este acoplamento será resolvido de forma sequencial no presente trabalho, ou seja, uma equação será resolvida após a outra, e seus efeitos serão postos também em sequencia.

Os dois sistemas de equações algébricas podem ser postos como:

$$[A^{Ts}] T_s = B^{Ts} \text{ Sistema de equações gás-gás.}$$

$$[A^{Tg}] T_g = B^{Tg} \text{ Sistema de equações gás-sólido.}$$

Supondo que tanto $[A^{Ts}]$ quanto $[A^{Tg}]$ não variam com T_s e T_g , pode-se criar um laço iterativo onde tais valores não precisam ser recalculados. Além disso, podem-se decompor tais matrizes como: $[A^{Tg}] = [L^{Tg}][U^{Tg}]$ e $[A^{Ts}] = [L^{Ts}][U^{Ts}]$. Com esta decomposição a solução do sistema de equações gás-gás é feita como: $D^{Tg} = [L^{Tg}]^{-1} B^{Tg}$ e

$T_g = [U^{Tg}]^{-1} D^{Tg}$. A solução do sistema de equações sólido-gás pode ser realizada de forma similar. Com base no exposto o algoritmo proposto é apresentado na tabela 4.3.

Tabela 4.3 - Algoritmo de solução do acoplamento T_g-T_s

1. Cálculo dos termos de fonte e propriedades termo-físicas.
2. Cálculo e montagem dos coeficientes das equações de energia: $[A^{Tg}]$ e $[A^{Ts}]$
3. Decomposição das matrizes globais: $[A^{Tg}] = [L^{Tg}] [U^{Tg}]$ e $[A^{Ts}] = [L^{Ts}] [U^{Ts}]$
Início do Laço iterativo
4. Atribuição $T_{s,i}^A = T_{s,i}$
5. Cálculo de B^{Tg} com os valores mais recentes de T_s .
6. Solução do sistema de equações gás-gás: $D^{Tg} = [L^{Tg}]^{-1} B^{Tg}$ e $T_g = [U^{Tg}]^{-1} D^{Tg}$
7. Cálculo de B^{Ts} com os valores mais recentes de T_g .
8. Solução do sistema de equações sólido-gás: $D^{Ts} = [L^{Ts}]^{-1} B^{Ts}$ e $T_s = [U^{Ts}]^{-1} D^{Ts}$
9. Checar convergência, se $ T_{s,i}^A - T_{s,i} / T_{s,i} < \epsilon_{erro, Ts}$ para cada nó i, então ir para
Fim do Laço iterativo , caso contrário ir para Início do Laço iterativo .
Fim do Laço iterativo

4.10 – ALGORITMO DE SOLUÇÃO PARA AVANÇO DA SOLUÇÃO NO TEMPO

Considerando o avanço da solução no tempo, na figura 4.11 é apresentado o algoritmo de solução proposto.

Como o avanço na solução se dá através de incrementos de tempo e como os acoplamentos P-V e T_g-T_s requerem solução iterativa para cada passo de tempo. Se os incrementos de tempo forem pequenos, poucas iterações serão necessárias para convergência. Caso contrário, um número maior de iterações será necessário. Assim, constata-se que o custo computacional está intimamente ligado ao passo de tempo utilizado e na precisão requerida.

Também é importante mencionar que a precisão da evolução da solução no tempo esta intimamente ligada a um baixo resíduo de cálculo. Por exemplo, o resíduo associado acoplamento T_g-T_s deve ser $|T_{s,i}^A - T_{s,i}| / T_{s,i} < 10^{-6}$, para que se possa garantir precisão. Para o acoplamento T_g-Y_i o passo de tempo interno sempre será considerado menor que $5^{-7} s$. Para o acoplamento P-V os resíduos das componentes de velocidade nunca serão maiores que 10^{-5} .

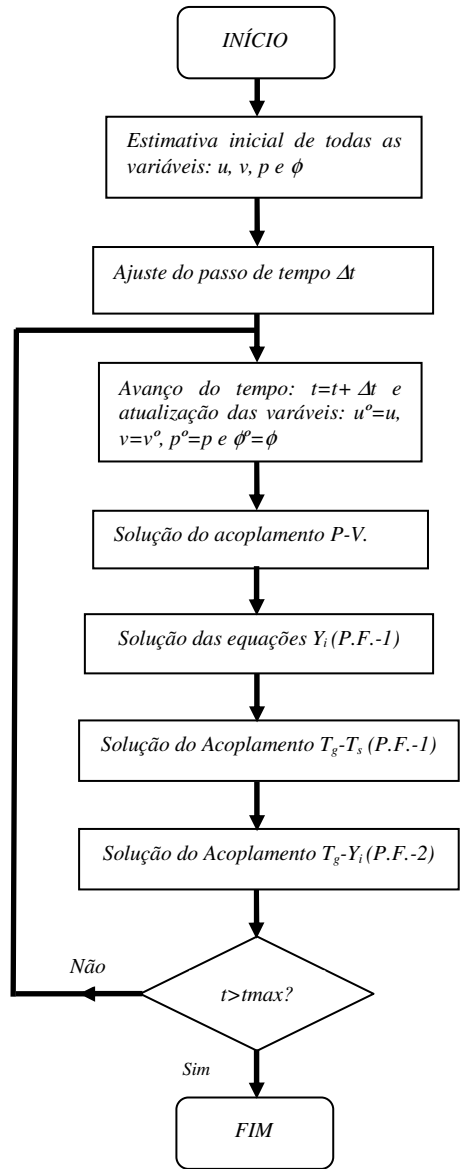


Figura 4.11 - Algoritmo de Solução.

5 – VALIDAÇÃO E APLICAÇÃO DO MODELO PROPOSTO

Neste capítulo será realizada a validação bem como aplicação do modelo proposto. A validação inicial compara resultados obtidos com predições e resultados experimentais publicados. Em seguida, o modelo é aplicado ao estudo da queima de partículas sólidas.

5.1 – VALIDAÇÃO DO MODELO – Escoamento não Reativo

Caso do escoamento induzido no interior de uma cavidade quadrada

O primeiro caso considerado é o da cavidade quadrada com tampa deslizante. O domínio é delimitado por $0 \leq x \leq L$ e $0 \leq y \leq L$, com $L=1$ e $u(x,L)=U_{\text{wall}}$. O número de Reynolds para este problema é definido como $Re = \rho U_{\text{wall}} L / \mu$. Nas simulações foram considerados números de Reynolds iguais a 400 e 1000. Uma malha com 40×40 volumes foi utilizada nas simulações e pode ser vista figura 5.1(a). As condições de contorno para este caso são $v=0$ em todas as paredes, $u=U_{\text{parede}}$ na parede superior e $u=0$ nas demais paredes. A pressão foi imposta igual à zero em um nó localizado em $x=0,5$ e $y=0$.

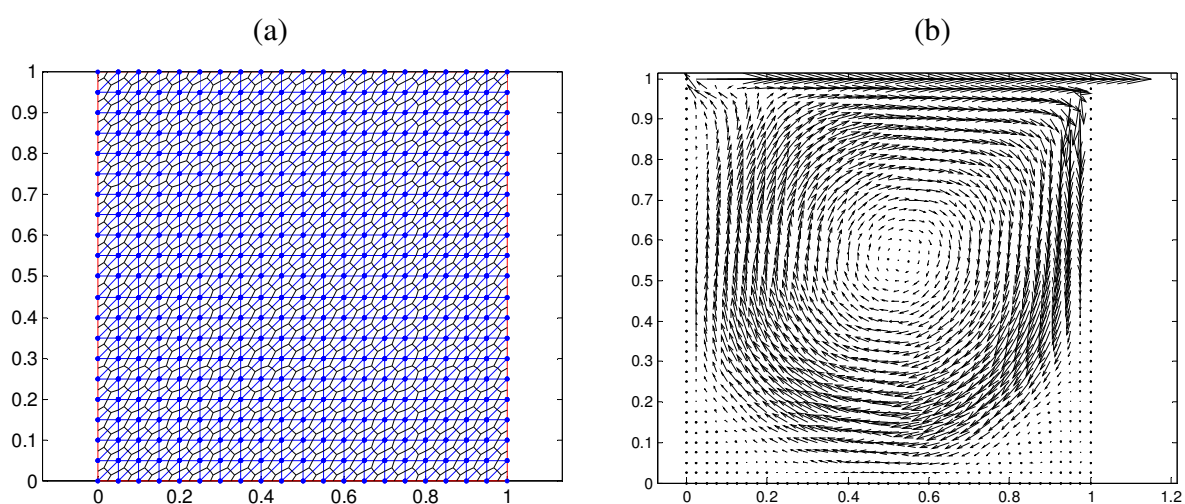


Figura 5.1 - (a) Malha semelhante à utilizada na simulação do caso da cavidade quadrada e (b) campo de velocidades calculado.

Nas figuras 5.2(a) e 5.2(b) são apresentados resultados obtidos nas simulações. No eixo das ordenadas o termo “resíduo” corresponde ao maior valor entre $\epsilon_{\text{erro},u}$ e $\epsilon_{\text{erro},v}$. Duas curvas são apresentadas, uma identifica a proposta do presente trabalho e uma segunda

identifica a solução obtida utilizando o algoritmo de Saabas e Baliga (1994). Para obtenção destes resultados foi utilizado um fator de sub-relaxação, α_{sr} , de 0,75 para o algoritmo de Saabas e Baliga (máximo valor para o qual foi possível obter convergência), e $\alpha_{sr}=0,95$ para o algoritmo proposto. Além disso, foram utilizadas 20 iterações internas para cada iteração externa. Com relação às curvas de convergência, a escala de tempo foi normalizada pelo maior tempo de CPU observado entre os casos comparados. Verifica-se convergência monotônica para o algoritmo proposto neste trabalho. O tempo de CPU para convergência da simulação com o algoritmo proposto é cerca de onze vezes menor que o tempo de CPU da simulação com o algoritmo de Saabas e Baliga (1994).

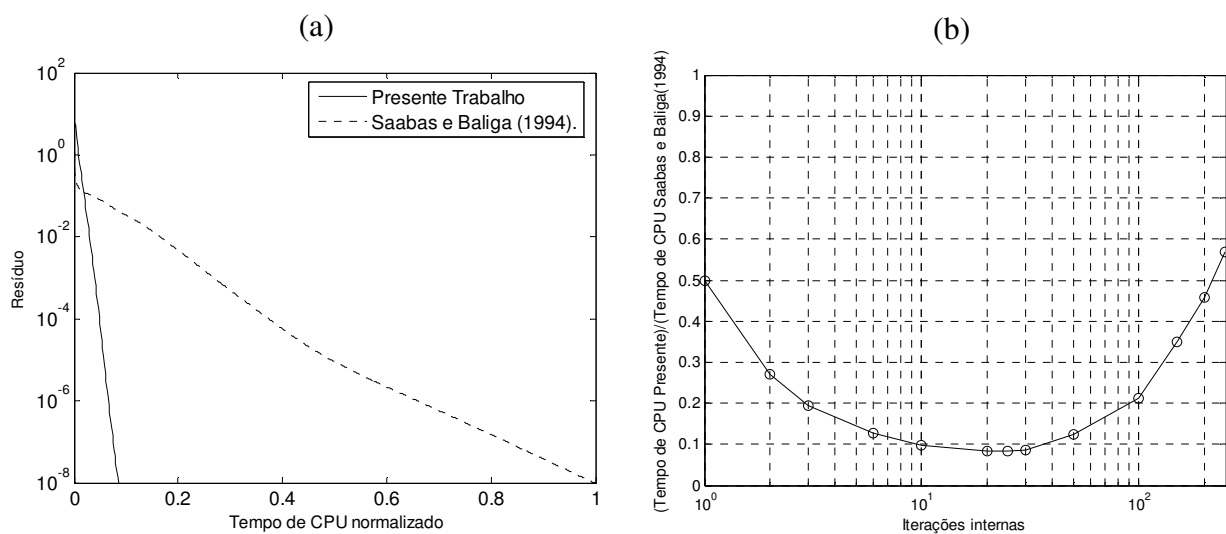


Figura 5.2 - (a) Curvas de convergência e (b) Efeito da variação do número de iterações internas sobre o tempo de CPU.

No algoritmo ESSA de Afshar e Baliga (1993) o conceito de laço interno é utilizado com o intuito de melhorar o acoplamento entre as equações antes de atualizar as não linearidades presentes nos coeficientes das equações de conservação, mas nenhum cálculo do campo de velocidades é mencionado dentro do laço interno como proposto no presente trabalho. Considerando o mesmo número de iterações internas para o algoritmo proposto no presente trabalho e para o algoritmo de Afshar e Baliga (1993), o efeito da introdução do cálculo da velocidade na convergência pode ser verificado. Como pode ser observado na figura 5.3, a taxa de redução dos resíduos é maior no algoritmo proposto. Neste caso foram utilizados $\alpha_{sr}=0,95$ e 20 iterações internas.

Para valores crescentes de iterações internas e fatores de sub-relaxação, o cálculo tende sempre a divergir para o algoritmo de Afshar e Baliga (1993), figuras 4.4(a) e 4.4(b).

Isso não acontece para o algoritmo proposto, o que ocorre é que a eficiência de redução dos resíduos diminui se o número de iterações internas for muito grande (figura 5.2(b)). Na figura 5.2(b) também pode ser verificado que existe um valor ótimo de iterações internas que conduz a uma convergência mais rápida. Além disso, é importante observar que a primeira iteração mostrada na figura 5.2(b), realizada com os coeficientes das equações algébricas “novos”, exibe a maior redução dos resíduos. Observou-se ainda que o cálculo proposto para as componentes de velocidade aumenta o acoplamento entre pressão e velocidade, o que possibilita o uso de maiores fatores de sub-relaxação, α_{sr} , para atualização das componentes de velocidade.

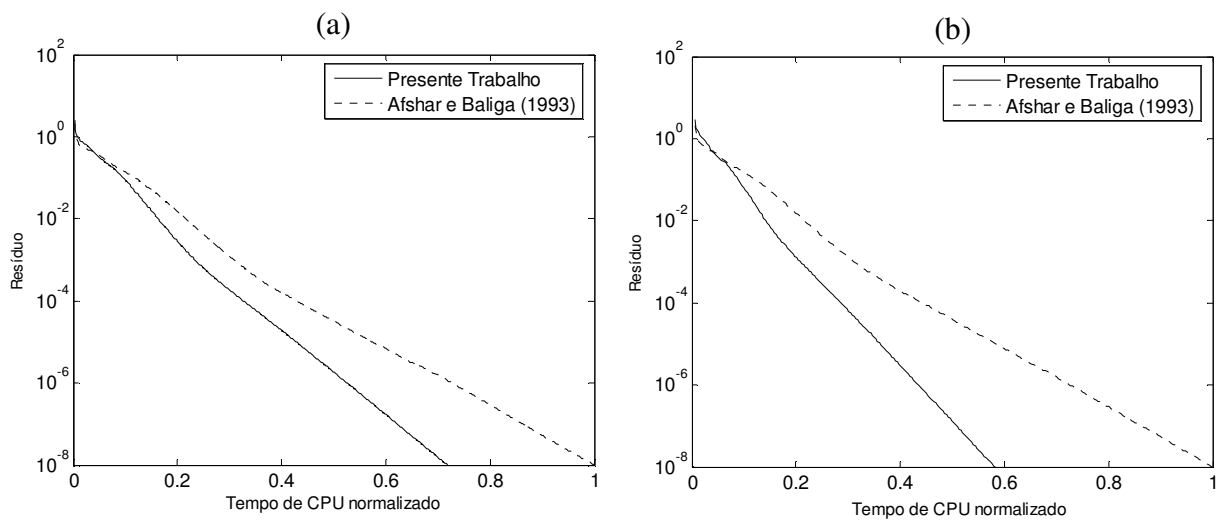


Figura 5.3 - Curvas de convergência: (a) 5 iterações internas e $\alpha_{sr}=0,5$ e (b) 5 iterações internas e $\alpha_{sr}=0,95$.

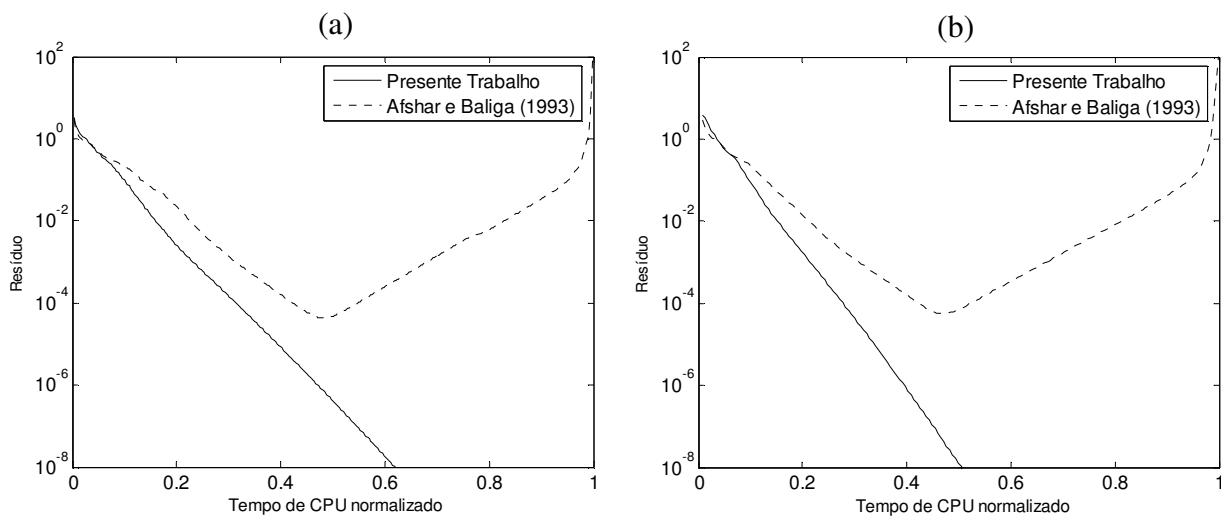


Figura 5.4 - Curvas de convergência: (a) 10 iterações internas e $\alpha_{sr}=0,5$ e (b) 10 iterações internas e $\alpha_{sr}=0,95$.

Caso do escoamento com cilindro infinito

O segundo caso simulado foi do escoamento passando em torno de um cilindro infinito. Para este caso foi considerado um número de Reynolds igual a 40, onde o cálculo do número de Reynolds é feito da seguinte forma: $Re_d = \rho U_\infty d / \mu$, onde U_∞ é a velocidade do escoamento livre, “d” é o diâmetro do cilindro e μ é a viscosidade do fluido.

O escoamento neste caso é simétrico em relação ao eixo do cilindro, assim apenas metade do domínio necessita ser modelado. Este caso foi estudado por Ammara e Masson (2004), que verificaram que se o domínio fosse cerca de 130 vezes maior que o diâmetro do cilindro os efeitos do contorno seriam minimizados sobre o campo de escoamento. Por isso, a dimensão do domínio foi considerada igual a 130d. Uma malha de 88x148 volumes foi utilizada. Uma malha similar, contudo, mais esparsa do que foi utilizada para este caso é mostrada na figura 5.5(a), com 22x37 volumes.

As condições de contorno para este caso são $v=0$ e $u=U_\infty$ em todo o contorno externo, $v=0$ e $\partial u / \partial x$ no eixo de simetria e $v=0$ e $u=0$ na parede do cilindro. A pressão foi imposta igual à zero em um nó localizado em $x=0,5$ e $y=0$.

Com relação aos resultados, figura 5.6(a), novamente verifica-se uma excelente taxa de convergência para o caso onde foi utilizado algoritmo proposto, similar a da figura 5.2(a). Neste caso foram utilizadas 30 iterações internas e $\alpha_{sr} = 0,5$ para os dois algoritmos comparados.

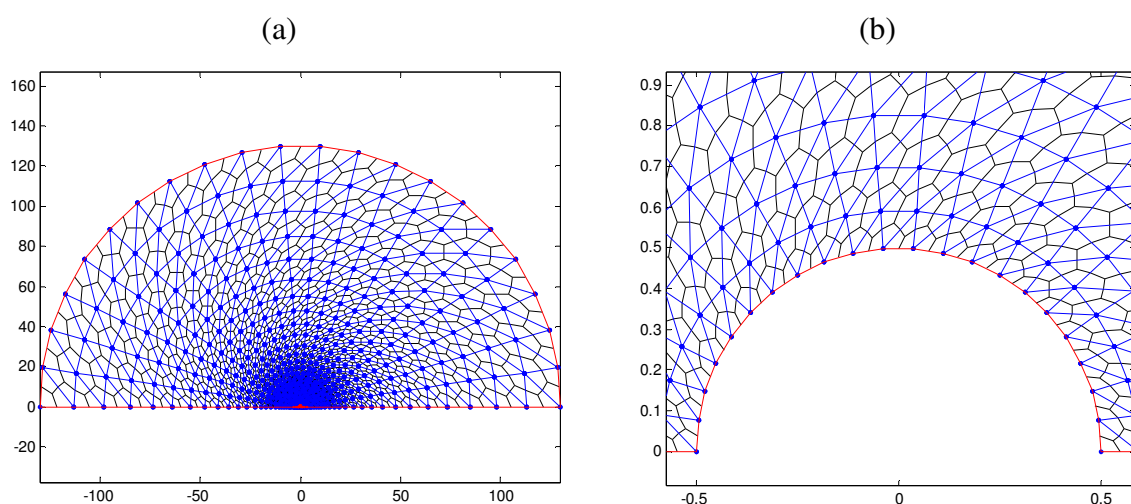


Figura 5.5 - (a) Malha similar a que foi utilizada na simulação (22x37 volumes) (b) Malha próxima ao cilindro.

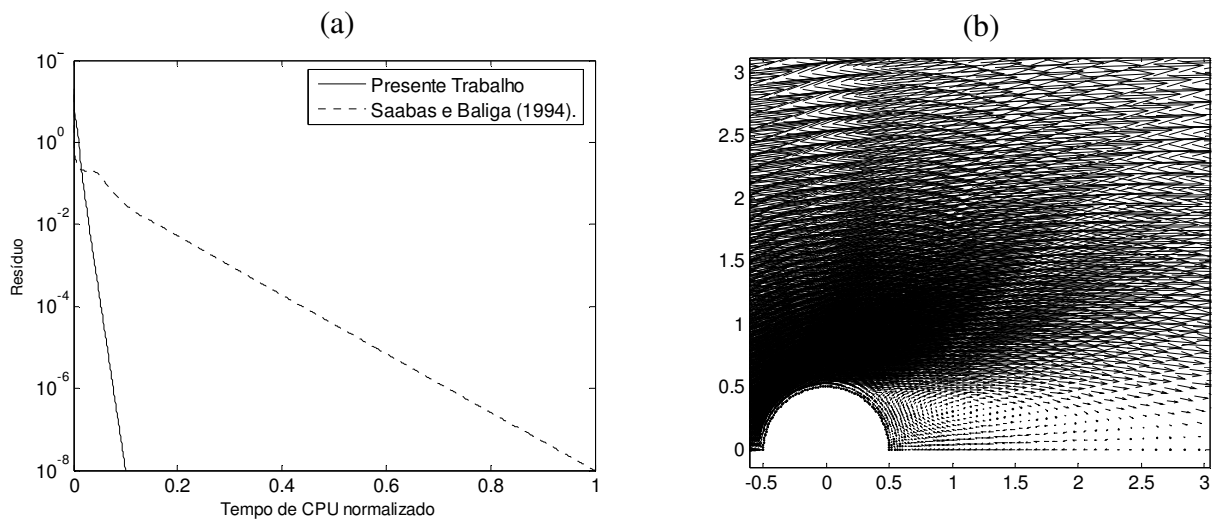


Figura 5.6 - (a) Curva de convergência e (b) campo de velocidades.

Conclusões Relacionadas à modificação do Algoritmo P-V.

A modificação proposta ao algoritmo P-V, inclusão do cálculo de velocidade antes do cálculo das pseudo-velocidades, se mostrou bastante efetiva para acelerar a convergência em relação aos algoritmos tradicionalmente utilizados no CVFEM, como pode ser verificado nas figuras 4.2(a) 4.6(a). A modificação também pode ser aplicada ao algoritmo de Saabas e Baliga (1994) e o resultado deve ser similar ao mostrado na figura 5.2(b), considerando somente a primeira iteração. Além de acelerar os cálculos a modificação também aumenta o acoplamento entre pressão e velocidade, pois foi possível avançar a solução com maiores fatores de sub-relaxação para u e v .

5.2 – VERIFICAÇÃO DA PROPOSTA DE CÁLCULO DO TERMO DE FONTE VOLUMÉTRICO

Este tópico testa a proposta de cálculo do termo de fonte volumétrico. Os gradientes de pressão presentes nas equações (4.68) e (4.69) foram calculados considerando o modo tradicional, equação (4.61), e o modo proposto no presente trabalho, equação (4.67).

Caso do escoamento induzido no interior de uma cavidade quadrada

O caso da cavidade quadrada é novamente utilizado. Nas simulações foi considerado número de Reynolds igual a 1000. Todas as malhas utilizadas nas simulações são uniformes quanto ao tamanho dos elementos. Na figura 5.7 é mostrada uma configuração aproximada dos perfis de velocidade que serão obtidos nas simulações, enfatizando quais são os picos de velocidade que serão utilizados para a validação da programação do método numérico.

As curvas de convergência para os casos simulados são apresentadas na Figura 5.8. No eixo das abscissas foi colocado o tempo de CPU normalizado pelo maior tempo de cálculo e o resíduo de cálculo é apresentado no eixo das ordenadas. As simulações foram conduzidas para as malhas (a) e (b) considerando os maiores fatores de sub-relaxação que conduziam a convergência. As simulações com as malha (c) e (d) utilizaram os mesmos fatores de sub-relaxação utilizados na malha (b). Como pode ser verificado pela Figura 5.8, foi possível utilizar maiores fatores de sub-relaxação para atualização de u e v quando se aplica a presente proposta de cálculo para avaliação da pressão nodal. Nota-se que as maiores diferenças entre tempo de CPU ocorrem para as malhas mais esparsas, o que se conclui que o procedimento é mais efetivo para este tipo de malha.

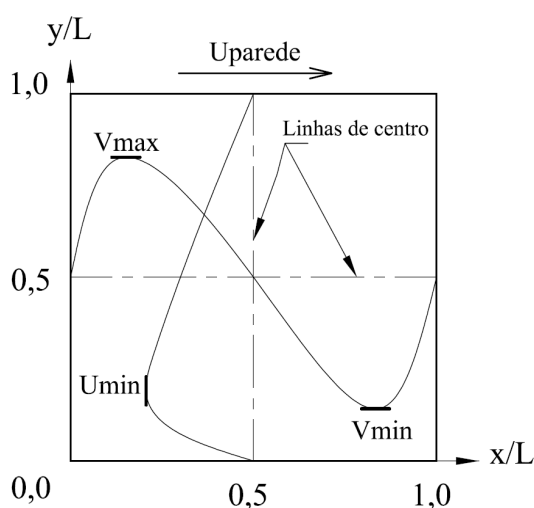


Figura 5.7 - Definição de linhas para apresentação de resultados.

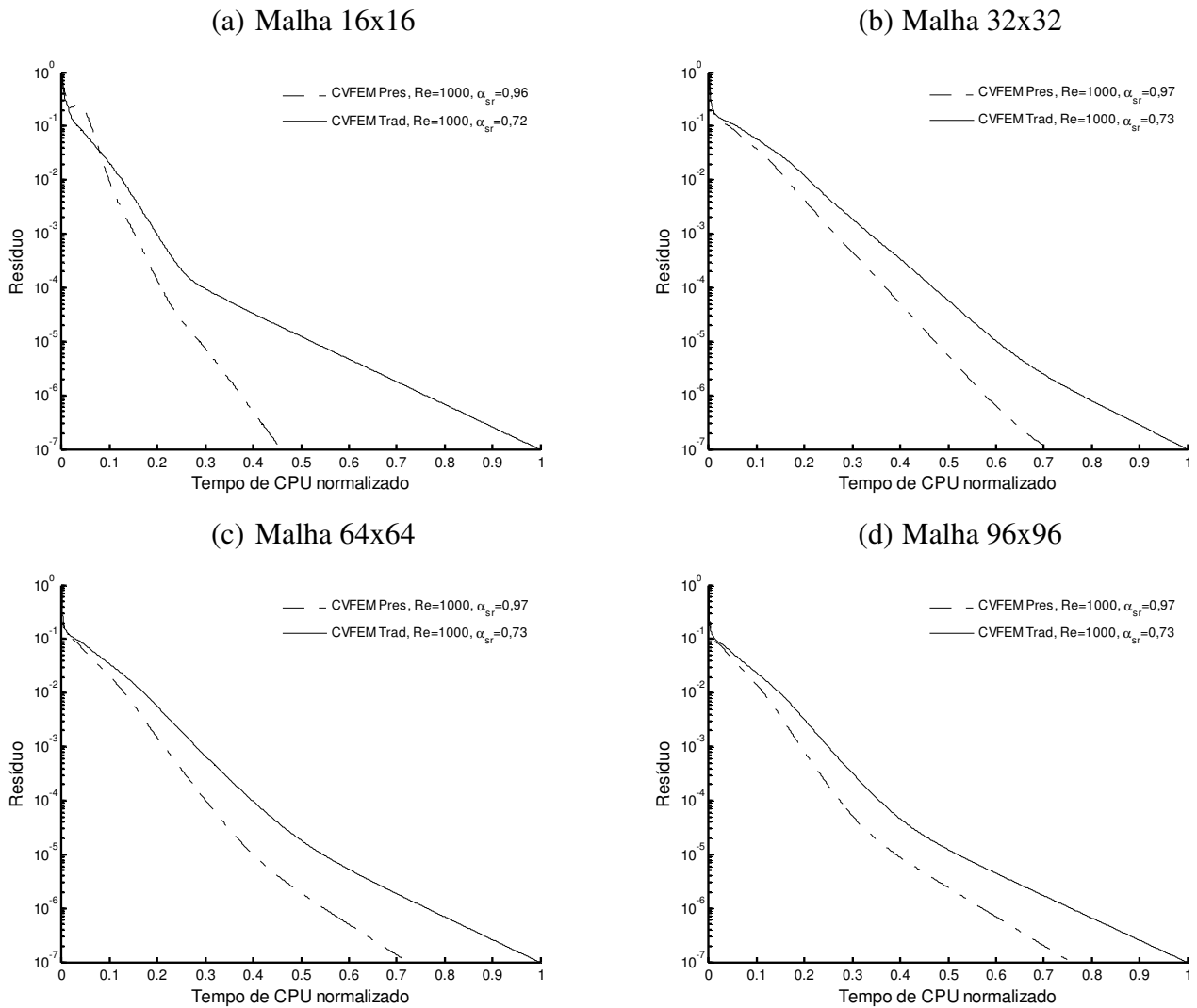


Figura 5.8 - Curvas de convergência para o caso da cavidade quadrada.

A Figura 5.9 apresenta as linhas de corrente para o caso de $Re=1000$. Verifica-se que a estrutura de vórtices típica para este caso foi capturada pela simulação, ver figura 5.9. Deste modo a validação do código, com as modificações propostas, pode ser relacionada aos três picos de velocidades apresentados na tabela 5.1. A presente proposta de cálculo do termo de fonte (gradientes de pressão) é indicada por “CVFEM Presente” e a tradicional é indicada por “CVFEM Tradicional”. Os resultados para as diferentes metodologias são muito próximos, e se aproximam ainda mais na medida em que a malha é refinada. Os resultados de Ammara e Masson (2004), que utilizam o CVFEM tradicional, são colocados como referência para efeito de validação da programação das equações no código numérico. As pequenas diferenças entre os resultados do “CVFEM tradicional”

simulado com os de Ammara e Masson (2004), que utilizam a mesma metodologia, podem ser atribuídas ao uso de diferentes malhas nas simulações.

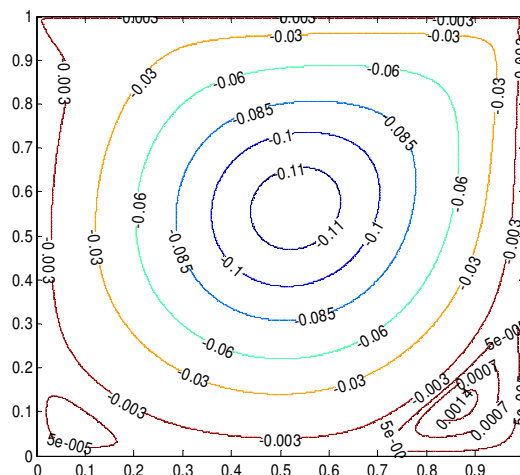


Figura 5.9 - Linhas de corrente para o escoamento induzido no interior da cavidade quadrada para $Re=1000$.

Tabela 5.1 - Velocidade máxima e mínima nas linhas de centro da cavidade quadrada.

Malha	Umin /Uparede			Vmin /Uparede			Vmax /Uparede		
	Ammara e Masson (2004)	CVFEM Presente	CVFEM Tradicional	Ammara e Masson (2004)	CVFEM Presente	CVFEM Tradicional	Ammara e Masson (2004)	CVFEM Presente	CVFEM Tradicional
32x32	-0,3061	-0,3009	-0,3145	-0,4551	-0,4428	-0,4616	0,2898	0,2853	0,2947
64x64	-0,3419	-0,3420	-0,3444	-0,4828	-0,4829	-0,4875	0,3271	0,3283	0,3307
96x96	-0,3596	-0,3602	-0,3612	-0,4988	-0,5004	-0,5020	0,3458	0,3476	0,3485

Caso do escoamento em torno de cilindro infinito

Para o caso do escoamento passando por um cilindro infinito foram considerados números de Reynolds iguais a 20 e 40. As condições de contorno deste caso são similares as do caso anteriormente apresentado.

Como pode ser visto na figura 5.10, foi possível utilizar maiores fatores de sub-relaxação para a proposta do presente trabalho, tal como foi verificado para o caso da cavidade quadrada. Este fato indica uma superioridade da metodologia proposta para o cálculo do termo de fonte volumétrico a partir dos termos de fonte dos elementos.

A Figura 5.11 mostra para $Re=20$ a estrutura do escoamento próxima do cilindro obtida pela simulação. Esta estrutura se assemelha a configuração esperada para este caso,

que é a de uma recirculação localiza após o cilindro. O comprimento desta recirculação, que está destacado na figura 5.11, será utilizado para validação da metodologia.

Como pode ser verificado na tabela 5.2 existe uma boa concordância dos resultados obtidos no presente trabalho com os resultados de referência, indicando que o CVFEM foi adequadamente programado no código e que a metodologia proposta para o cálculo do termo de fonte volumétrico é válida.

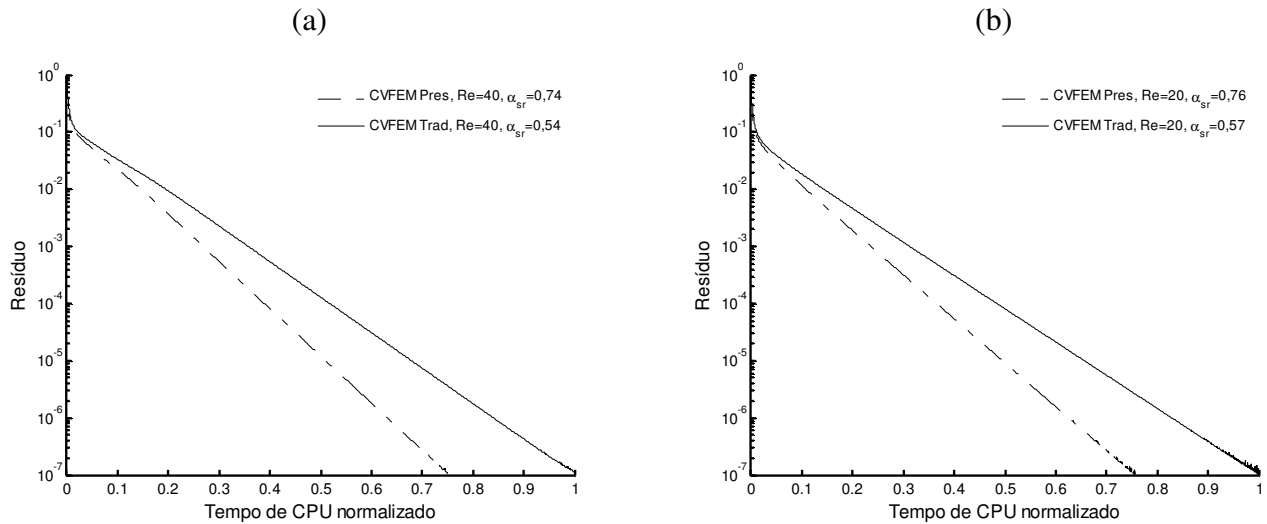


Figura 5.10 - Curvas de convergência para o caso teste (Malha 88x138).

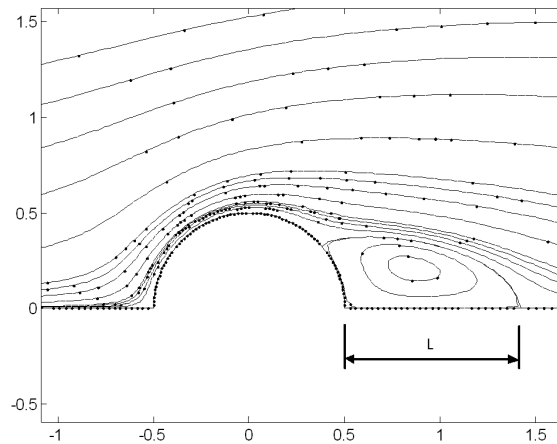


Figura 5.11 - Linhas de corrente do escoamento, caso do cilindro, Re=20.

Tabela 5.2 - Comprimento da recirculação para Re=20 e Re=40.

Método	Malha	L/d (Re = 20)	L/d (Re = 40)
CVFEM Pres.	88x138	0,90	2,19
CVFEM Trad.	88x138	0,90	2,20
Ammara e Masson (2004)	88x138	0,90	2,20

Conclusões Relacionadas à integração do Termo de Fonte Volumétrico

O procedimento de cálculo para avaliar os termos de fonte volumétricos a partir dos termos de fonte dos elementos se mostrou eficiente, apesar de ser necessária à resolução de mais um sistema de equações. Para os casos apresentados notou-se o aumento de estabilidade da solução segregada das equações de Navier-Stokes, o que possibilitou a utilização de maiores valores de sub-relaxação na atualização das componentes de velocidade, diminuindo o tempo de CPU para a solução das equações.

5.3 – AVALIAÇÃO DO NÚMERO DE PECKET BASEADO NO COMPRIMENTO MÉDIO DO ELEMENTO.

Neste tópico é realizada a verificação da proposta de cálculo do número de Peclet baseado no comprimento médio do elemento. Quatro casos foram considerados. Os dois primeiros são para verificação de estabilidade e difusão numérica.

Os casos da cavidade quadrada e do escoamento em torno de um cilindro foram utilizados para verificação da proposição para a estimativa do campo de velocidades. Para o caso da cavidade quadrada os resultados de Guia (1982) foram utilizados como referência numérica. Já para o caso do escoamento em torno de um cilindro os resultados de Fornberg (1980) foram utilizados como referência. Os resultados de Ammara e Masson (2004) foram escolhidos como referência do CVFEM. A diferença entre a formulação de Ammara e Masson (2004) e do presente trabalho reside apenas no método de avaliar a velocidade característica do elemento, U_{Pe} . Nas simulações apresentadas, os cálculos foram considerados convergidos quando o resíduo de todas as equações fosse menor que 10^{-8} .

Problema de convecção-difusão entre placas paralelas

O primeiro caso teste é o de convecção-difusão entre placas paralelas ilustrado na figura 5.12. Este problema é amplamente utilizado para análise de estabilidade de técnicas numéricas de problemas convectivos dominantes. O problema é regido pela equação:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} - \frac{u}{\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0, \quad (x, y) \in \Omega = (0,1) \times (0,1) \quad (5.1)$$

Se a velocidade no domínio completo é prescrita unitária na direção-x, e considerando as condições de contorno apresentadas na figura 5.12, a solução exata da equação é conhecida:

$$\phi = \frac{\cos(\pi y)}{e^a - e^b} (e^{a+bx} - e^{b+ax}) \quad (5.2)$$

onde $a = \frac{1}{2} (Pe + \sqrt{Pe^2 + 4\pi^2})$ e $b = \frac{1}{2} (Pe - \sqrt{Pe^2 + 4\pi^2})$. E o número de Péclet é $Pe = \frac{u}{\alpha}$.

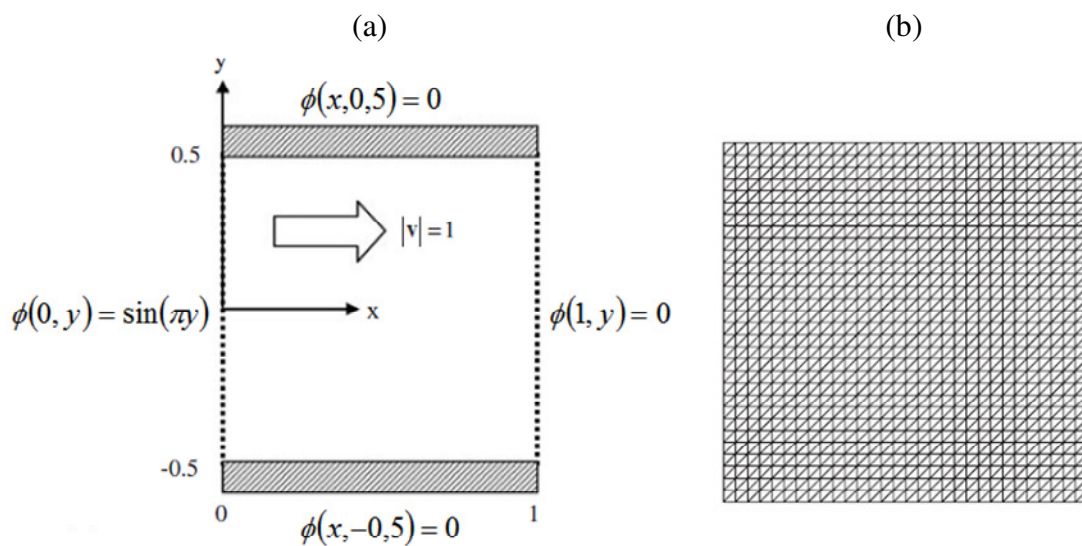


Figura 5.12 - (a) Ilustração do problema de convecção-difusão e (b) malha de elementos.

Três casos foram simulados, considerando: $Pe=40$, $Pe=80$ e $Pe=160$. Os resultados serão apresentados na ordem crescente de número de Peclet. Na figura 5.13 os resultados são apresentados para $Pe=40$. Para efeito de comparação entre os resultados numéricos, a figura 5.13(b) também apresenta as diferenças entre os resultados numéricos com o analítico, pode-se notar que existe uma diferença nas predições. Os resultados para a presente proposição são mais próximos do resultado analítico para os três números de Peclet considerados.

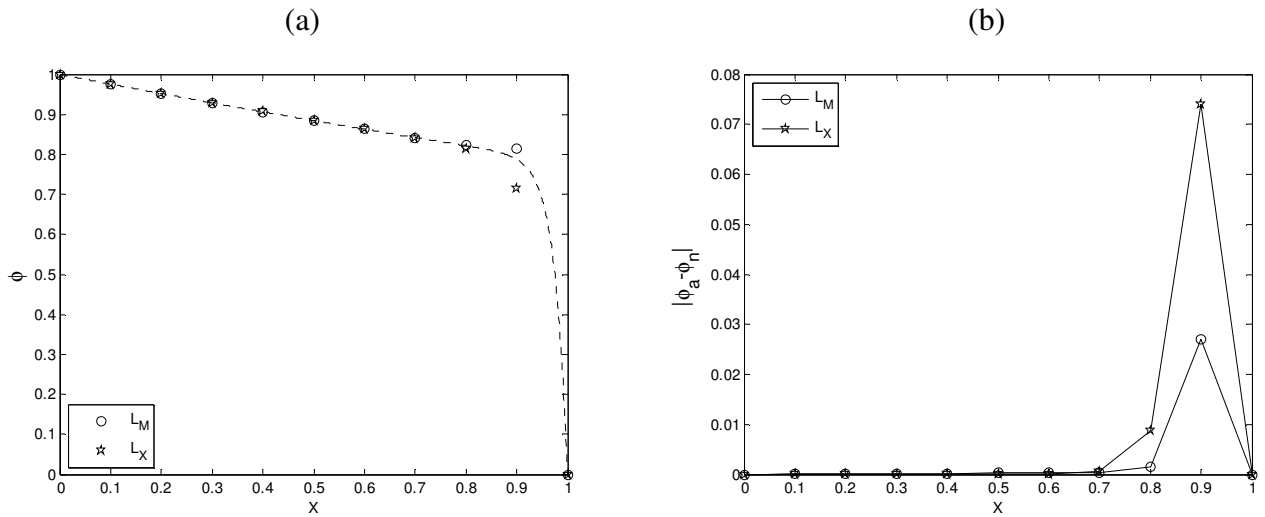


Figura 5.13 - Perfil de ϕ e $|\phi_a - \phi_n|$ com relação a x em $y=0$, Peclet=40, malha 9×9 volumes.

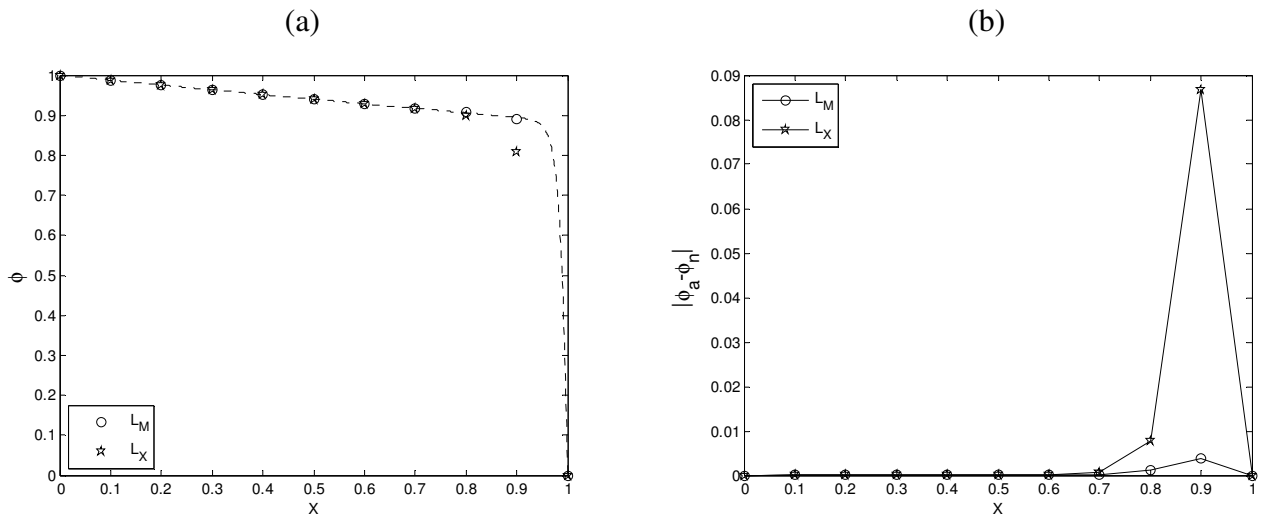


Figura 5.14 - Perfil de ϕ e $|\phi_a - \phi_n|$ com relação a x em $y=0$, Peclet=80, malha 9×9 volumes.

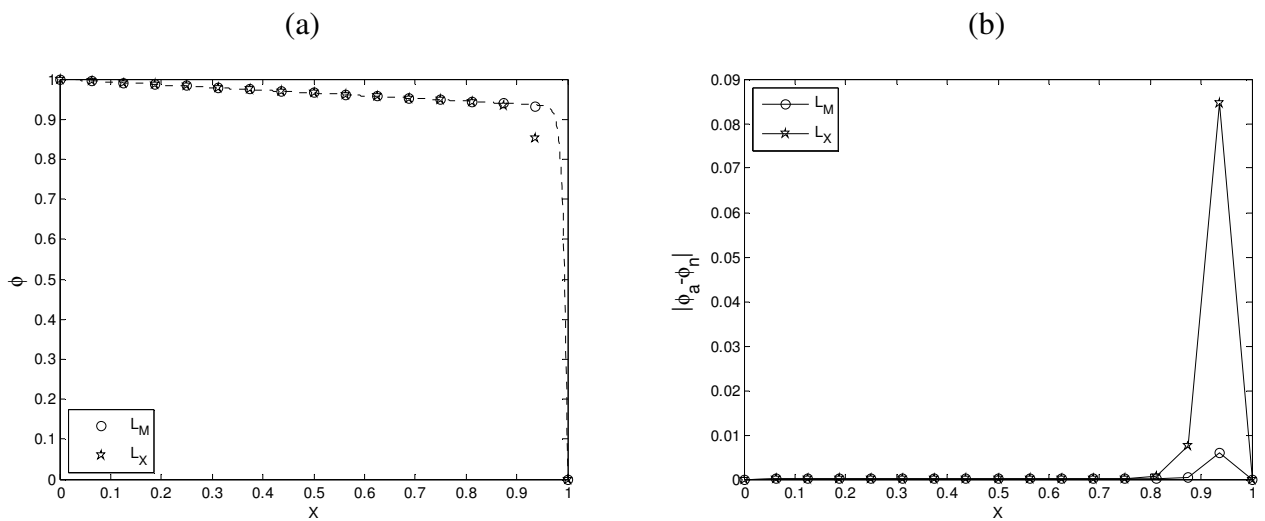


Figura 5.15 - Perfil de ϕ e $|\phi_a - \phi_n|$ com relação a x em $y=0$, Peclet=160, malha 21×21 volumes.

Problema de Convecção-Difusão de um Pulso

O problema de Convecção-Difusão de um pulso é ilustrado na figura 5.16 e 5.17. Os ângulos de inclinação do vetor velocidade foram assumidos iguais a 30° e 45°. Considerando $Pe \rightarrow \infty$ e solução exata é conhecida e se constitui num salto de ϕ , de 0 para 1, como mostrado na figura 5.18. Uma solução analítica aproximada também será empregada na comparação Eq. (5.3), obtida desconsiderando a difusão na direção do escoamento (Maliska, 2004).

$$\phi = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \operatorname{erf} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\rho}{\Gamma_\phi} \right)^{0.5} \left(\frac{(y - y_c)u - xv}{((y - y_c)v + xu)^{0.5}} \right) \right] \right\} \quad (5.3)$$

As condições de contorno deste caso são identificadas na figura 5.16. Nos cálculos foi adotado $L=0,5$; $\Gamma_\phi=1$ e $\rho=1$. A linha de resultados está em $x=0,25$ e é paralela ao eixo y .

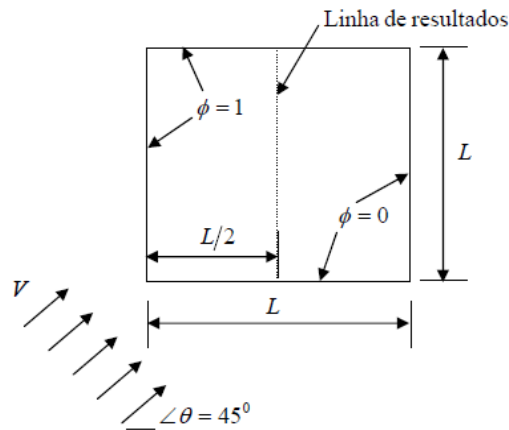


Figura 5.16 - Ilustração do problema de difusão-convecção.

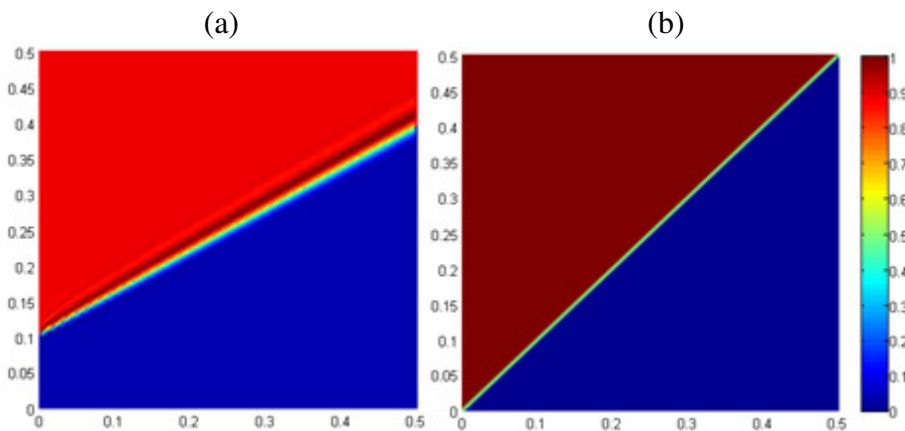


Figura 5.17 - Campo de ϕ : (a) $Pe \rightarrow \infty$, $\theta=30$ e escoamento desalinhado com os nós da malha e (b) $Pe \rightarrow \infty$, $\theta=45$ e escoamento alinhado com os nós da malha.

Os resultados são discutidos a seguir. Para este problema, considerando $Pe \rightarrow \infty$, não existe diferença entre os resultados obtidos considerando L_m ou L_x , ambos são totalmente estáveis e apresentam oscilação na solução próxima da descontinuidade de ϕ quando o escoamento não está alinhado com os nós da malha, de 81×81 volumes.

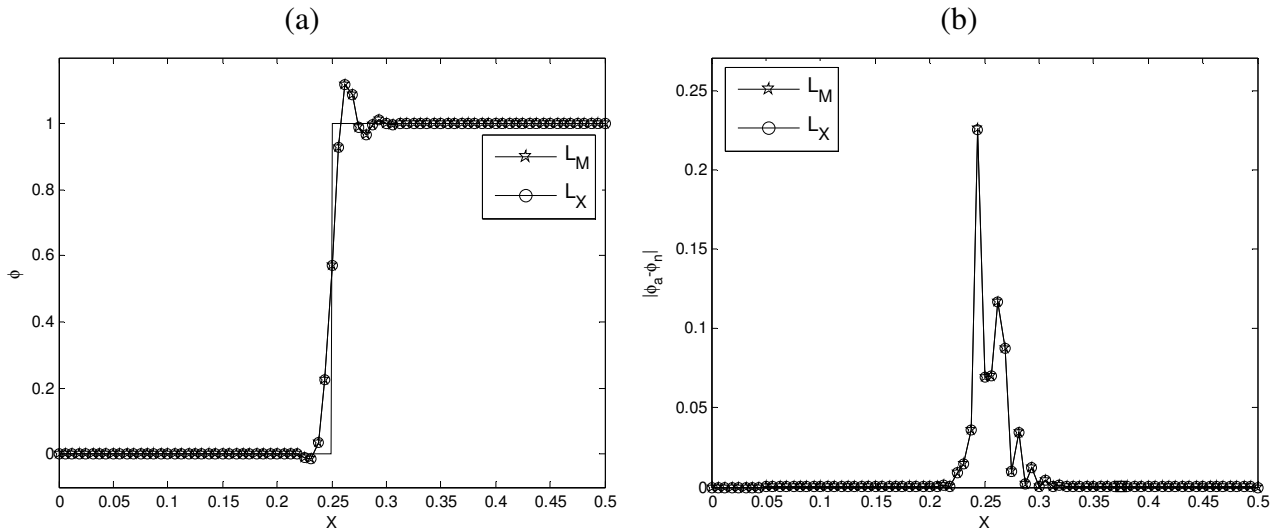


Figura 5.18 – (a) Variação de ϕ na linha de resultados. (b) variação de $|\phi_a - \phi_n|$ na linha de resultados. $Pe \rightarrow \infty$, $\theta=30$ e escoamento desalinhado com os nós da malha.

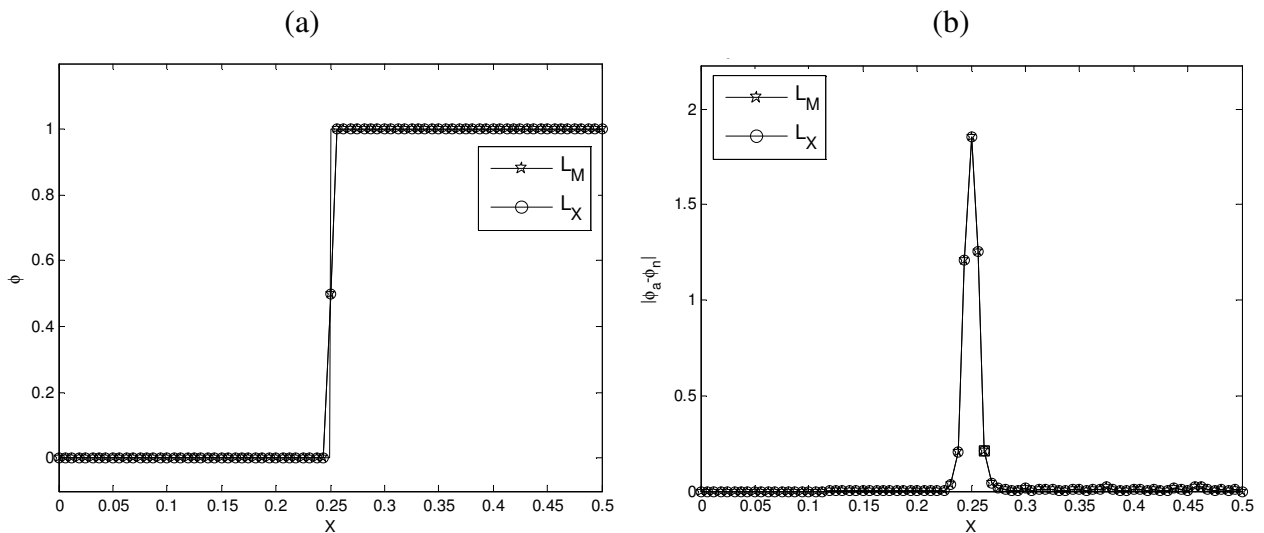


Figura 5.19 – (a) Variação de ϕ na linha de resultados. (b) variação de $|\phi_a - \phi_n|$ na linha de resultados. $Pe \rightarrow \infty$, $\theta=45$ e escoamento alinhado com os nós da malha.

Resultados considerando $Pe=500$, 1000 e 5000 são mostrados nas figuras 5.20-5.23. Na figura 5.20 os campos de ϕ são apresentados para $\theta=45$ e L_m . A solução analítica dada

pela equação (5.3) é referência para estes números de Peclet. Algumas diferenças com relação à solução de referência são verificadas para as soluções numéricas. Os resultados são melhores quando Pe é calculado com base em L_m , principalmente para Pe menores, indicando que L_m é mais consistente como comprimento característico para o elemento triangular que L_x .

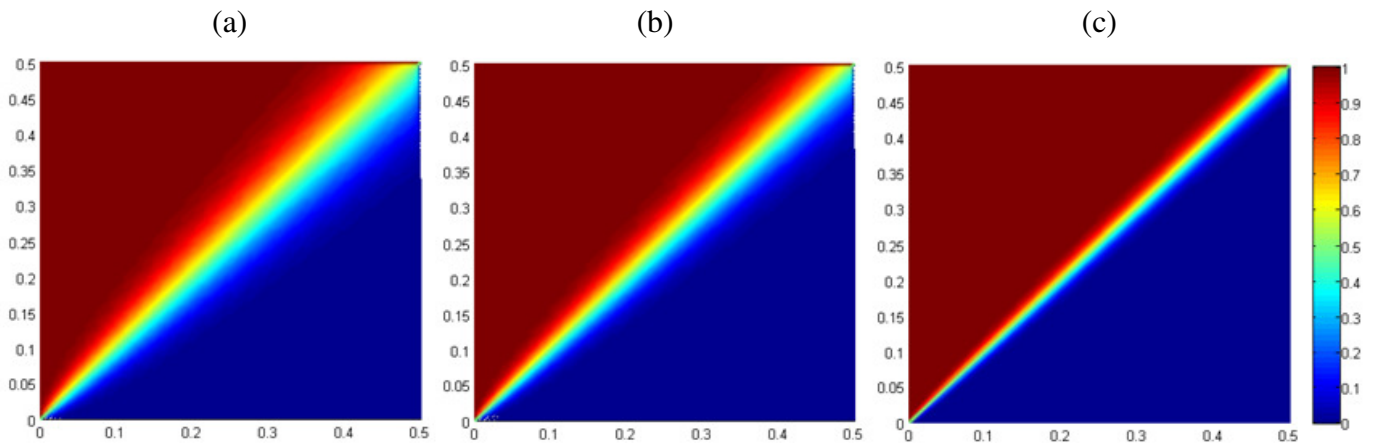


Figura 5.20 - Campo de ϕ para $\theta=45$, L_m , e escoamento alinhado com os nós da malha: (a) Peclet=500, (b) Peclet=1000 e (c) Peclet=5000.

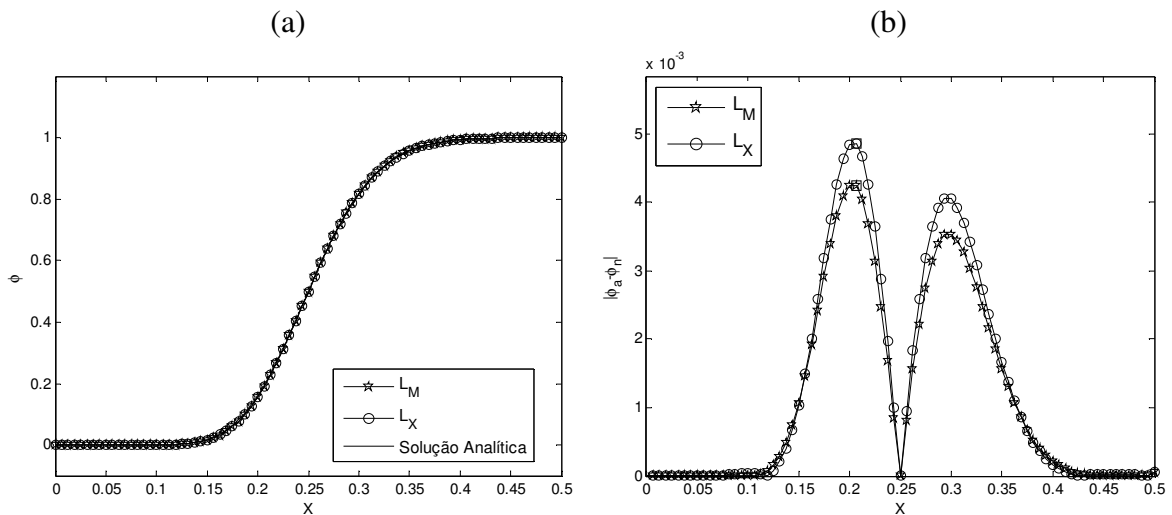


Figura 5.21 - (a) variação de ϕ na linha de resultados. (b) variação de $|\phi_a - \phi_n|$ na linha de resultados. Peclet=500, $\theta=45$ e escoamento alinhado com os nós da malha.

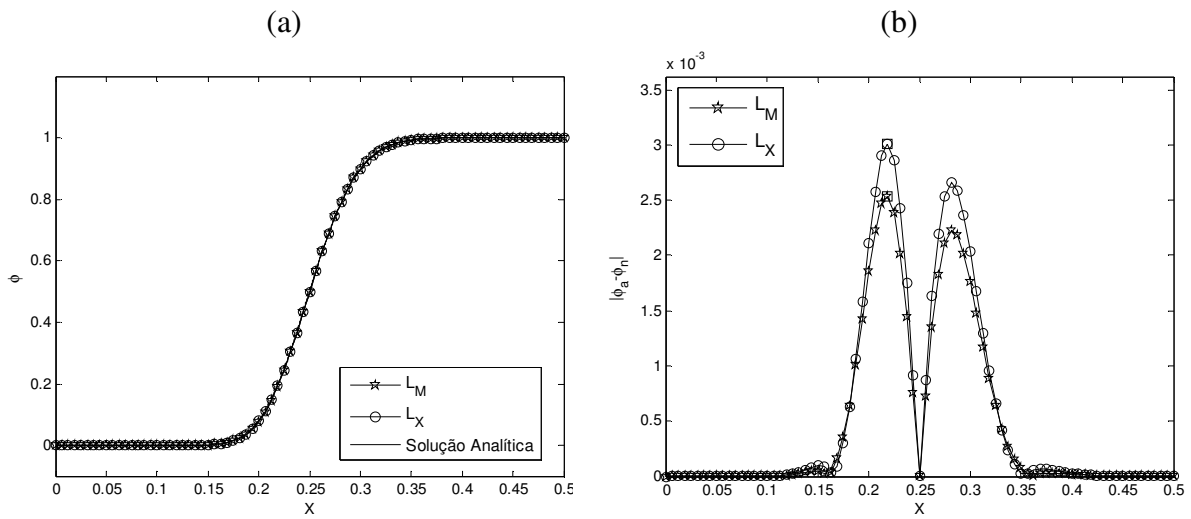


Figura 5.22 - (a) variação de ϕ na linha de resultados. (b) variação de $|\phi_a - \phi_n|$ na linha de resultados. Peclet=1000, $\theta=45$ e escoamento alinhado com os nós da malha.

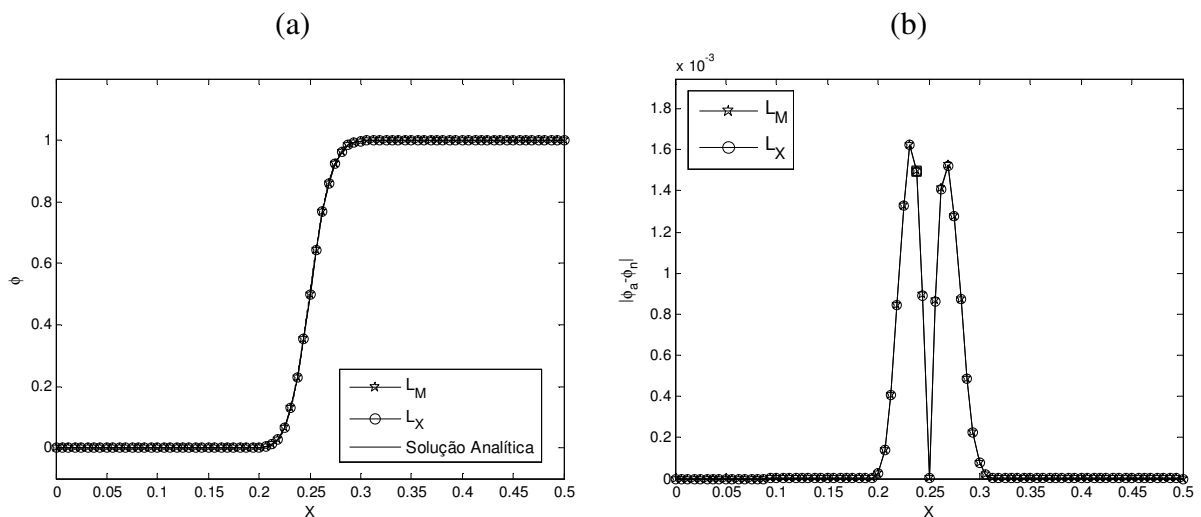


Figura 5.23 - (a) variação de ϕ na linha de resultados. (b) variação de $|\phi_a - \phi_n|$ na linha de resultados. Peclet=5000, $\theta=45$ e escoamento alinhado com os nós da malha.

Escoamento Induzido no Interior de uma Cavidade Quadrada.

O terceiro caso teste considerado para verificação de uso de L_m é do escoamento induzido no interior de uma cavidade quadrada. O domínio e condições de contorno para este caso já foram definidos em casos anteriores. Os resultados obtidos, mostrados nas tabelas 5.3 e 5.4, considerando o número de Peclet baseado no comprimento médio são mais próximos dos resultados de referência numérica. Considerando a presente proposição,

mesmo para a malha de 64x64, os seus resultados são melhores que os resultados da malha de 96x96 considerando a metodologia tradicional, que possui mais que o dobro de volumes de controle.

Tabela 5.3 - Velocidade máxima e mínima na linha de centro da cavidade - Re=400.

Grid	U_{min} / U_{wall}		V_{min} / U_{wall}		V_{max} / U_{wall}	
	Ammara e Masson (2004)	Prsente Trabalho	Ammara e Masson (2004)	Prsente Trabalho	Ammara e Masson (2004)	Prsente Trabalho
32x32	-0,2796	-0,3051	-0,3994	-0,4427	0,2608	0,2871
64x64	-0,3097	-0,3207	-0,4336	-0,4476	0,2867	0,2968
96x96	-0,3191	-0,3246	-0,4436	-0,4503	0,2951	0,3001
128x128	-0,3231	-0,3263	-0,4477	-0,4516	0,2987	0,3016
Ghia <i>et al.</i> (1982) 129x129	-0,3273		-0,4499		0,3020	

Tabela 5.4 - Velocidade máxima e mínima na linha de centro da cavidade - Re=1000.

Grid	U_{min} / U_{wall}		V_{min} / U_{wall}		V_{max} / U_{wall}	
	Ammara e Masson (2004)	Prsente Trabalho	Ammara e Masson (2004)	Prsente Trabalho	Ammara e Masson (2004)	Prsente Trabalho
32x32	-0,3061	-0,3302	-0,4551	-0,4814	0,2898	0,3110
64x64	-0,3419	-0,3604	-0,4828	-0,5046	0,3271	0,3469
96x96	-0,3596	-0,3729	-0,4988	-0,5139	0,3458	0,3603
128x128	-0,3692	-0,3788	-0,5079	-0,5184	0,3562	0,3665
Ghia <i>et al.</i> (1982) 129x129	-0,3829		-0,5155		0,3709	

Caso do Escoamento em Torno de Cilindro Infinito.

O quarto caso teste a ser apresentado é do escoamento passando por um cilindro infinito. Os resultados são apresentados considerando precisão de três casas decimais, maior que a precisão dos resultados de referência. Esta consideração foi feita porque o arredondamento dos resultados para duas casas dificultaria a comparação entre as metodologias.

Os resultados obtidos por simulação são apresentados na tabela 5.5. Nota-se melhor concordância dos resultados do presente trabalho do que os resultados do trabalho de Ammara e Masson (2004) com os resultados de referência numérica. Os resultados para a presente proposição e malha de 88x138 são melhores que os obtidos com a metodologia

tradicional e malha de 88x276, que possui o dobro de elementos e demanda quase 4 vezes mais tempo de CPU.

Tabela 5.5 - Comprimento da recirculação para $Re=20$ e $Re=40$.

Método	Malha	L_w/d ($Re = 20$)	L_w/d ($Re = 40$)
Presente Trabalho	88x138	0,905	2,220
$U_{pe}=u_{av}(A_{tri}/A_{ret})$ (modo novo)	88x276	0,907	2,236
Presente Trabalho	88x138	0,900	2,197
$U_{pe}=u_{av}$ (CVFEM tradicional)	88x276	0,902	2,213
Ammara e Masson (2004) Referência (CVFEM Tradicional)	88x138	0,90	2,20
Fornberg (1980) [Referência Numérica]	129x132 65x52	0,91	2,24

Conclusões Relacionadas ao Cálculo do Número de Peclet

Para os três casos apresentados à avaliação do número de Peclet baseado no comprimento médio produziu uma melhoria dos resultados do CVFEM. Com base nos dois primeiros casos apresentados pode-se afirmar que existe efetivamente uma redução da difusão numérica. Esta redução é devido à alteração de $U_{pe}=u_{av}$ para $U_{pe}=u_{av}(A_{tri}/A_{ret})$, que reduz o número de Peclet para o elemento triangular, evitando desta forma uma ação *upwind* prematura da função de interpolação. O mais importante é que a melhoria obtida na simulação do campo de escoamento é equivalente ao de dobrar o número de nós da malha, sem que haja um aumento de tempo de computação.

5.4 – VERIFICAÇÃO DA FUNÇÃO DE INTERPOLAÇÃO DE MOMENTUM

Neste tópico é verificado o procedimento de interpolação misto proposto para a equação de *momentum*. Três casos foram considerados para testar o procedimento de interpolação:

1. escoamento dentro de uma cavidade quadrada (Escoamento confinado entre paredes).
2. Escoamento através de uma expansão em forma de degrau (Escoamento entre paredes com entrada e saída de massa).
3. Escoamento passando por um cilindro infinito (Escoamento externo).

Estes casos cobrem uma grande gama de problemas possíveis. Os resultados de Ammara e Masson (2004) foram escolhidos como referência do CVFEM. A diferença entre a formulação de Ammara e Masson (2004) e do presente trabalho reside na função de interpolação de *momentum* e no procedimento de avaliação do gradiente de pressão volumétrico. No presente trabalho a equação de *momentum* é interpolada pela equação (4.24). O valor de α_p , que pesa as contribuições das funções de interpolação, é apresentado na tabela de resultados. Ammara e Masson (2004) utilizaram o procedimento tradicional do CVFEM, que consiste em interpolar linearmente a equação de *momentum*.

Escoamento Induzido no Interior de uma Cavidade Quadrada.

No caso da cavidade quadrada os resultados obtidos também são comparados com os resultados de dois outros trabalhos. Os resultados de Botella e Peyret (1998), obtidos com 160 polinômios de chebychev, são referência numérica para este caso.

A estrutura de vórtice característica para este caso foi capturada pela simulação, que consiste de um grande vórtice central e outros dois secundários localizados junto aos cantos. Deste modo a comparação ficará em função de três picos de velocidades: U_{\min}/U_{wall} , V_{\min}/U_{wall} e V_{\max}/U_{wall} . Os resultados são apresentados na tabela 5.6. Considerando a solução Botella e Peyret (1998) como referência, o erro percentual pode ser calculado da seguinte maneira: $\text{erro}(\%) = \left| \frac{\text{Valor}_{\text{referência}} - \text{Valor}_{\text{método}}}{\text{Valor}_{\text{referência}}} \right| \times 100$. O erro médio para o presente trabalho, considerando a malha 128x128, $\alpha_p=1$, foi calculado igual a 0,59%. Considerando também a melhoria advinda da avaliação do Peclet com o L_m o erro baixa para 0,16%. Para efeito de comparação o erro (%) do trabalho de Ammara e Masson (2004) também foi calculado, e o valor encontrado foi de 4,71%. Como ambos os trabalhos utilizam a mesma metodologia, constata-se que as modificações propostas no presente trabalho contribuem efetivamente para uma melhora do CVFEM.

Mesmo para malhas grosseiras, onde o Pe do elemento é grande, é possível utilizar valores de α_p próximos da unidade, mas para isso deve-se refinar a malha na região próxima da parede ou pode-se reduzir o valor de α_p em tal região. No caso específico da cavidade quadrada, ajustando α_p para zero nos elementos adjacentes a parede superior torna desnecessário o refinamento da malha nesta região. Os melhores resultados para a malha de 64x64 foram obtidos desta forma, ver tabela 5.6. A malha 64x64** comprova que através de refinamento local da malha pode-se forçar a redução do Peclet do elemento,

o que rende melhores resultados para α_p maiores. Para uma malha uniforme e α_p também uniforme, com 64x64 elementos, os melhores resultados obtidos foram para $\alpha_p=0,7$. Para $\alpha_p \geq 0,8$ os resultados tendem a superestimar os valores de referência. Já para as malhas de 128x128 e 256x256 os resultados obtidos melhoram sempre com o aumento de α_p . Pode se concluir a partir dos dados da tabela 5.6 que valores de α_p elevados só conduzem a melhorias se o Pe do elemento não for maior que um valor limite, que aparentemente fica entorno de 8, para a malha de 128x128.

Tabela 5.6 - Velocidade máxima e mínima na linha de centro da cavidade - Re=1000.

	Malha	U_{\min}/U_{wall}	V_{\min}/U_{wall}	V_{\max}/U_{wall}	Erro % médio	
Botella e Peyret (1998) [Referência Numérica]	N=160	-0,3885698	-0,5270771	0,3769447	0	
Presente Trabalho	$\alpha_p=1,0$ +Peclet baseado Lm	128x128	-0,3880	-0,5266	0,3760	0,16
		256x256	-0,3874	-0,5258	0,3756	0,29
	$\alpha_p=1,0$	128x128	-0,3865	-0,5248	0,3740	0,59
		64x64*	-0,3891	-0,5298	0,3759	0,31
		64x64**	-0,3855	-0,5206	0,3698	1,30
		256x256	-0,3868	-0,5253	0,3750	0,44
	$\alpha_p=0,9$	128x128	-0,3841	-0,5224	0,3715	1,16
		64x64	-0,4614	-0,6363	0,4362	18,39
		256x256	-0,3863	-0,5247	0,3743	0,58
	$\alpha_p=0,8$	128x128	-0,3819	-0,5202	0,3692	1,69
		64x64	-0,4262	-0,5918	0,4069	9,79
		256x256	-0,3857	-0,5241	0,3737	0,72
		128x128	-0,3798	-0,5182	0,3670	2,19
	$\alpha_p=0,7$	64x64	-0,3808	-0,5249	0,3642	1,93
		256x256	-0,3851	-0,5236	0,3731	0,86
		128x128	-0,3778	-0,5163	0,3649	2,67
	$\alpha_p=0,6$	64x64	-0,3696	-0,5117	0,3538	4,64
		Ammara e Masson (2004)	128x128	-0,3692	-0,5079	0,3562

Malhas uniformes quanto ao tamanho do elemento, com α_p também uniforme.

* Malha uniforme com $\alpha_p=0$ nos elementos adjacentes aos contornos.

**Malha refinada na região próxima aos contornos.

Os resultados apresentados na figura 5.24 consideram a função de interpolação mista para *momentum*, o cálculo do número de Peclet com base no comprimento médio e malha de 32x32 elementos. Para este caso, o α_p para os elementos adjacentes fronteira superior foram postos iguais à zero, somente os elementos internos ao domínio foram modificados. Deve-se verificar que para $\alpha_p=0$ a função é totalmente linear, já para $\alpha_p=1$ a

função é totalmente exponencial. Nota-se que os resultados melhoram tanto para $\alpha_p=1$ quanto para $\alpha_p=0$, demonstrando que o uso simultâneo das modificações propostas é aditivo em termos de melhorias.

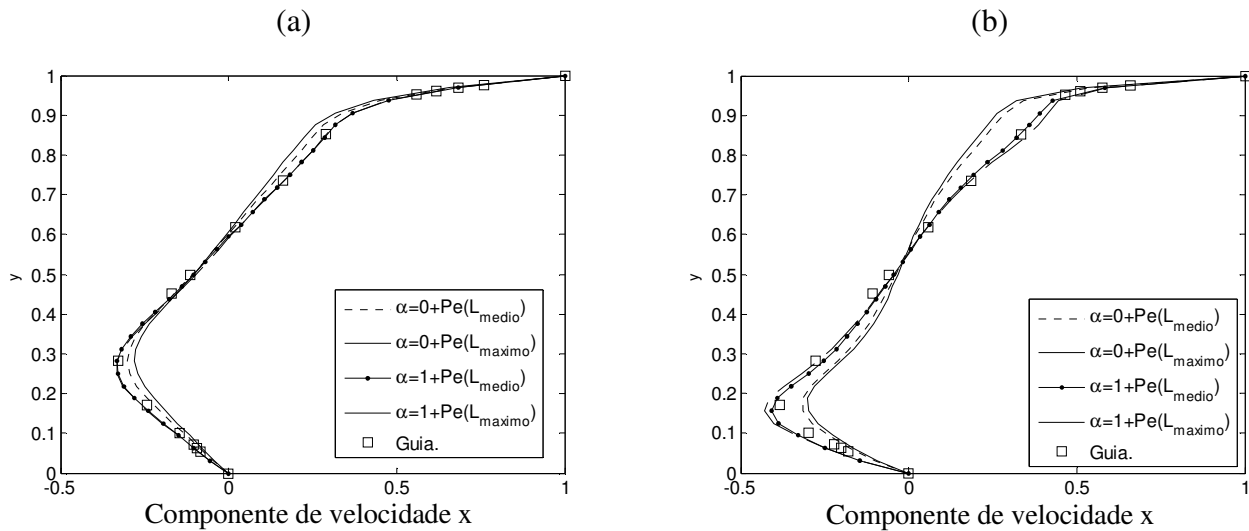


Figura 5.24 - Resultados para componente U em $x=0,5$ e $y=[0,1]$, malha 32×32 elementos:

(a) $Re=400$ (b) $Re=1000$.

Para os resultados apresentados na figura 5.25 o α_p é posto constante sobre todo o domínio de cálculo. Nas legendas das figuras 5.25(a-f) o termo “ P_{DACOP} ” significa que o gradiente de pressão volumétrico foi calculado a partir do gradiente de pressão do elemento com a equação (4.61). Já o termo “ P_{ACOP} ” expressa que o gradiente volumétrico foi obtido com a equação (4.67). O termo L_{MAX} denota que Número de Peclet foi avaliado considerando o comprimento máximo e L_{MED} que foi avaliado com o comprimento médio do elemento. A partir dos resultados ilustrados nas figuras 5.25(a-f) verifica-se que não basta simplesmente interpolar a velocidade de convecção das equações de conservação da massa e quantidade de movimento, para que as melhorias apareçam. Se a interpolação da velocidade de convecção for realizada e adicionalmente um procedimento de cálculo dos gradientes de pressão volumétricos a partir dos gradientes de pressão dos elementos melhor do que o usualmente utilizado em CVFEM, tal como o procedimento da equação (4.67), neste caso será verificada uma melhoria. O uso do comprimento médio para cálculo do número de Peclet também melhora os resultados, mesmo que o α_p esteja perto da unidade.

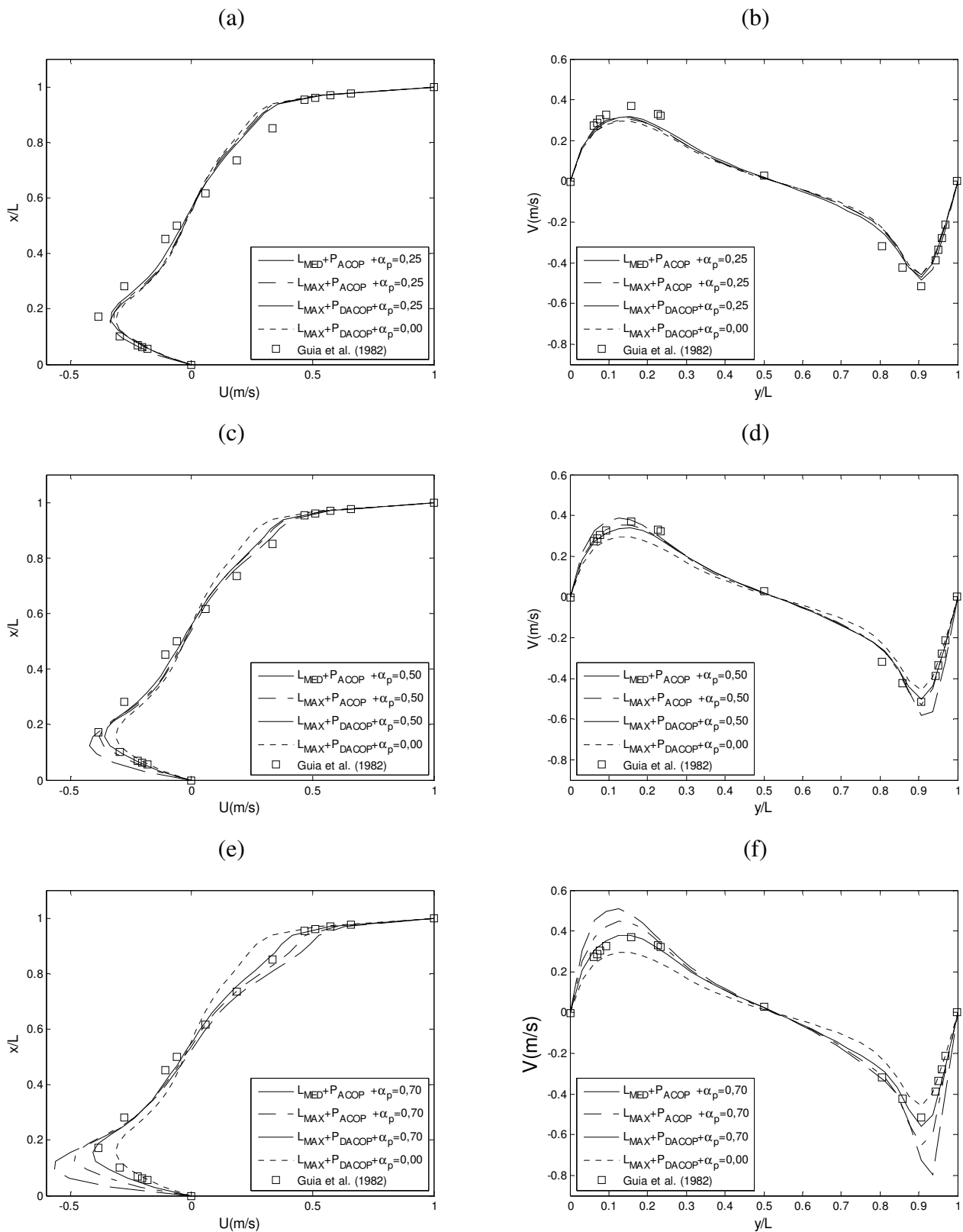


Figura 5.25 - Perfis de U e V na linha de centro horizontal e vertical da cavidade quadrada, respectivamente.

Escoamento através de uma expansão em forma de degrau.

O próximo caso teste é do escoamento através de uma expansão em forma de degrau para $Re = 800$. O caso apresentado em Gartling (1990) será tomado como referência numérica. As simulações de Gartling (1990) foram baseadas na formulação de Galerkin usando elementos bi-quadráticos e discretização de 40×800 . A geometria e condições de contorno são apresentadas na figura 5.26. O número de Reynolds para este caso é baseado na velocidade média e altura da entrada na entrada do canal. A convergência para este caso foi assumida quando os resíduos de todas as equações fossem menores que 10^{-6} . A figura 5.27 apresenta os perfis de velocidade obtidos após as simulações.

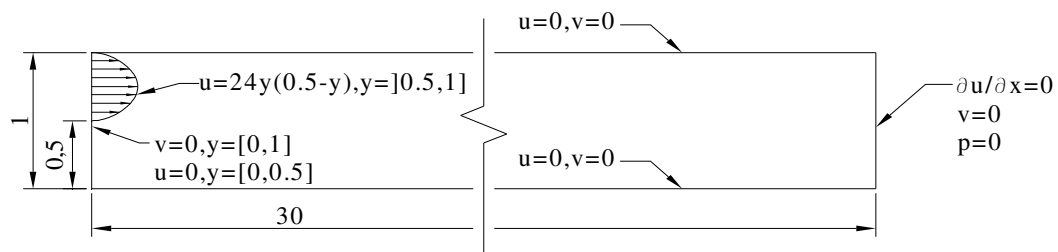


Figura 5.26 - Geometria e condições de contorno.

Somente $\alpha_p=0,65$ foi utilizado nas simulações. Perfis de velocidade obtidos na presente simulação são comparados com os apresentados em Gartling (1990), localizados em linhas verticais em $x=7$ e $x=15$. Como pode ser verificado na figura 5.27, existe uma boa concordância dos presentes resultados com os de Gartling (1990).

Para as três malhas utilizadas a presente proposição se aproxima mais dos resultados de referência para os perfis de velocidade localizados em $x=7$. Os perfis tomados em $x=15$ são praticamente iguais para a componente horizontal de velocidade. O CVFEM Tradicional se aproxima mais do benchmark para a componente de velocidade vertical em $x=15$.

Observa-se ainda que na medida em que a malha é refinada os resultados convergem para solução de Gartling (1990), porém, o CVFEM que utiliza a função de interpolação mista converge mais rapidamente.

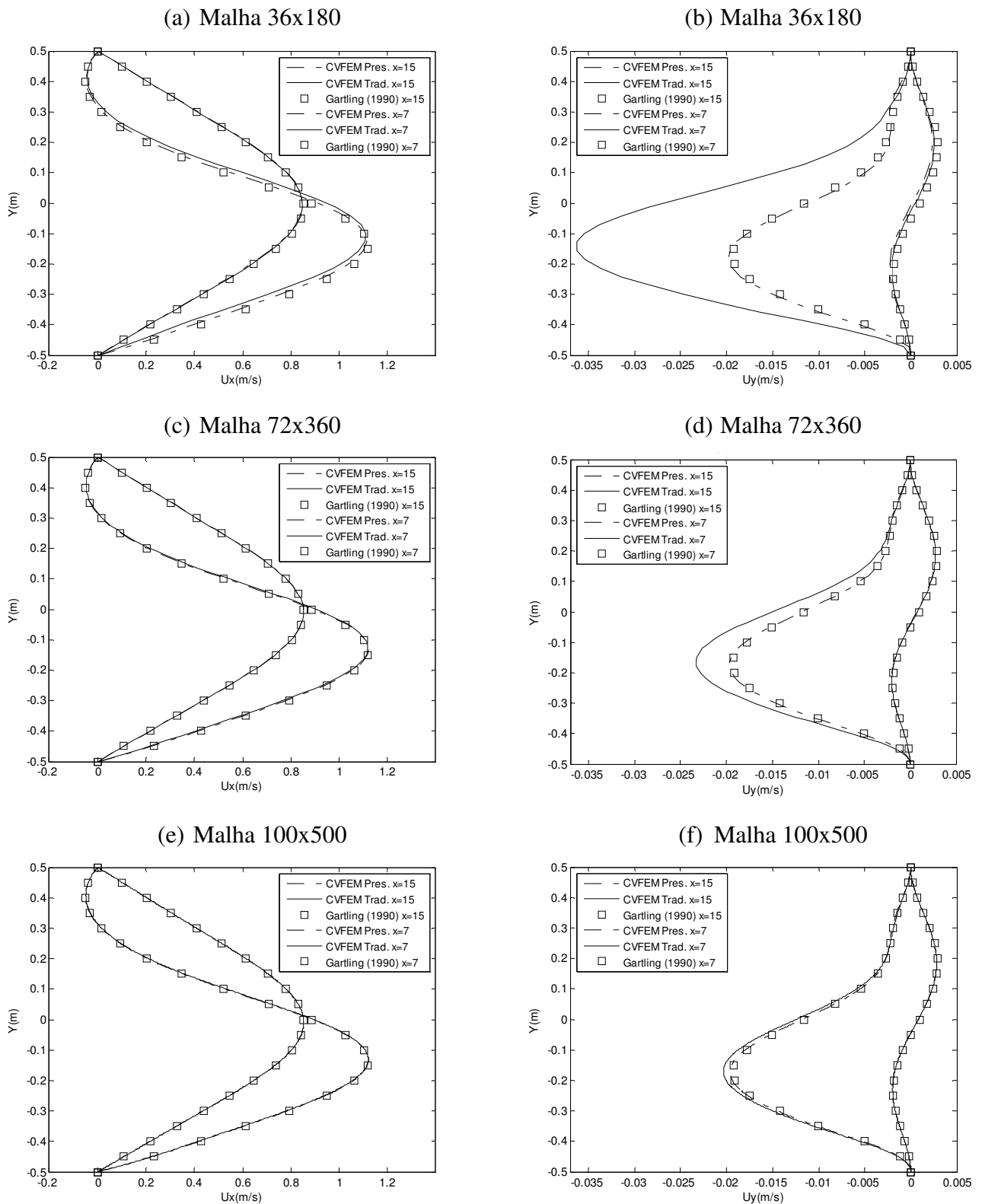


Figura 5.27 - Perfis para U_x e U_y em $x=7$ e 15 para o escoamento através de uma expansão em forma de degrau em três malhas uniformes, em $Re=800$.

Na figura 5.28 são mostradas as linhas de corrente obtidas a partir do campo de escoamento simulado. Uma grande recirculação aparece logo após o degrau na entrada do

canal. O ponto de estagnação que separa a região de recirculação daquela que desenvolve uma camada limite, na parede inferior, ocorre próximo de $x=6$. Uma segunda recirculação aparece adjacente à parede superior, entre $x=5$ e $x=10$.

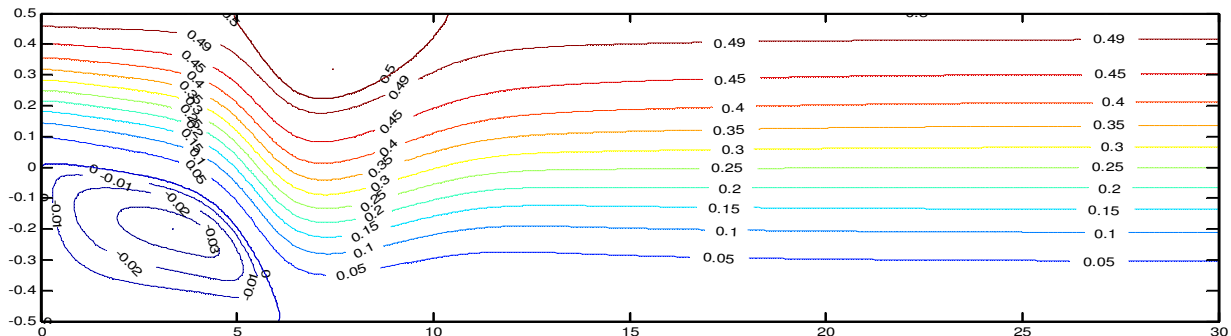


Figura 5.28 - Linhas de corrente do campo de escoamento, $Re=800$.

Escoamento em Torno de um Cilindro Infinito

O terceiro caso desta avaliação foi obtido do escoamento em torno de um cilindro infinito. Como todos os detalhes do caso já foram apresentados, os resultados obtidos serão apresentados a seguir.

Para todas as malhas utilizadas, as simulações sempre foram totalmente estáveis para $\alpha_p=0,5$, por isso os resultados são apresentados a partir deste valor. Os grandes elementos presentes na periferia da malha tornam os cálculos instáveis para $\alpha_p>0,9$, de forma que só são apresentados resultados onde α_p garantia estabilidade. Para verificar o efeito do refinamento de malha para um dado valor de α_p , três malhas foram utilizadas, com número de volumes finitos crescentes. A malha mais esparsa possui aproximadamente metade do número de volumes da malha média e a malha mais refinada possui quatro vezes mais volumes que a malha média.

A estrutura do escoamento próxima do cilindro obtida com a simulação se assemelha a configuração típica para este caso, que é a de uma recirculação localizada logo após o cilindro. O comprimento desta recirculação será utilizado para comparação entre as metodologias. Como pode ser verificado na tabela 5.7 existe uma boa concordância dos resultados obtidos no presente trabalho com os resultados de referência. Estes se aproximam mais dos resultados de referência numérica que os resultados de Ammara e Masson (2004), que utilizaram o mesmo método numérico. Percebe-se que para a malha

mais grossa os resultados variam muito com a variação de α_p . A variação dos resultados com α_p diminui com o refinamento da malha.

Tabela 5.7 - Comprimento da recirculação para Re=20 e Re=40.

Método	Malha	L_w/d (Re = 20)	L_w/d (Re = 40)
Fornberg (1980)	129x132		
[Referência Numérica]	65x52	0,91	2,24
Presente Trabalho	$\alpha_p=0,7+ Pe$	88x148	2,236
	baseado no L_m	44x74	2,240
		22x37	2,288
Presente Trabalho	$\alpha_p=0,9$	176x276	-
		88x138	2,748
		62x98	2,274
	$\alpha_p=0,8$	176x276	2,242
		88x138	2,237
		62x98	2,260
	$\alpha_p=0,7$	176x276	2,238
		88x138	2,227
		62x98	2,247
	$\alpha_p=0,6$	176x276	2,235
		88x138	2,219
		62x98	2,231
$\alpha_p=0,5$	176x276	2,231	
	88x138	2,210	
	62x98	2,209	
Ammara e Masson (2004)	88x138	0,90	2,20
[Referência CVFEM]			

Como no caso da cavidade quadrada os melhores resultados obtidos foram para $\alpha_p=0,7$. Para Re=20, $\alpha_p=0,8$ e malha de 44x69 os resultados das simulações superestimam o comprimento da recirculação. Por isso, o uso de α_p próximo da unidade só deve ser feito se o número de Peclet do elemento menor que um determinado valor.

Conclusões relacionadas à função de interpolação de *momentum*

Uma malha com refinamento adequado, valores crescentes de α_p produzem melhoria sistemática dos resultados. O uso de valores de α_p próximos de 1 podem produzir resultados que superestimam os valores de referência. Por isso, o uso de α_p próximo da unidade só é recomendado com um refinamento adequado da malha. Tanto no caso da cavidade quadrada, quanto para o caso do escoamento em torno de um cilindro $\alpha_p=0,7$

produziu melhoria nos resultados. Como em todas as simulações apresentadas foram utilizadas o mesmo código numérico, diferenciado apenas pelas modificações propostas, constata-se que as modificações propostas no presente trabalho contribuem para uma melhora dos resultados obtidos com o CVFEM.

5.5 – CASO DE VALIDAÇÃO PARA FORMULAÇÃO AXISSIMÉTRICA

Com intuito de validar o código numérico considerando geometria axissimétrica, o caso do escoamento em um tubo com contração súbita foi escolhido. O domínio é mostrado na figura 5.29, cujas dimensões são $D=19$ mm, $d=10,2$ mm e $L=50$ mm, a contração fica localizada no meio deste comprimento. Uma malha baseada em elementos triangulares, como 6000 nós, foi usada em todo o domínio de cálculo. Na entrada do tubo foi aplicado o seguinte perfil de velocidades: $u(r) = 2[1 - (r/R)^2]$ com $v = 0$. Na saída do domínio foi considerado: $\partial u/\partial x = 0$, $v = 0$ e a pressão foi imposta igual à zero.

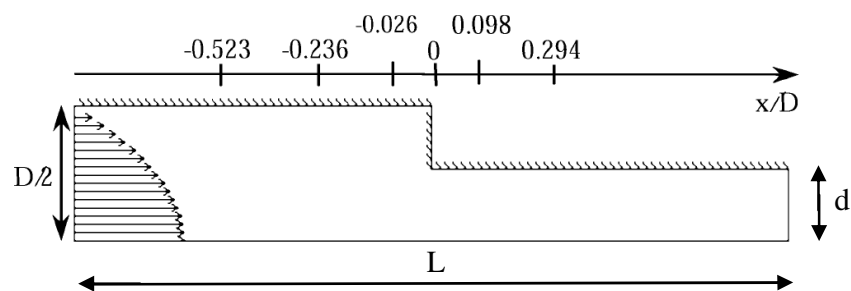


Figura 5.29 - Localizações axiais para os cálculos numéricos de velocidade.

Os dados experimentais estão disponíveis em várias posições axiais, porém, apenas três posições foram escolhidas para comparação com os resultados numéricos, identificados na figura 5.30. Boa concordância é verificada na avaliação, o que é um indicativo que o método numérico foi programado adequadamente.

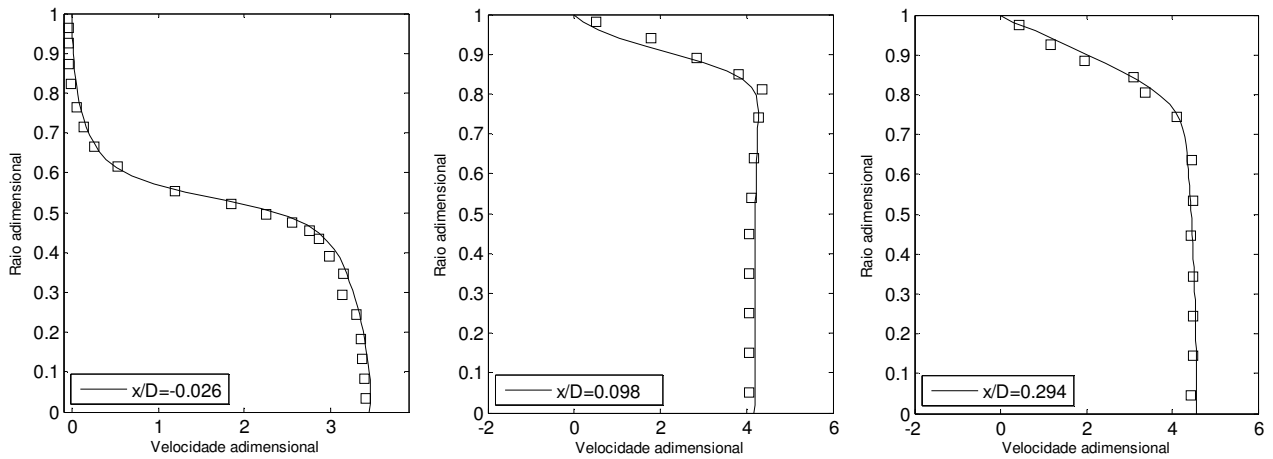


Figura 5.30 - Perfis de velocidades obtidos na simulação (linhas contínuas). Os símbolos representam dados experimentais de Durst (1985), para Reynolds de 372.

5.6 – CASO DE VALIDAÇÃO PARA O ESCOAMENTO TRANSIENTE

O caso do escoamento transiente em torno de um cilindro infinito foi escolhido para validar o código numérico neste regime. O domínio para este caso é apresentado na figura 5.31.

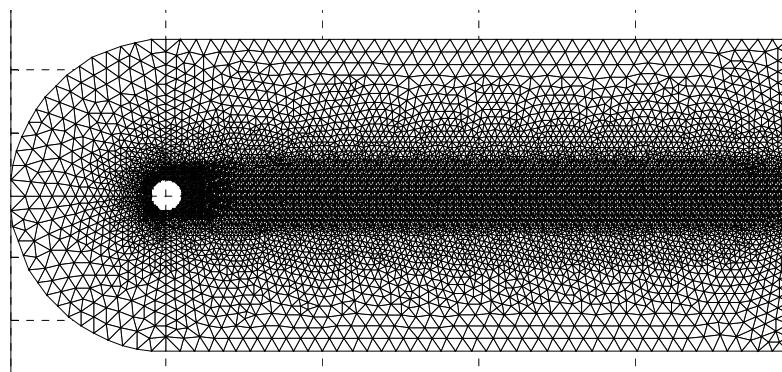


Figura 5.31 - malha do caso escoamento e torno de um cilindro infinito.

A largura do domínio é aproximadamente 10 vezes o diâmetro de cilindro D ($D=1m$). A partir do centro do cilindro, o seu comprimento na direção e sentido do escoamento é $20D$, e no sentido oposto $5D$. A entrada inclui um semicírculo à esquerda e também dois limites horizontais acima e abaixo do domínio computacional. Nos contornos externo $u=1m/s$. Na saída, a pressão foi imposta igual à zero, $\partial u/\partial y = 0$ e $v=0$. A massa específica foi ajustada para 100 kg/m^3 e uma viscosidade, μ , unitária. Com estes valores o

número de Reynolds é 100. Uma malha não estruturada baseada em elementos triangulares foi usada em todo o domínio de cálculo (figura 5.31), composta de 6100 nós.

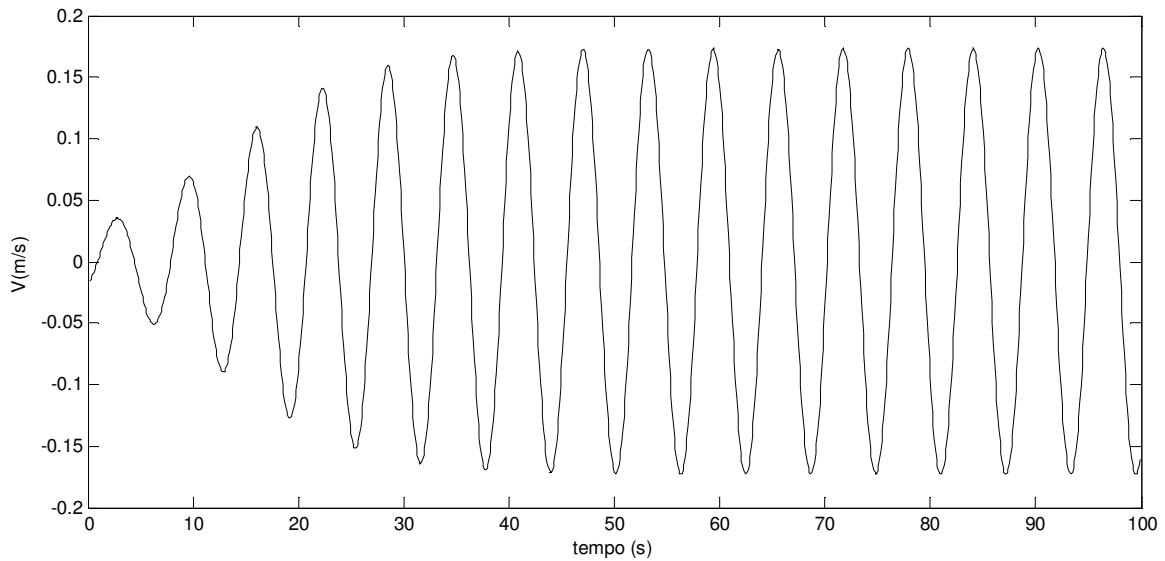


Figura 5.32 - Velocidade transversal em um ponto atrás do cilindro para $Re=100$.

Segundo Li *et al.* (1991) o período de desprendimento de vórtices medido experimentalmente para este número Reynolds é de 6,06 s. O valor calculado foi de 6,15 s. Este valor já é um bom indicativo que o método está devidamente implementado no código numérico.

5.7 – CASO DE VALIDAÇÃO PARA O ESCOAMENTO ATRAVÉS DE UM MEIO POROSO.

O mesmo domínio do item 5.5, mas com outra malha, foi utilizado para teste do caso de escoamento através de um meio poroso. O cilindro vazado foi preenchido, figura 5.33, por isso o meio poroso possui forma circular. A permeabilidade do meio poroso foi ajustada para 10^{-16} e a porosidade para 0,7. Fora do círculo a permeabilidade foi ajustada para 10^{16} e a porosidade para 1. O número de Reynolds foi ajustado para 40, para isso a massa específica foi alterada para 40 kg/m^3 .

Resultados obtidos são apresentados na figura 5.34. Do item 4.2, para este número de Reynolds, já é sabido que o comprimento da recirculação formada deve ser de 2,24. O comprimento calculado neste caso foi 2,15, bastante próximo da referência.

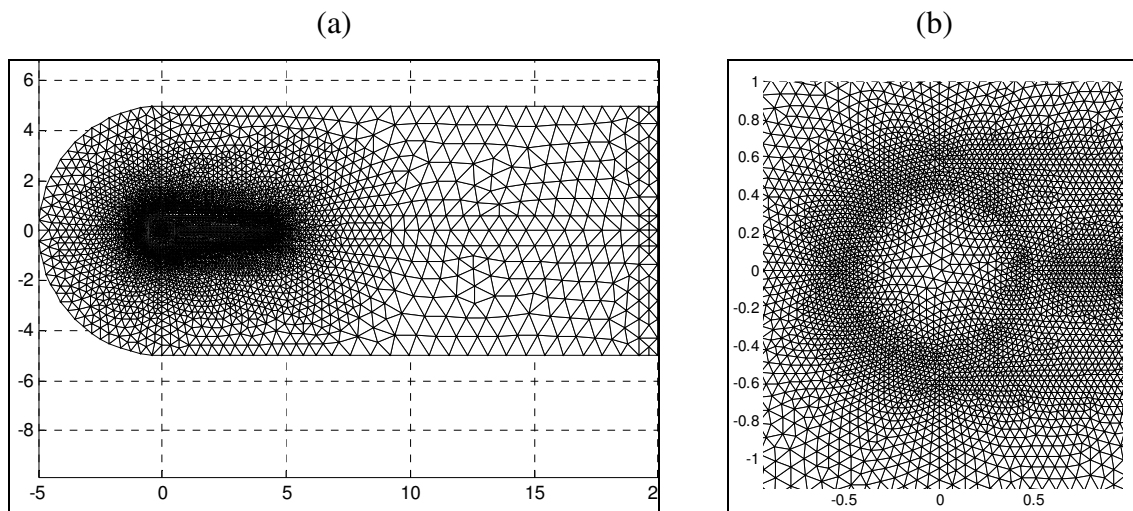


Figura 5.33 – (a) Malha utilizada e (b) detalhe da malha próxima ao cilindro

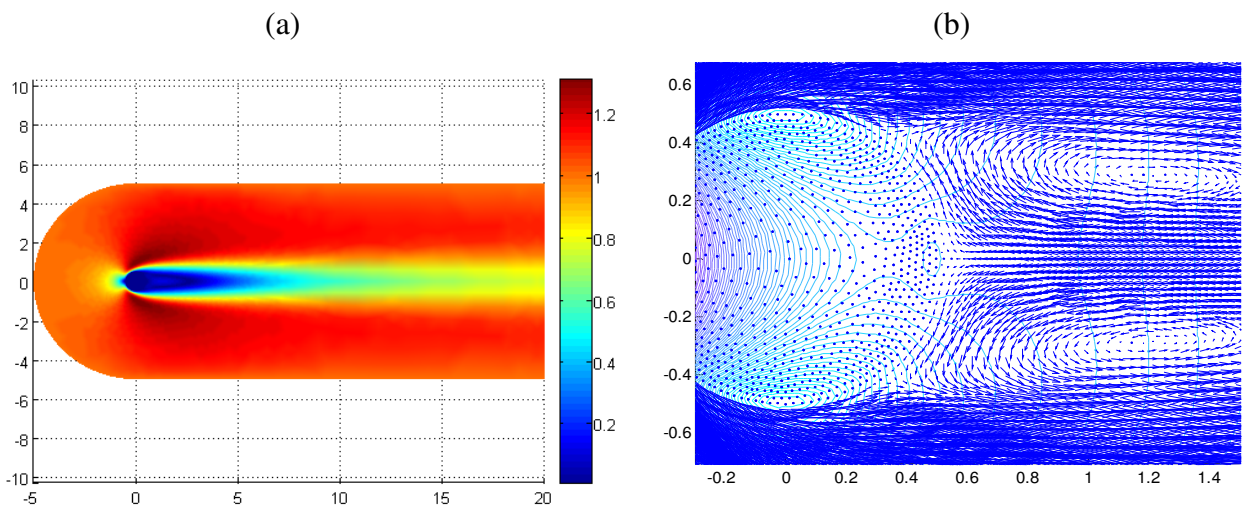


Figura 5.34 - (a) Módulo do campo de velocidades. (b) Campo de vetores de velocidade e campo de pressão sobreposta.

5.8 – CASO DE VALIDAÇÃO PARA COMBUSTÃO HOMOGÊNEA.

O caso da chama laminar axissimétrica estudado experimentalmente por Mitchell *et al.* (1975), e simulado numericamente por Tarhan e Selçuk (2003), Uygur *et al.* (2006), Uygur *et al.* (2008), foi utilizado como referência para a validação do código no que concerne a esta aplicação.

A chama laminar está confinada em um combustor cilíndrico vertical, de dois tubos concêntricos de raio R_i e R_o , através dos quais passa, respectivamente, combustível e ar, como pode ser visto na figura 5.35. Segundo Mitchell *et al.* (1975) as vazões de

combustível e oxidante foram ajustadas de forma a produzir uma chama difusa e estável. Um cilindro de vidro *Pyrex* é utilizado para proteger a chama e definir as fronteiras do sistema. A dimensão do raio interno, R_i , do jato de combustível é de 0,635 cm e do raio externo do jato oxidante é de 2,54 cm. O combustor tem 30 cm de altura. As condições de contorno de entrada impostas se encontram na tabela 5.8.

Tabela 5.8 - Condições de entrada de ar e combustível.

Cilindro interno (Combustível)	Cilindro externo (Ar)
Velocidade axial de entrada: $u_F = 4,5$ cm/s	Velocidade axial de entrada: $u_A = 9,88$ cm/s
Velocidade radial de entrada: $v_F = 0$ cm/s	Velocidade radial de entrada: $v_A = 0$ cm/s
Temperatura: $T_F = 298$ K	Temperatura: $T_A = 298$ K

A temperatura da parede de proteção é mantida constante com o valor $T_{wall} = 298$ K . As condições iniciais e demais condições de contorno estão resumidas na tabela 5.9.

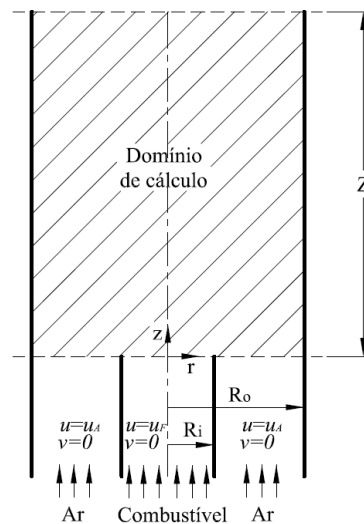


Figura 5.35 - Esquema combustor cilindro vertical.

Tabela 5.9 - Condições Iniciais e de Contorno.

IC	$t = 0$	$\nabla_z \wedge \nabla_r$	$u = 0$	$v = 0$	$\phi = 0$
BC1	Centro	$\nabla_z \wedge \nabla_t$	$\partial u / \partial r = 0$	$v = 0$	$\partial \phi / \partial r = 0$
BC2	Parede	$\nabla_z \wedge \nabla_t$	$u = 0$	$v = 0$	$\phi = 0$
BC3	Entrada	$\nabla_r \wedge \nabla_t$	$u = u_{in}$	$v = 0$	$\phi = \phi_{in}$
BC4	Saída	$\nabla_r \wedge \nabla_t$	$\partial u / \partial z = 0$	$\partial v / \partial z = 0$	$\partial \phi / \partial z = 0$

Um estudo de malha foi realizado considerando vários níveis diferentes de refinamento. Com este estudo constatou-se que uma malha com de 51x91, mais refinadas

na região de entrada de ar e combustível, produzia resultados satisfatórios, ou seja, independente do número de elementos.

Solução em regime permanente.

Os resultados obtidos no presente trabalho através de simulação numérica são comparados com dados experimentais de Mitchell *et al.* (1975), identificado como “Ref. Exp.”, resultados numéricos de Uygur *et al.* (2008), identificado como “Ref. Num”. Estas comparações possibilitam a validação do código para o caso de combustão homogênea.

Dois mecanismo foram utilizados nas simulações, o mecanismo quasi-global para o metano apresentado na tabela 3.2, identificado de MEC1, e um mecanismo global de passo único para o metano utilizado por Uygur *et al.* (2008), identificado de MEC2, cuja taxa é dada por:

$$\dot{\omega}_{g,CH_4} = \rho^2 Y_{CH_4} Y_{O_2} A \exp(-E_a/R_u T), \quad A = 10^{10} \text{ m}^3/\text{kg s} \quad \text{e} \quad E_a/R_u = 1,84 \times 10^4 \text{ K}$$

Este mecanismo também foi utilizado para tornar a modelagem do presente trabalho mais próxima daquele de Uygur *et al.* (2008), facilitando a comparação entre resultados preditos.

Dois algoritmos foram utilizados para simular a combustão, um algoritmo sequencial iterativo (ASI) e outro algoritmo sequencial não iterativo (ASNI). No ASI, para um único passo de tempo, todas as equações de conservação são sequencialmente resolvidas até a convergência. Já no ASNI são utilizados dois passos de tempo, exatamente como foi apresentado no item 4.1. Em comparação ao ASNI, à convergência com o ASI é mais difícil e demorada. Além disso, os passos de tempo utilizados com o ASNI, para convecção-difusão, podem ser bem maiores que os utilizados com o ASI. Nos resultados apresentados com o ASI o passo de tempo foi de 10 μs . Já os passos de tempo utilizados com o ASNI foram de 50 μs e 1 μs , para o passo fracionado de transporte de massa e para o passo fracionado de reação química, respectivamente.

Perfis das componentes de velocidade, temperatura, fração molar de espécies são apresentados nas figuras 5.36, 5.37 e 5.38. Nota-se que existe uma concordância muito boa dos perfis velocidade e temperatura preditos, considerando o MEC1, com os dados experimentais. Os perfis de temperatura obtidos com MEC2 sempre superestimam os valores medidos experimentalmente, o que já era esperado, uma vez que este mecanismo considera a conversão direta do combustível nas espécies H_2O e CO_2 .

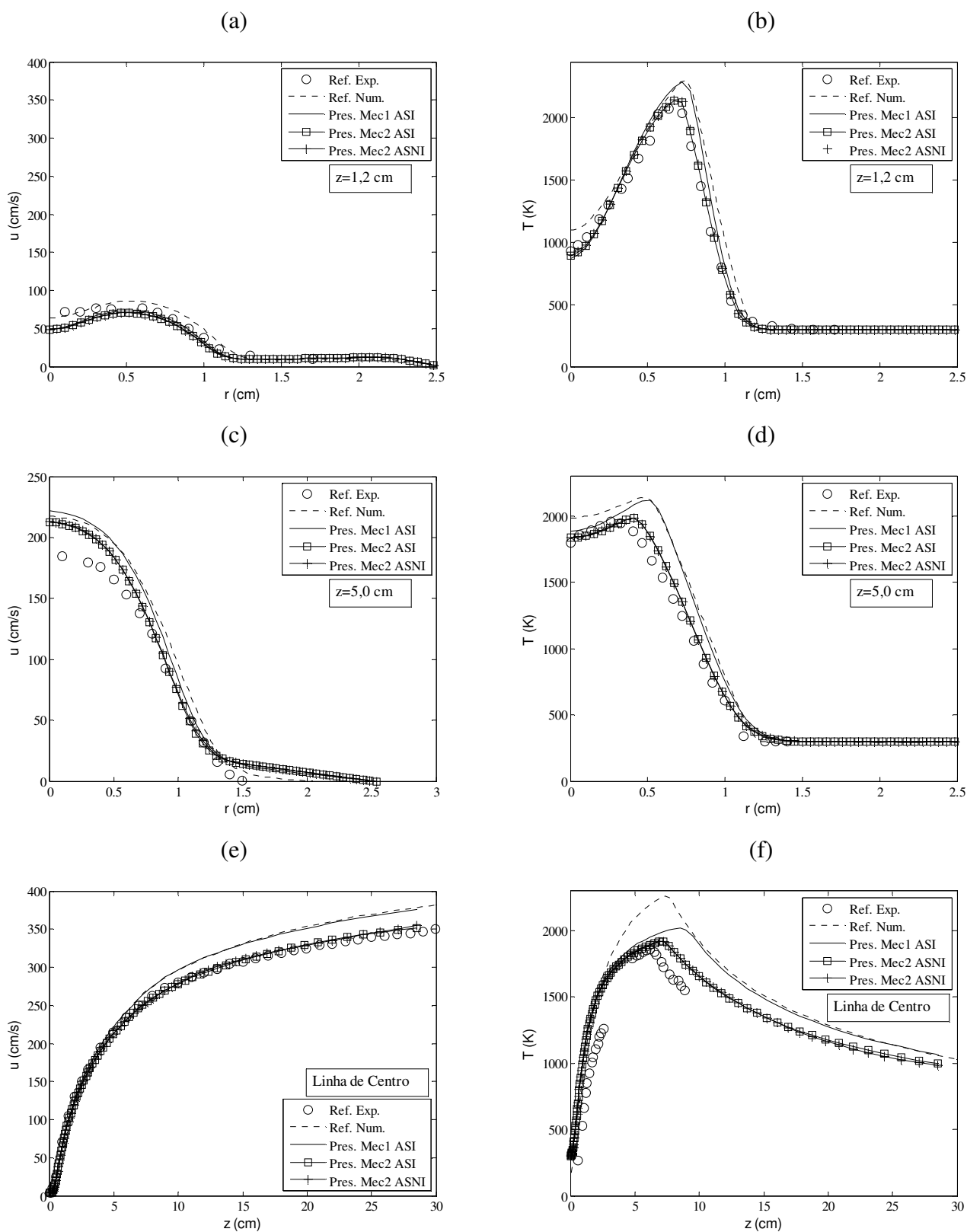


Figura 5.36 - Perfis de velocidade e temperatura para as posições indicadas.

Os perfis de fração molar das espécies CH_4 e O_2 preditos, figura 5.37, não concordam tão bem com os perfis experimentais, tanto para o MEC1 quanto para o MEC2,

mas seguem todas as tendências das curvas experimentais. Já os perfis de fração molar das espécies H_2O e CO_2 apresentam comportamento bastante similar ao das curvas experimentais, para ambos os mecanismos utilizados (figura 5.38).

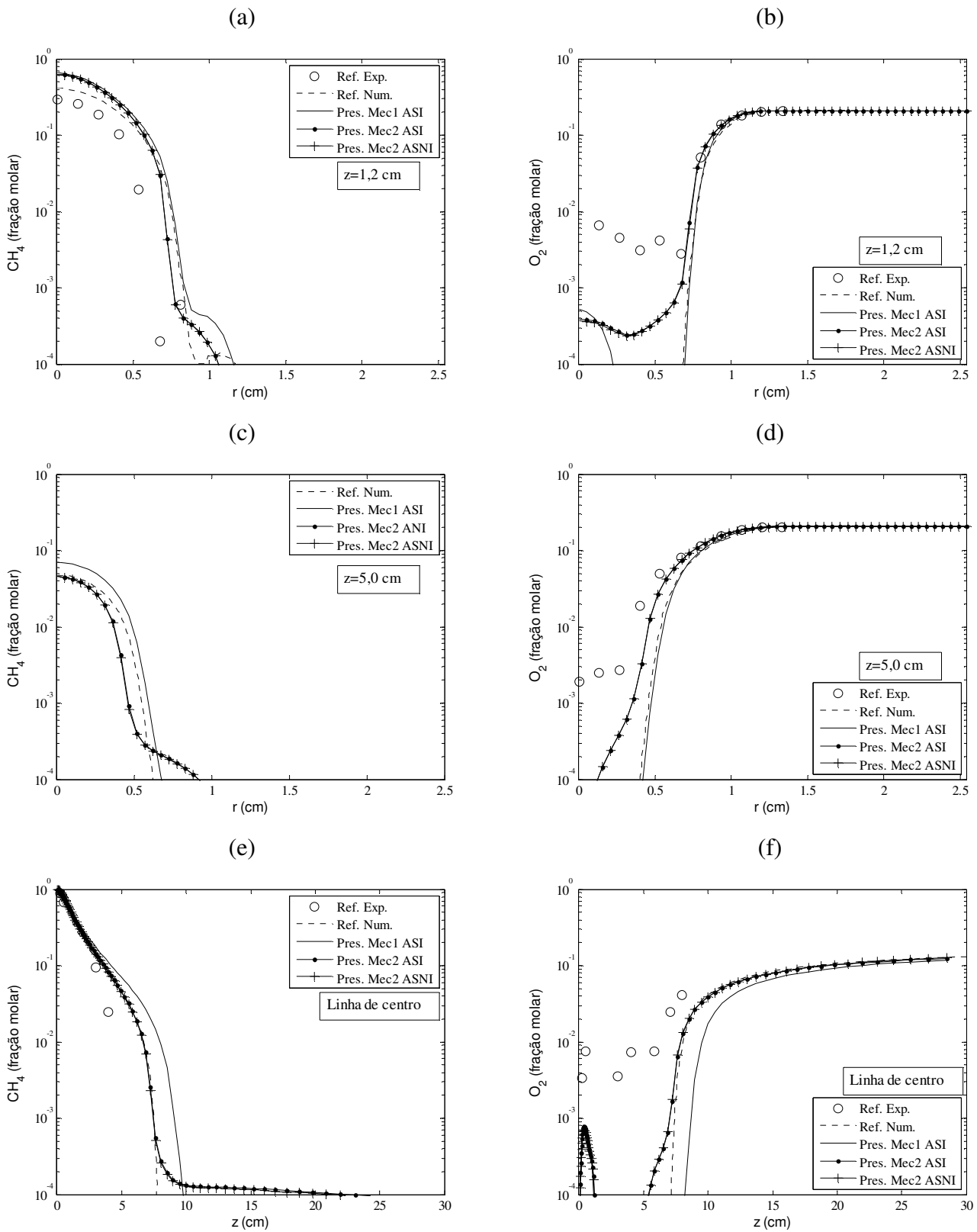


Figura 5.37 - Perfis de fração molar de CH_4 e O_2 para as posições indicadas.

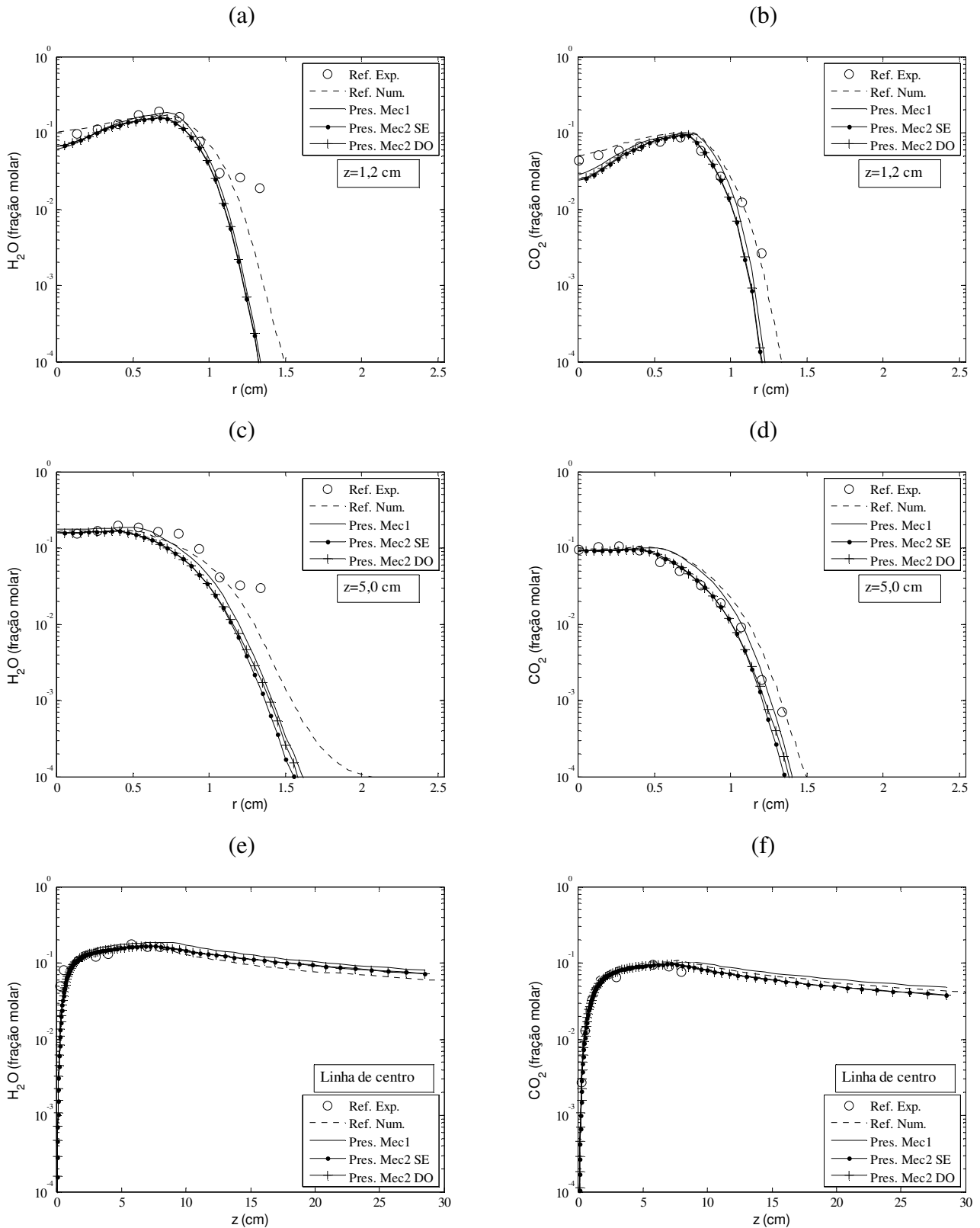


Figura 5.38 - Perfis de fração molar de H₂O e CO₂ para as posições indicadas.

Finalizando, percebe-se que os resultados obtidos com o MEC2 se aproximam dos resultados de Uygun *et al.* (2008), contudo, se afastam um pouco dos dados experimentais

de Mitchell *et al.* (1975), mostrando a grande influência do mecanismo de reação neste tipo de simulação. As boas concordâncias obtidas nesta parte do trabalho indicam que as equações governantes e auxiliares foram adequadamente programadas no código numérico.

5.9 – APLICAÇÃO DO MODELO PARA SECAGEM E PIRÓLISE

O caso teste a seguir consiste na simulação da secagem e da pirólise de uma partícula termicamente espessa, cujo objetivo é a validação da modelagem da transferência de calor e massa em um meio poroso com geração de massa.

Perfis de temperatura e de conversão de massa, devido à secagem e à pirólise, experimentalmente determinados por Hong Lu (2006) foram utilizados como referência nesta validação. Os experimentos foram baseados em amostras cilíndricas de madeira dura, com conteúdo de umidade de 6 a 40% em massa; 9,5 mm diâmetro e razão altura/diâmetro variando de 1 a 4. As temperaturas foram medidas por termopar tipo K e a perda de massa com balança de precisão. Hong Lu (2006) relatou que as paredes do reator utilizado nos experimentos não possuíam temperatura uniforme na direção axial, por isso uma temperatura média determinada na posição da partícula foi fornecida para uso em simulações. Além disso, enfatizou que as incertezas associadas às medidas de temperatura eram maiores que as associadas à perda de massa. O autor comentou que o contato do termopar com as amostras e que as posições nas quais os termopares eram colocados, se radial ou axial, influenciavam na precisão da medição da temperatura. Com base nos comentários, os dados de perda de massa terão um peso maior para efeito de validação.

Parte das propriedades da biomassa já foi apresentada no decorrer do trabalho. Outras também importantes para as simulações estão apresentadas na tabela 5.10. A porosidade utilizada por Hong Lu (2006) foi de 0,4. Para esta porosidade e massa específica aparente de 580 kg/m^3 a massa específica intrínseca do material deve ser pequena, menor que 1000 kg/m^3 . Valor desta magnitude não é relatado na literatura. Por isso, será adotada porosidade de $0.6=1-(580\text{kg/m}^3)/(1450 \text{ kg/m}^3)$.

Tabela 5.10 - Propriedades da biomassa.

Propriedade	Valor	Fonte
Área superficial específica, S	$1 \times 10^6 \text{ m}^2 \text{ m}^{-3}$	Hong Lu (2006)
Diâmetro do poro, d_p	$10 \times 10^{-6} \text{ m}$	Estimado
Massa específica aparente	580 kg/m^3	Hong Lu (2006)
Emissividade da biomassa	0,85	Hong Lu (2006)
Emissividade do resíduo carbônico	0,95	Hong Lu (2006)

Com base no PCI, numa temperatura média de pirólise e na composição da madeira a composição dos voláteis devido à pirólise foi calculada conforme trabalho de Thunman *et al.* (2001). O modelo de superposição dos constituintes foi escolhido para modelar a decomposição térmica da madeira. Os parâmetros do modelo de pirólise e a composição da madeira *Poplar* foram tomados do trabalho de Belderok (2007).

A malha utilizada nas simulações é apresentada na figura 5.39. Tal malha é composta por 1689 nós, ou volumes de controle. As dimensões do domínio foram tomadas do trabalho de Ip (2005). Na malha discreta alguns elementos são postos com porosidade, permeabilidade, massa específica e propriedades termofísicas do sólido (fig. 5.40). Na medida em que o material é convertido, o meio poroso aumenta de porosidade devido à emissão de gases. As condições de contorno e condições iniciais para este caso podem ser vistas na figura 5.41 e estão detalhadas na tabela 5.11

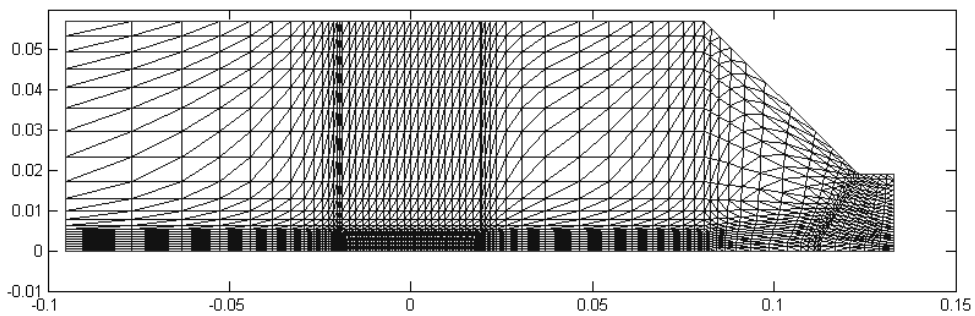


Figura 5.39 – Malha utilizada nas simulações.

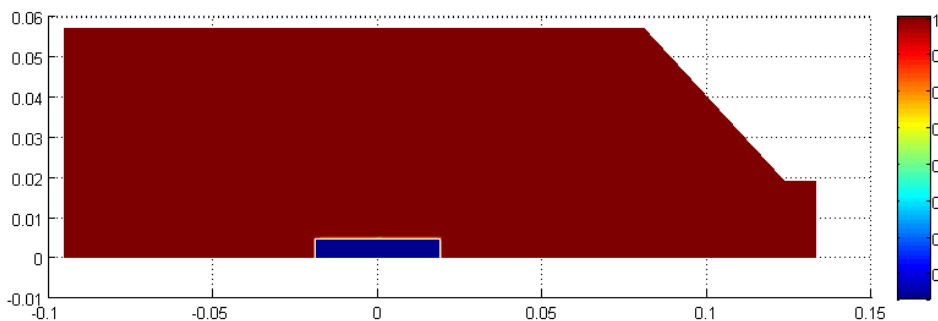


Figura 5.40 – Porosidade inicial utilizada nas simulações.

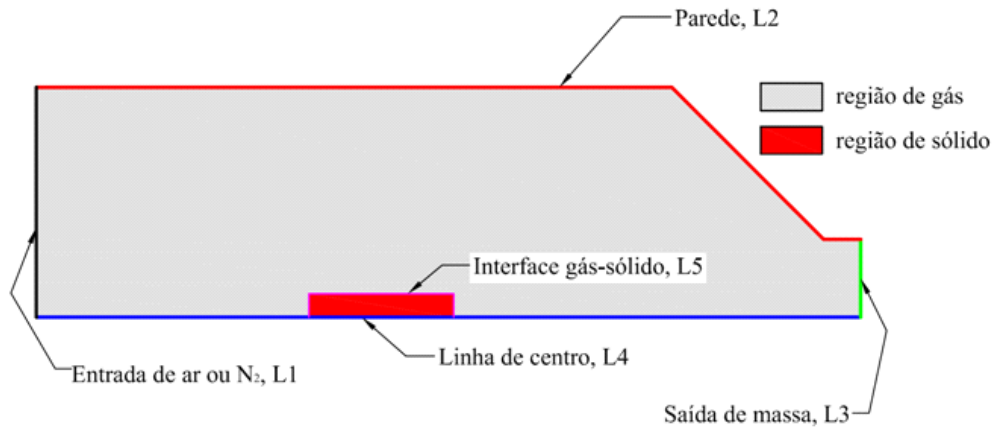


Figura 5.41 – Identificação dos contornos do domínio de cálculo.

Tabela 5.11– Condições de contorno, CC, e condições iniciais, CI.

CI	$t = 0$	$\forall z \wedge \forall r$	$u = 0$	$v = 0$	$\phi = \phi_{inicial}$
CC	L4	$\forall t$	$\partial u / \partial r = 0$	$v = 0$	$\partial \phi / \partial r = 0$
CC	L2	$\forall t$	$u = 0$	$v = 0$	$\phi = \phi_{contorno}$
CC	L1	$\forall t$	$u = u_{in}$	$v = 0$	$\phi = \phi_{in}$
CC	L3	$\forall t$	$\partial u / \partial z = 0$	$\partial v / \partial z = 0$	$\partial \phi / \partial z = 0$

Dados experimentais para uma partícula cilíndrica, com razão diâmetro/altura de 4 e um conteúdo de umidade de 6% e 40% em massa serão considerados como referência. Os resultados obtidos por simulação são apresentados nas figuras 5.42-5.45. Constatase uma boa concordância entre os perfis de conversão de massa simulados e os experimentais, independente do conteúdo de umidade da madeira.

Os perfis de temperatura se diferenciam na superfície da partícula. Como já foi dito, nesta posição é mais difícil manter o contato entre o termopar e a amostra, aumentando a incerteza associada à medição da temperatura. Já os perfis de temperatura preditos no centro da amostra sólida concordam bem com os medidos.

Com relação aos resultados numéricos de perda de massa de Hong Lu (2006), tais resultados se afastam dos experimentais na medida em que o conteúdo de umidade das partículas aumenta. Talvez isto tenha ocorrido porque o modelo de Hong Lu (2006) era unidimensional e também porque não considerava a variação de porosidade durante a secagem e a pirólise de biomassa, o que é um fenômeno verificado experimentalmente. Sabe-se que a variação da porosidade provoca a alteração das propriedades de transporte do meio poroso, alterando a taxa de troca de calor e massa entre a partícula e o meio.

A evolução da porosidade relacionada à conversão de massa é mostrada na figura 5.46. Por se tratar de uma partícula termicamente espessa, a porosidade avança definindo uma frente a partir da superfície até o centro do cilindro.

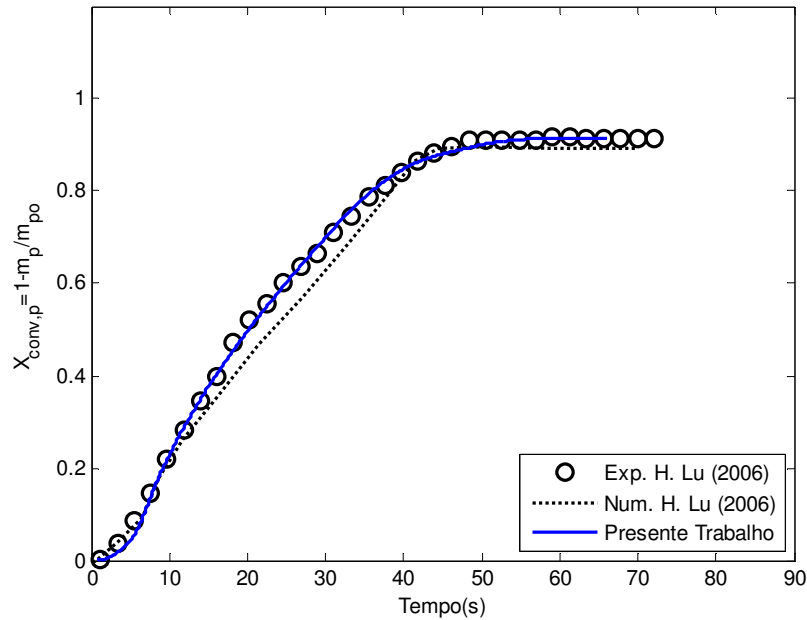


Figura 5.42 - Conversão de massa, conteúdo de umidade de 6%, biomassa cilíndrica com $\varnothing=9,5\text{mm}$ e razão altura/ diâmetro de 4, temperatura do reator de 1273K.

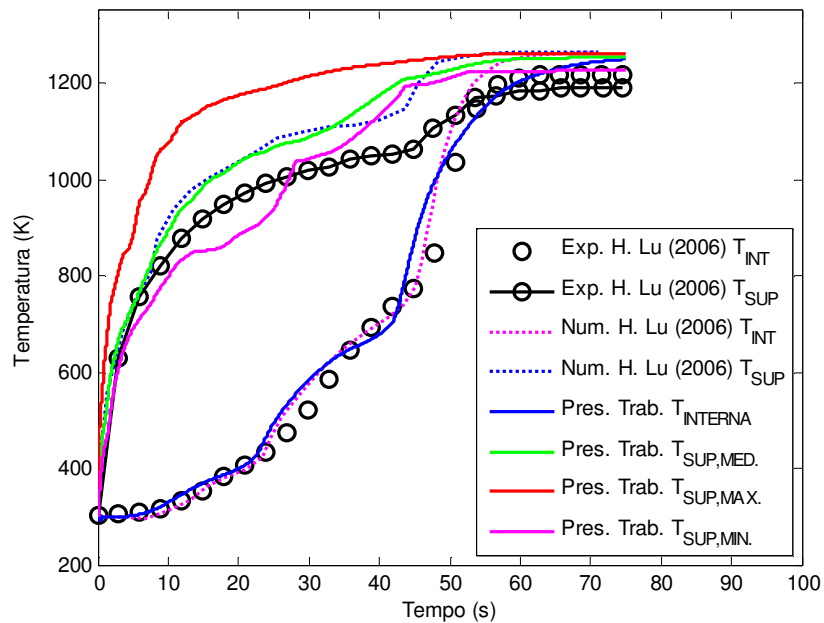


Figura 5.43 - Perfis de temperatura, conteúdo de umidade de 6%, biomassa cilíndrica com $\varnothing=9,5\text{mm}$ e razão altura/ diâmetro de 4, temperatura do reator de 1273K.

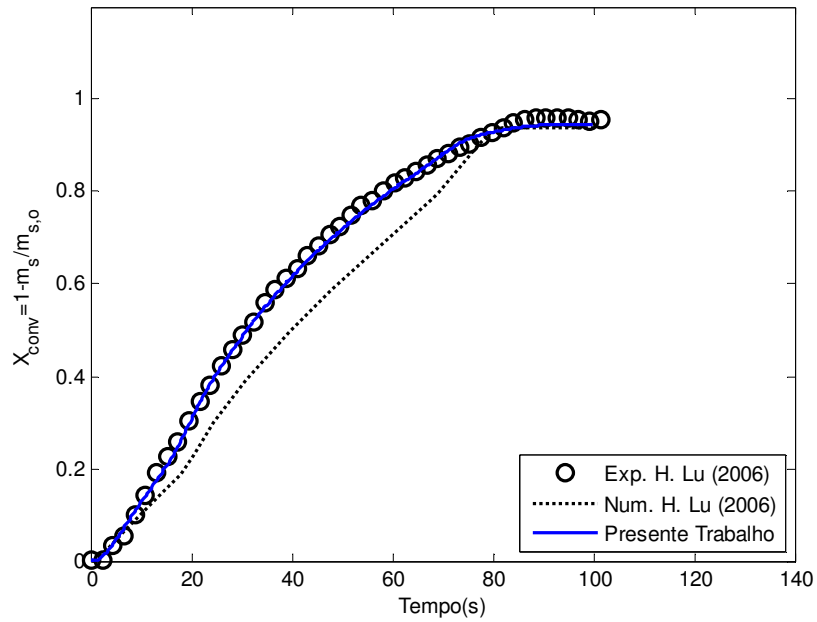


Figura 5.44 - Conversão de massa, conteúdo de umidade de 40%, biomassa cilíndrica com $\varnothing=9,5\text{mm}$ e razão altura/ diâmetro de 4, temperatura do reator de 1273K.

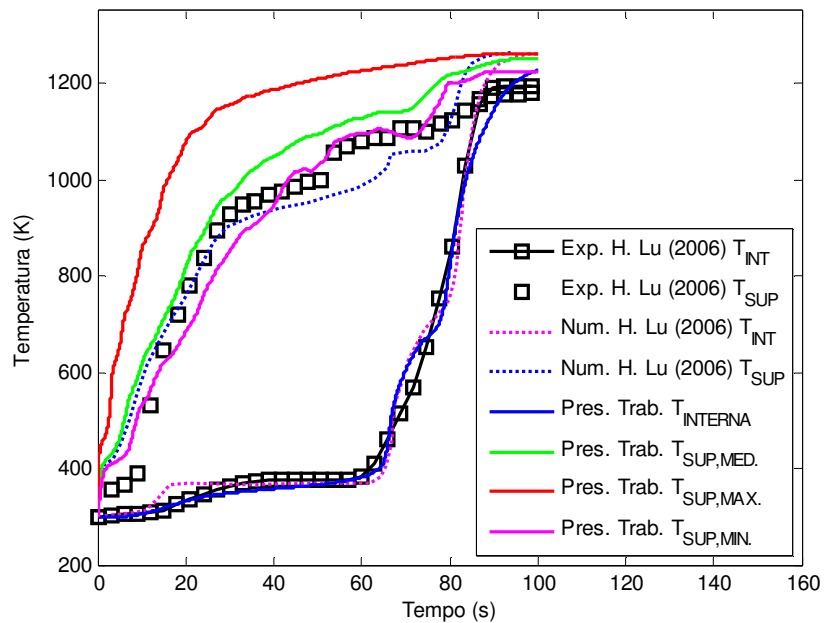


Figura 5.45 - Perfis de temperatura, conteúdo de umidade de 40%, biomassa cilíndrica com $\varnothing=9,5\text{mm}$ e razão altura/ diâmetro de 4, temperatura do reator de 1273K.

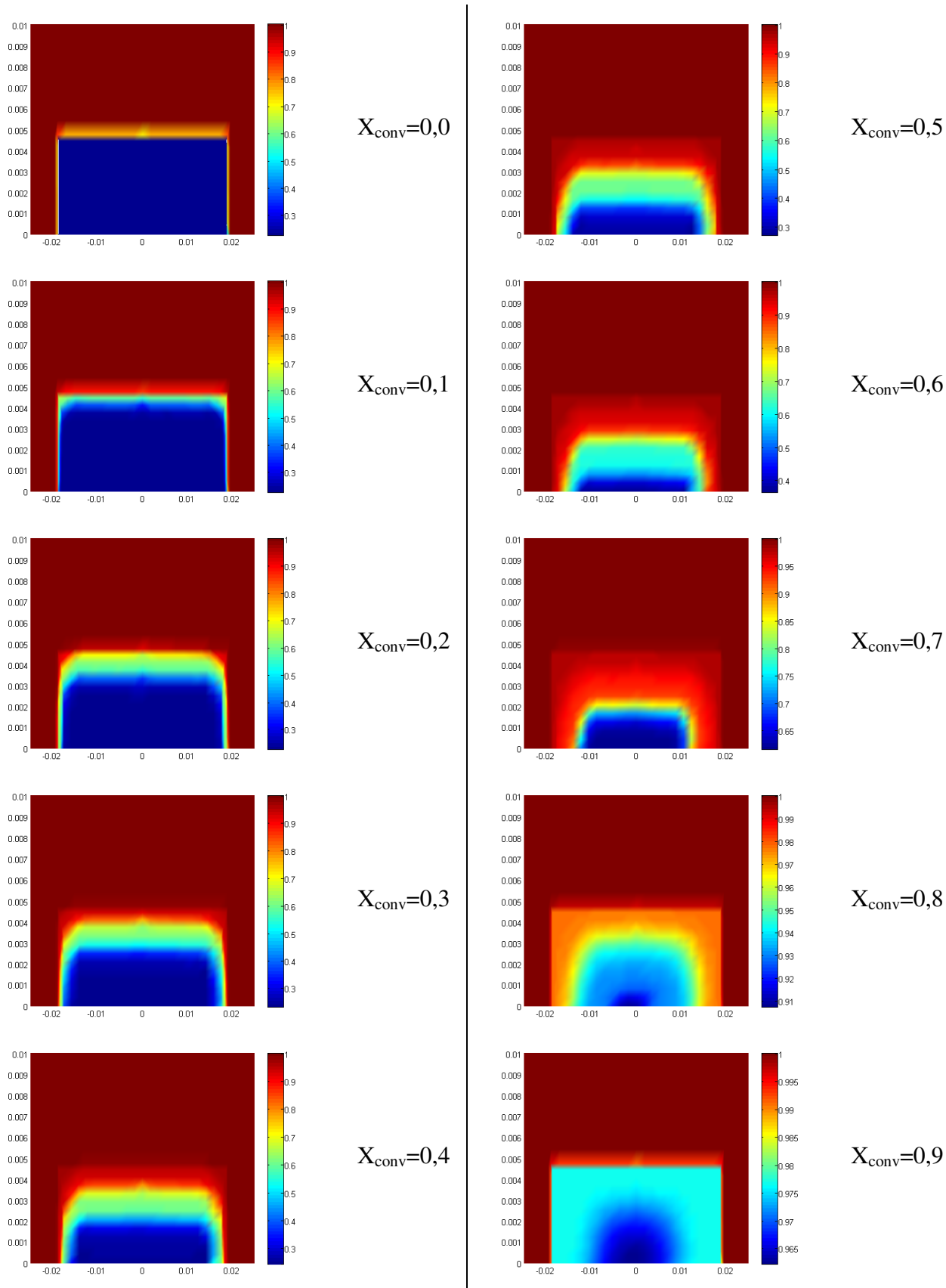


Figura 5.46 – Variação da porosidade com a conversão de material sólido, para conteúdo de umidade de 40%, $\varnothing=9,5\text{mm}$ e razão altura/ diâmetro de 4.

Para a conversão a 50%, os campos de temperatura e velocidade são apresentados nas figuras 5.47 e 5.48. Para este caso, secagem e pirólise de biomassa, o presente modelo se mostrou confiável para a predição da conversão de massa, o que pode indicar que as hipóteses assumidas na modelagem são adequadas para este tipo de simulação.

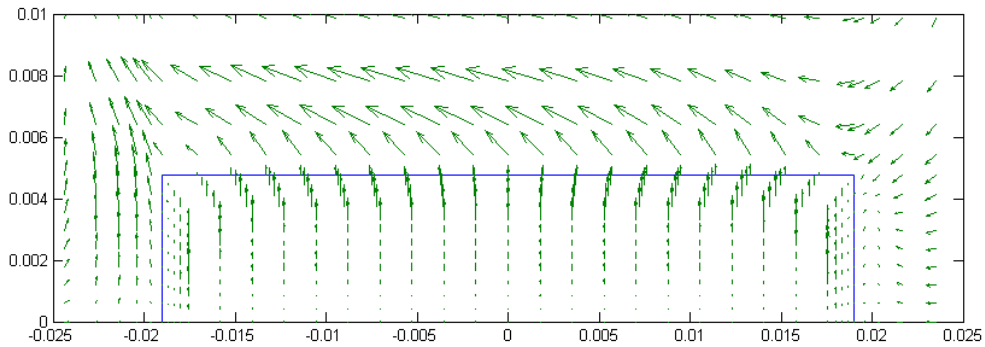


Figura 5.47 – Campo de velocidade para a conversão de 50%.

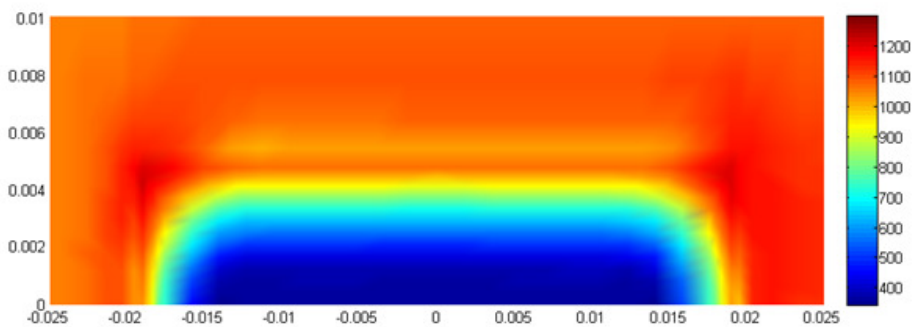


Figura 5.48 – Campo de temperatura para conversão de 50%.

5.10 – CASO DE VALIDAÇÃO DE COMBUSTÃO.

Na classificação de carvão mineral que é normalmente empregado em plantas de potência, nos do tipo betuminoso o teor de voláteis (MV) não excede 40%. Na outra extremidade, o carvão antracito possui menos de 10% de matéria volátil. É de se esperar, portanto, que alterações estruturais na fase condensada, ao longo da combustão, ocorram de forma mais lenta se comparado com biomassa (80% MV) e turfa (65% MV), por exemplo. Desta forma, o modelo aqui proposto foi testado para os casos mais complexos,

isto é, aqueles em que as transformações na estrutura porosa sejam mais acentuadas. Desta forma, o estudo ficou concentrado no uso de turfa e biomassa.

Saastamoinen *et al.* (1993) pesquisaram o fenômeno de sobreposição de conversão de material volátil (pirólise) e carbônico (queima heterogênea) durante a combustão de carvão e turfa. O estudo teve caráter experimental e numérico.

Com base nos resultados de combustão de turfa de Saastamoinen *et al.* (1993) pretende-se validar o presente modelo para micro-partículas. Nas simulações os autores utilizaram uma reação de taxa única para modelar a volatilização da turfa: $k_{pir} = 10^5 (s^{-1}) e^{-80(kJ mol^{-1})/(R_u T_s)}$. A composição do sólido em base seca foi de: C- 57,2% / H- 6,3% / N-2,2 / S-0,5% / O-33,5 / Cinzas-7,0% / MV-70,1. Massa específica de 900 kg/m³, PCI de 22 MJ/kg e energia endotérmica de formação dos voláteis de 250 kJ/kg.

A taxa de oxidação do resíduo carbônico da turfa foi posta como $\hat{R}_{C-O_2} = 4786 e^{-10103/T_s} C_{O_2}$, tomado de Thunman (2002).

Com base no PCI, numa temperatura média de pirólise e na composição da turfa a composição dos voláteis foi calculada com base no trabalho de Thunman *et al.* (2001). Duas formas geométricas foram consideradas nas simulações: a forma esférica e a cilíndrica, ver figura 5.49. Estas formas foram eleitas com base no trabalho de Letho (2007), que estudou o decaimento da massa devido à pirólise de turfa e mostrou que as partículas de turfa exibem diferenças de forma, ver figura 5.50. As diferentes formas das partículas de turfa devem, muito provavelmente, elevar a incerteza deste tipo de experimento.

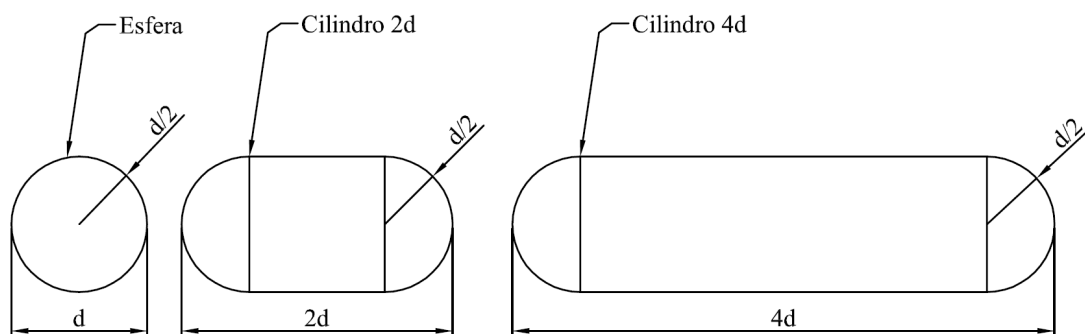


Figura 5.49 - Formas da partícula consideradas nas simulações.

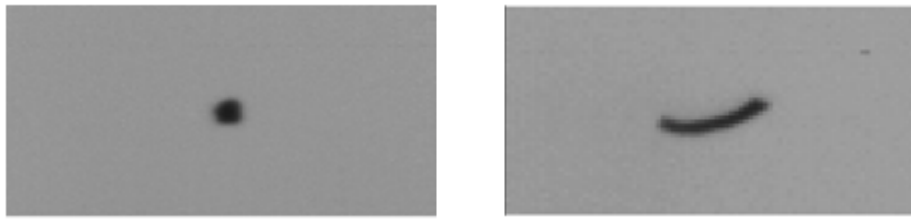


Figura 5.50 - Diferentes formas da partícula de turfa, 180 μ m-200 μ m (Letho, 2007).

A malha utilizada nas simulações, considerando a forma esférica, é apresentada na figura 5.51. Tal malha é composta por 451 nós e 832 elementos. O meio sólido é representado por 252 elementos. As malhas para as duas outras formas foram feitas de forma similar.

As dimensões do domínio foram estabelecidas com base em simulações de modo a minimizar os efeitos dos contornos sobre os resultados. Na malha discreta alguns elementos são postos com porosidade, permeabilidade, massa específica e propriedades termofísicas do sólido. Todas estas quantidades se modificam com a conversão.

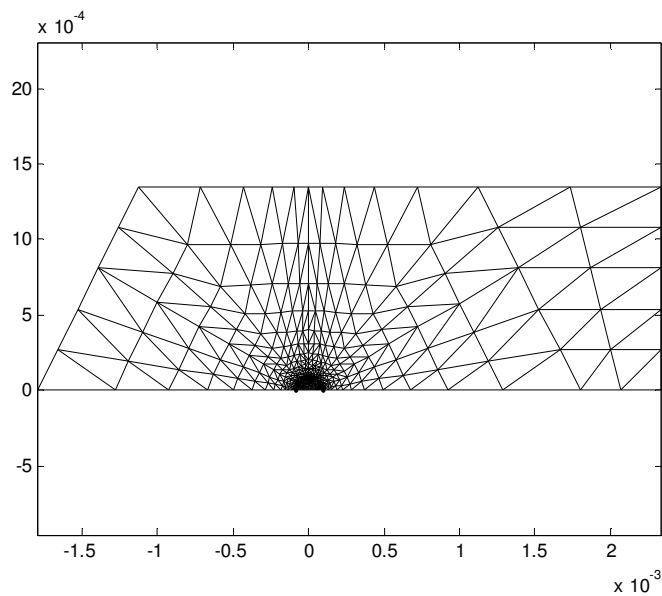


Figura 5.51 – Malha utilizada nas simulações.

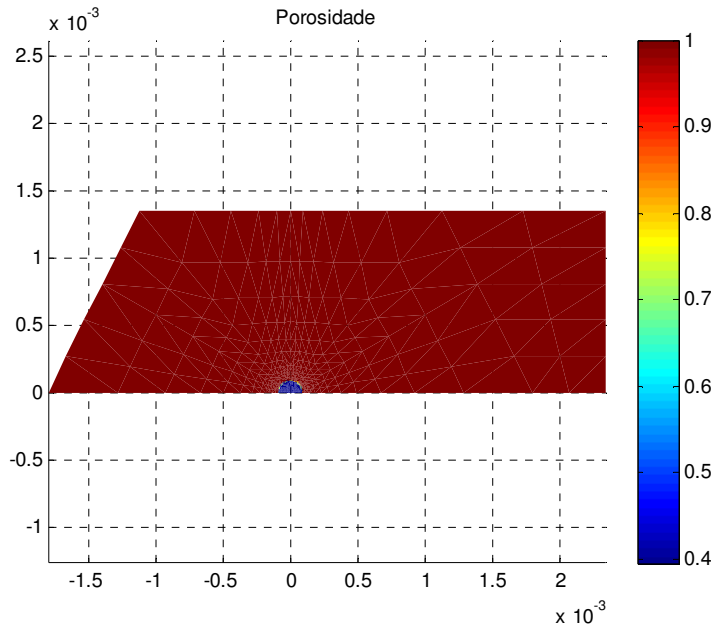


Figura 5.52 – Porosidade inicial utilizada nas simulações.

As condições de contorno e condições iniciais para o caso de combustão são definidas na tabela 5.12.

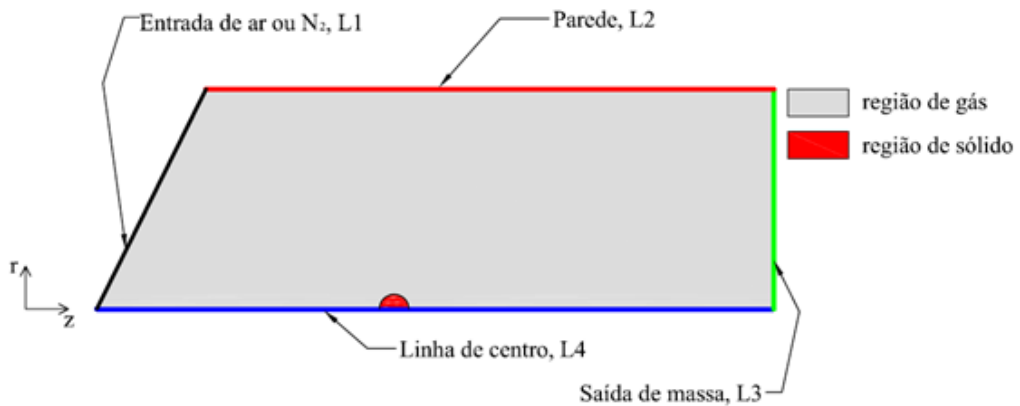


Figura 5.53 – Identificação dos contornos do domínio de cálculo.

Tabela 5.12– condições de contorno, CC, e condições iniciais, CI, do caso de combustão.

CI	$t = 0$	$\nabla_z \wedge \nabla_r$	$u = 0$	$v = 0$	$\phi = \phi_{inicial}$
CC	L4	∇_t	$\partial u / \partial r = 0$	$v = 0$	$\partial \phi / \partial r = 0$
CC	L2	∇_t	$u = 0$	$v = 0$	$\phi = \phi_{contorno}$
CC	L1	∇_t	$u = u_{in}$	$v = 0$	$\phi = \phi_{in}$
CC	L3	∇_t	$\partial u / \partial z = 0$	$\partial v / \partial z = 0$	$\partial \phi / \partial z = 0$

As simulações, para as três formas consideradas, precisaram em média de 27000 passos de tempo para que a partícula pudesse ser consumida totalmente. Perfis de conversão de massa são apresentados na figura 5.54. Nesta figura os resultados do presente trabalho e experimental de Saastamoinen *et al.* (1993) podem ser comparados. Observa-se, na figura 5.54 que a forma da partícula tem grande influência no tempo de conversão. A partícula mais alongada necessita de mais tempo para iniciar a conversão de massa e atinge níveis de temperatura mais elevados. A forma “cilindro 2d” é a que mais aproxima dos dados experimentais. Para esta forma de partícula também foi simulado um caso considerando equilíbrio térmico entre a fase sólida e gasosa, caso nomeado de “Cilindro 2d Eq. Térmico”. Observa-se que a hipótese de equilíbrio térmico torna os processos mais sequenciais, figura 5.55. A emissão de material volátil é mais rápida quando se considera o equilíbrio térmico, pois temperaturas superiores são verificadas neste caso, figura 5.56. Quando não se considera o equilíbrio térmico as temperaturas na superfície da partícula são inferiores, figura 5.56. Isto ocorre, provavelmente, porque os gases ao se formarem no interior do sólido se deslocam, para direção externa, e neste caminho absorvem calor da fase sólida e reduzindo a taxa de aquecimento da partícula.

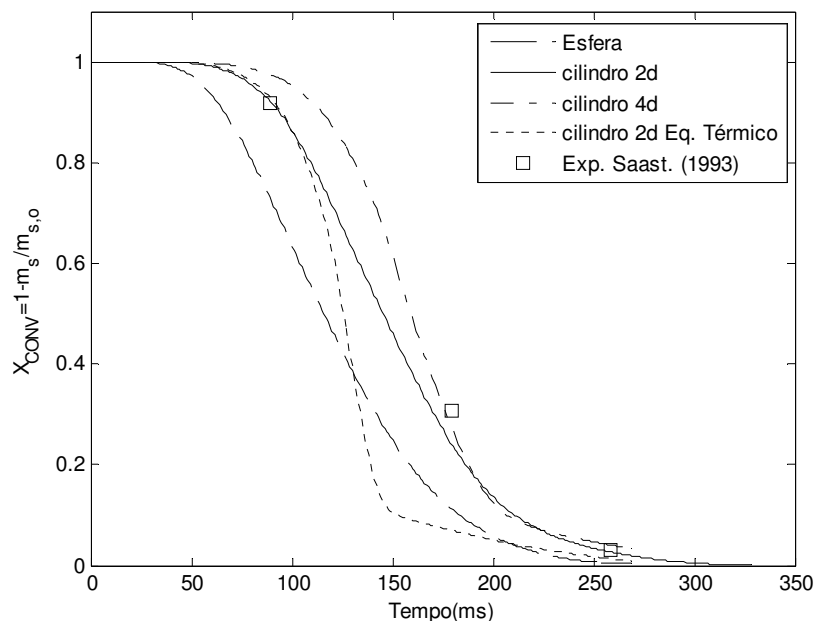


Figura 5.54 - Curva de conversão de massa de turfa, diâmetro de 180 μ m.

A reatividade da partícula é apresentada na figura 5.55. Verifica-se uma grande sobreposição de conversão de massa devido à pirólise e reações heterogêneas. A

reatividade da partícula, na hipótese de equilíbrio térmico, atinge valores bastante elevados se comparado com a simulação onde não se considerou o equilíbrio térmico.

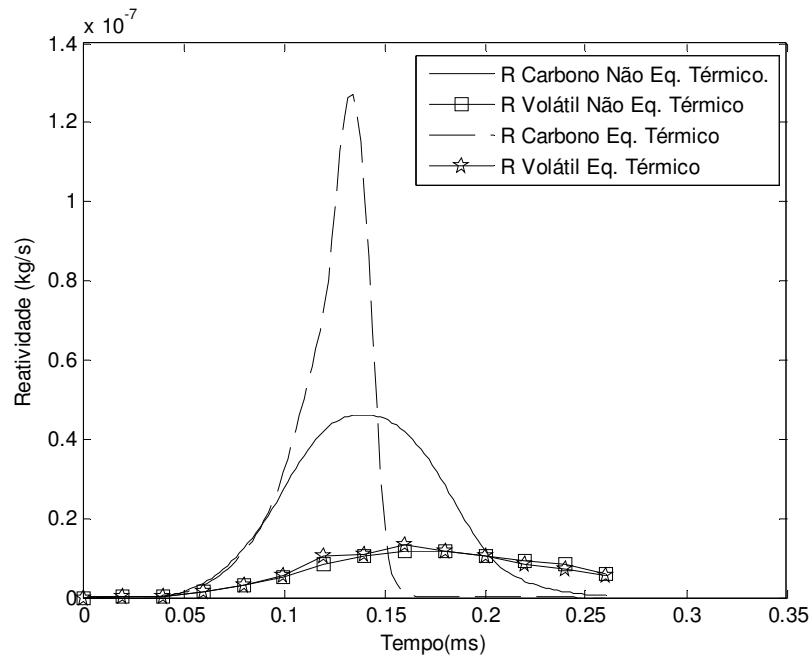


Figura 5.55 - Curva de reatividade do processo de conversão de massa, para “cilindro 2d”, considerando e desconsiderando o equilíbrio térmico.

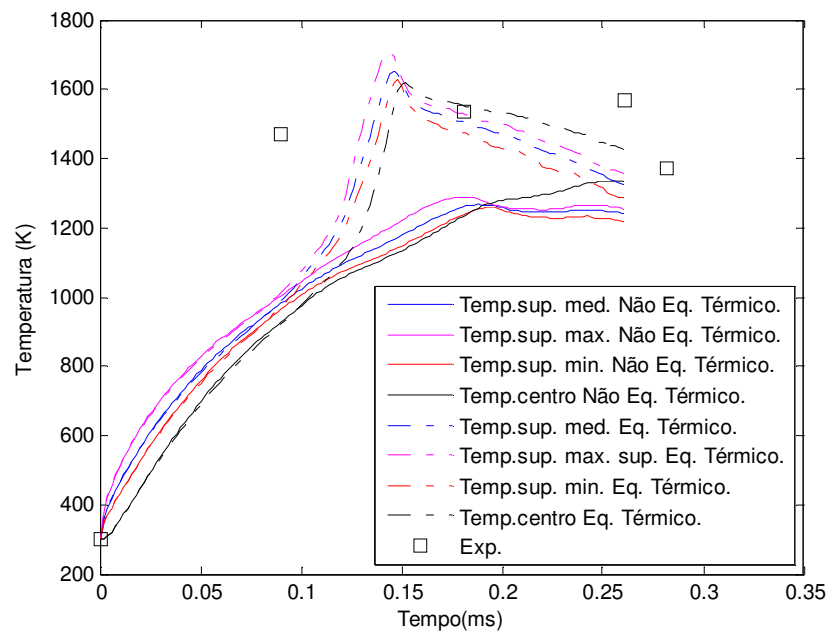


Figura 5.56 - Curva de temperatura em função do tempo, para o “cilindro 2d”.

Variações da porosidade e temperatura com a conversão de massa do combustível, para as três formas consideradas, são apresentadas nas figuras 5.57-5.64. Verifica-se que a variação da porosidade difere entre as formas. Para a forma esférica a porosidade no interior da partícula permanece praticamente uniforme ao longo da conversão. Somente quando a conversão é devida às reações heterogêneas que a partícula passa a ser consumida concentricamente (ver avanço da porosidade na figura 5.57, $X_{\text{conv}}=0,9$). A chama formada em torno da partícula é aproximadamente concêntrica. A chama é ligeiramente mais intensa na parte posterior da partícula. Com base nos resultados constata-se que quanto mais alongada for a partícula mais desigual é a distribuição de porosidade. Por exemplo, para $X_{\text{conv}}=0,5$ os gradientes de porosidade são marcantes para a partícula de forma “cilindro 4d” e bem menos notáveis para a partícula esférica. Para a forma “cilindro 4d” observa-se que a combustão no sólido se inicia pelas extremidades da partícula (figura 5.62), com níveis de temperaturas elevados, cuja frente de chama (heterogênea) avança em direção ao centro onde finalmente se extingue. A partir do campo de temperatura, pode se concluir que o fluxo de calor não é constante na superfície de uma partícula cilíndrica.

Para a partícula “cilindro 2d”, com 7% de cinza, o avanço da porosidade com a conversão também é apresentado para $0,90 \leq X_{\text{conv}} \leq 0,99$, figura 5.63. Neste caso, a conversão da partícula ocorre principalmente devido às reações heterogêneas. Nota-se que a conversão ocorre de maneira menos uniforme pela partícula e que o consumo da mesma (combustão heterogênea) ocorre numa uma frente de mudança de porosidade que se propaga da superfície para o seu interior.

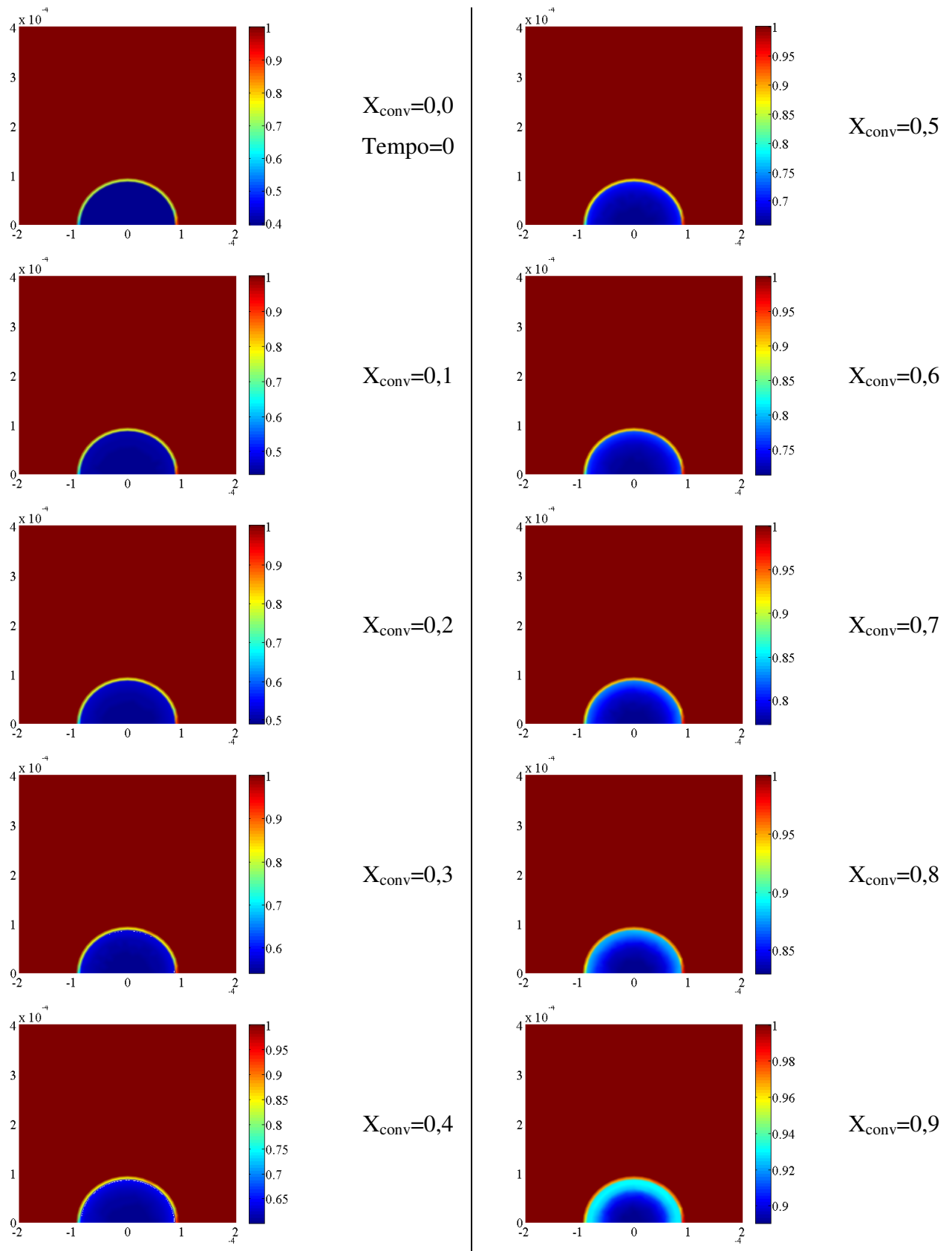


Figura 5.57 – Variação da porosidade com a conversão de material sólido para a partícula esférica com 7% de cinza.

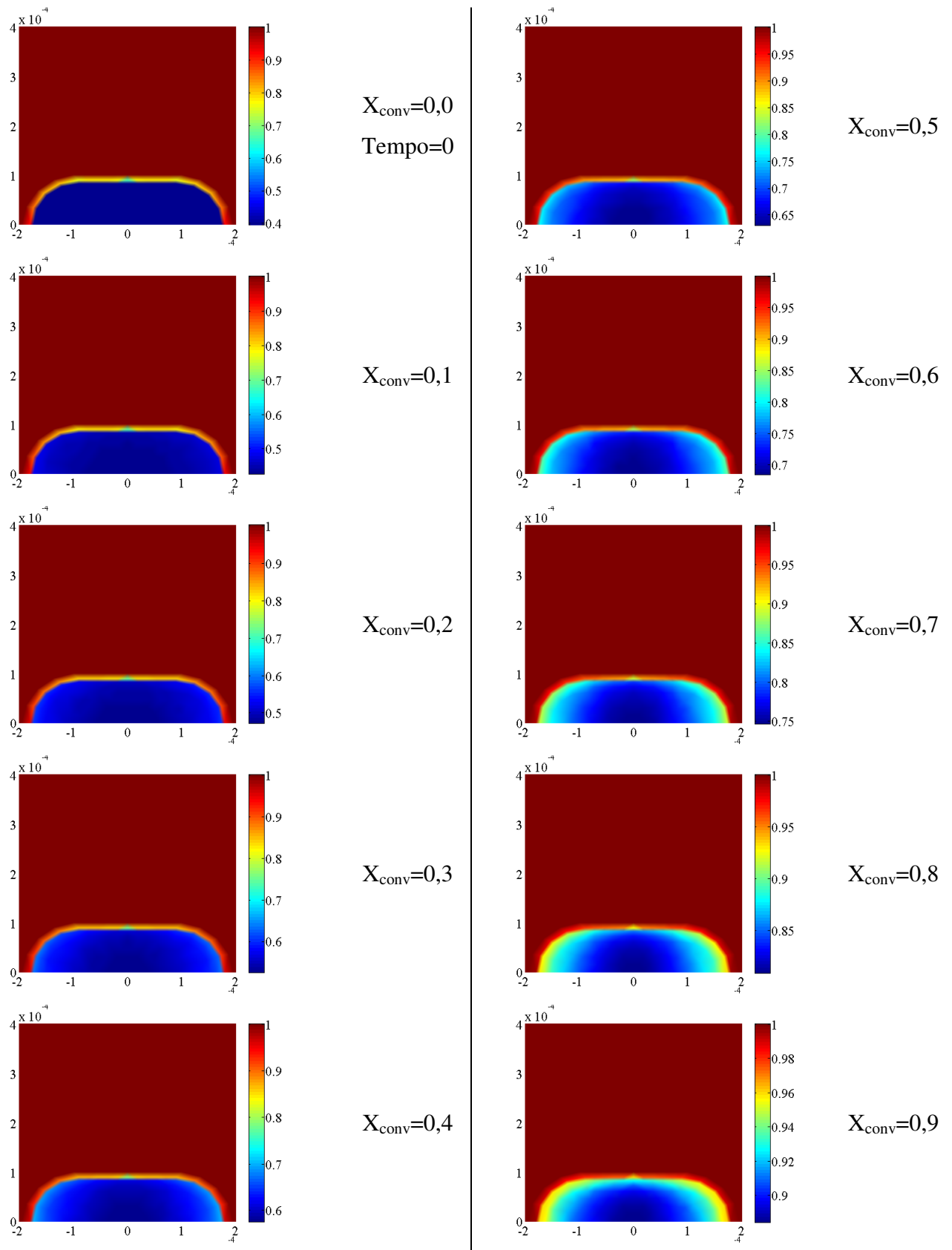


Figura 5.58 – Variação da porosidade com a conversão de material sólido, X_{conv} , para a partícula de forma “cilindro 2d” com 7% de cinza.

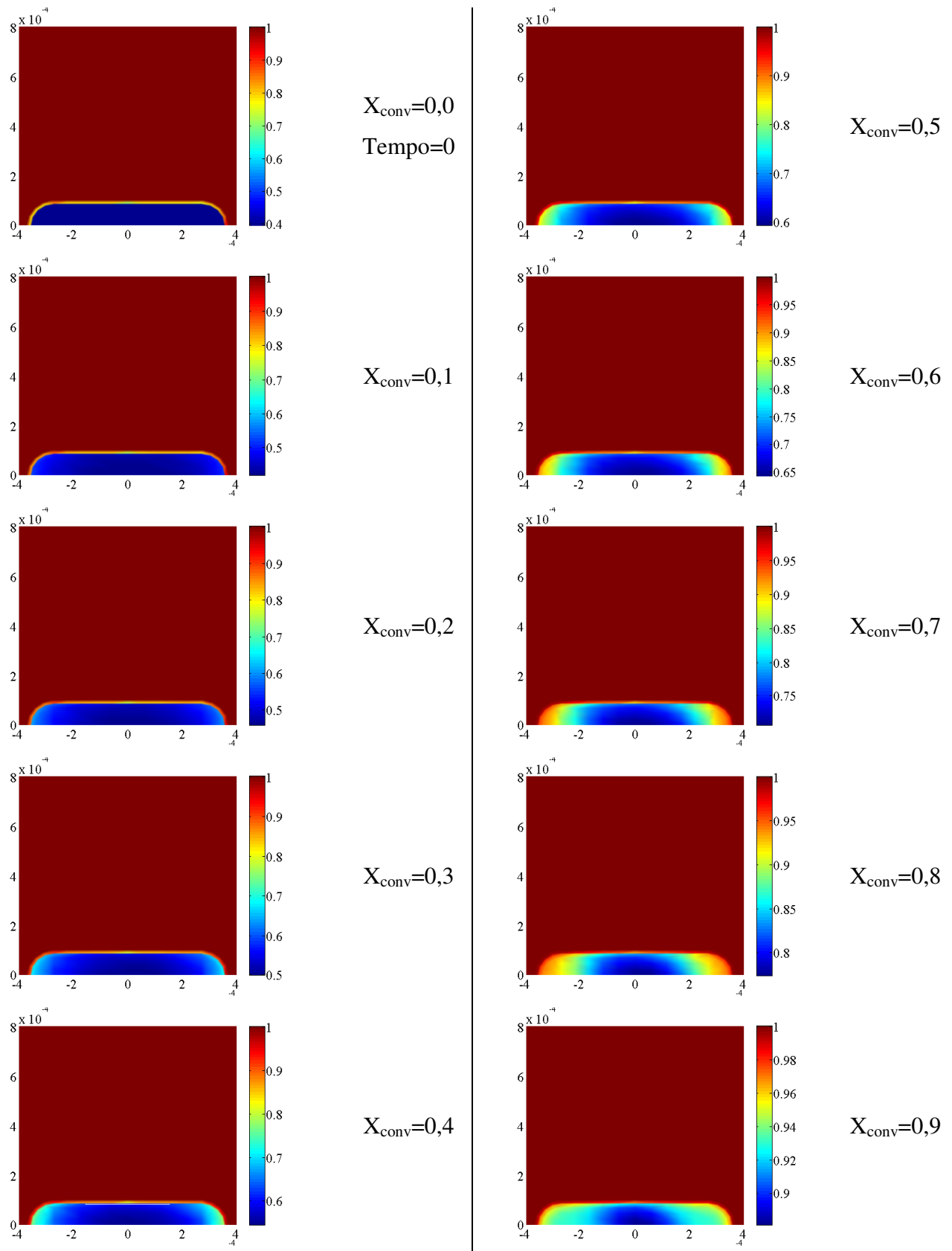


Figura 5.59 – Variação da porosidade com a conversão de material sólido, X_{conv} , para a partícula de forma “cilindro 4d” com 7% de cinza.

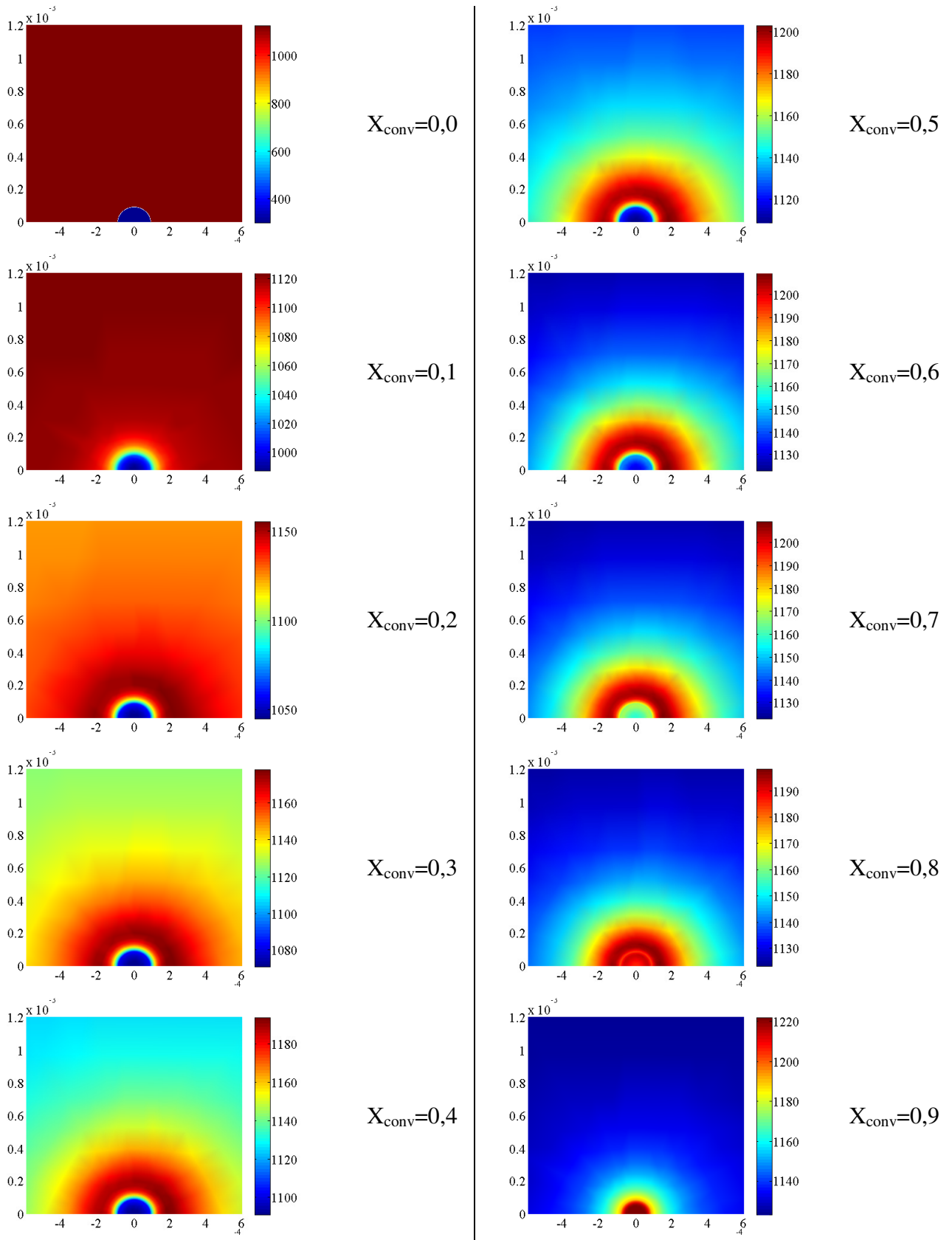


Figura 5.60 – Variação da temperatura com a conversão de material sólido, X_{conv} , para a partícula esférica com 7% de cinza.

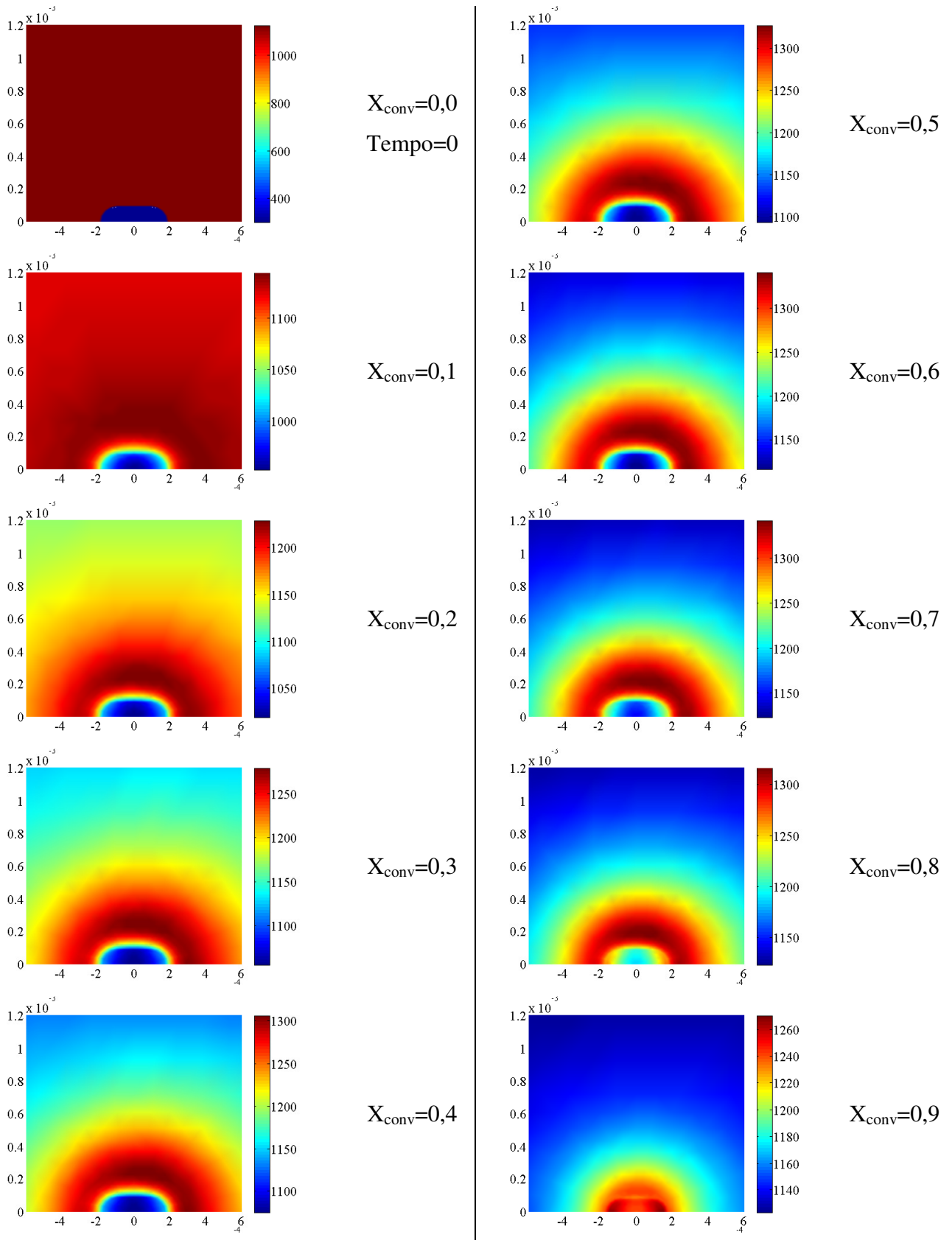


Figura 5.61 – Variação da temperatura com a conversão de material sólido, X_{conv} , para a partícula de forma “cilindro 2d” com 7% de cinza.

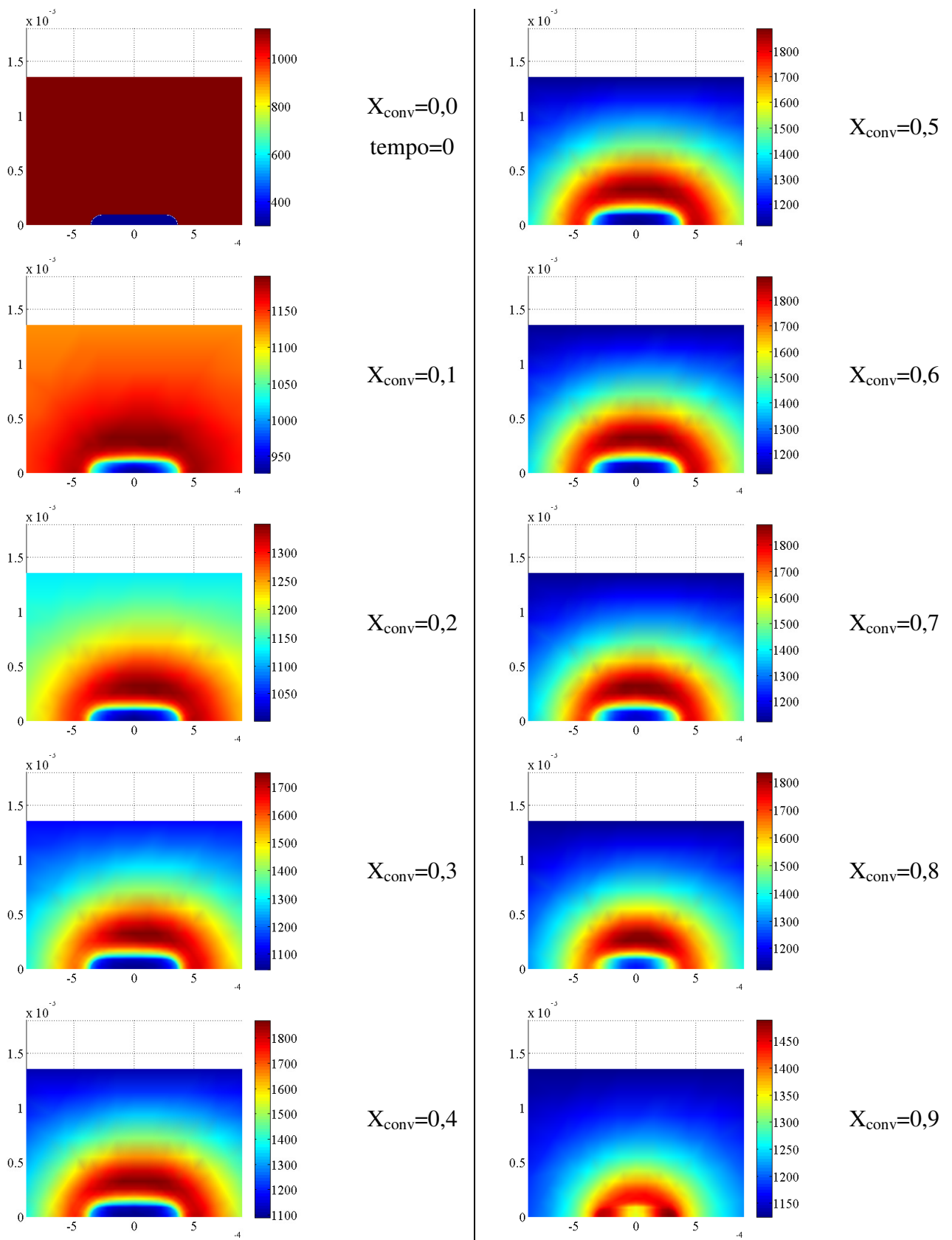


Figura 5.62 – Variação da temperatura com a conversão de material sólido, X_{conv} , para a partícula de forma “cilindro 2d” com 7% de cinza.

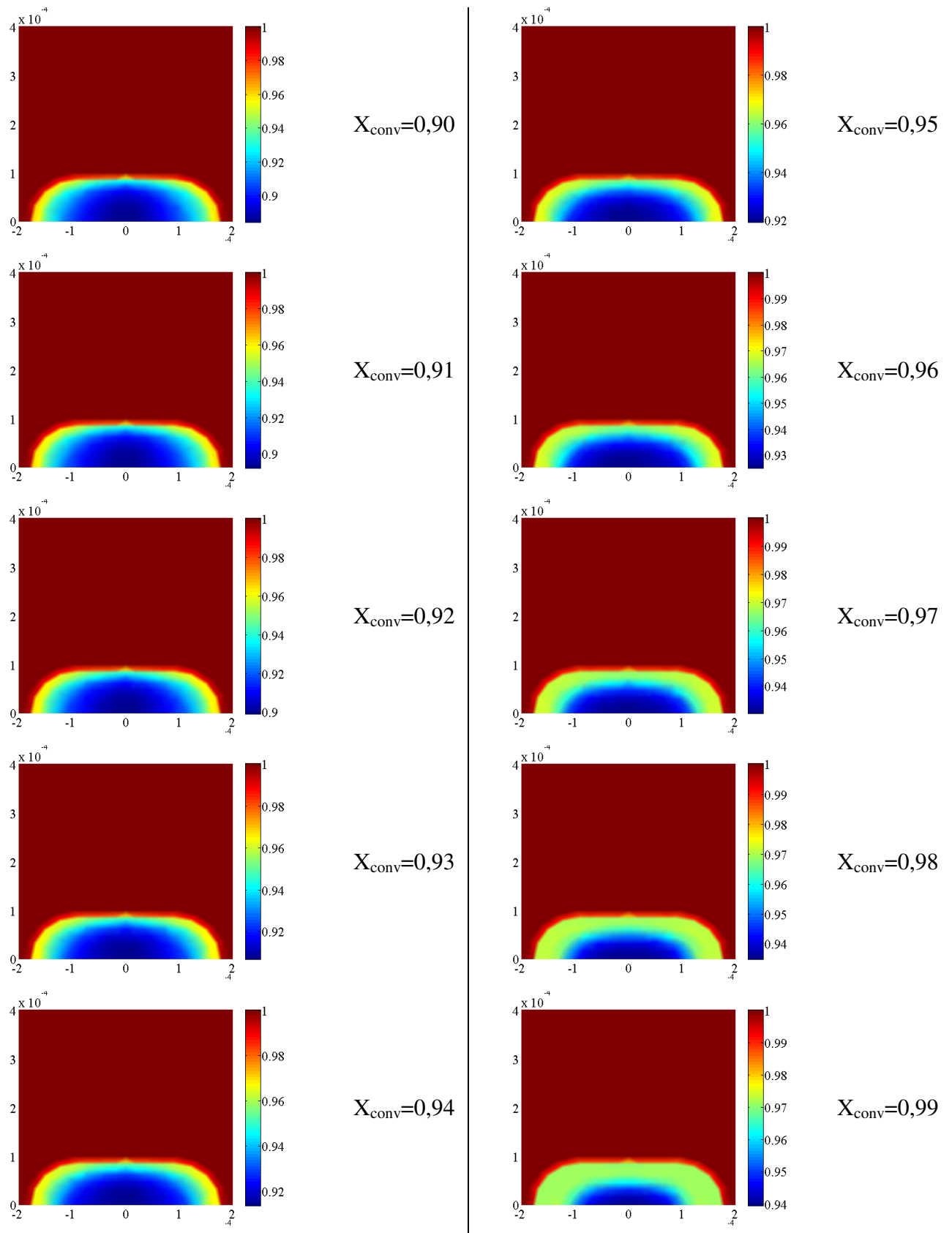


Figura 5.63 – Variação da porosidade com a conversão de material sólido, $X_{conv}=[0,9;0,99]$, para a partícula de forma “cilindro 2d” com 7% de cinza.

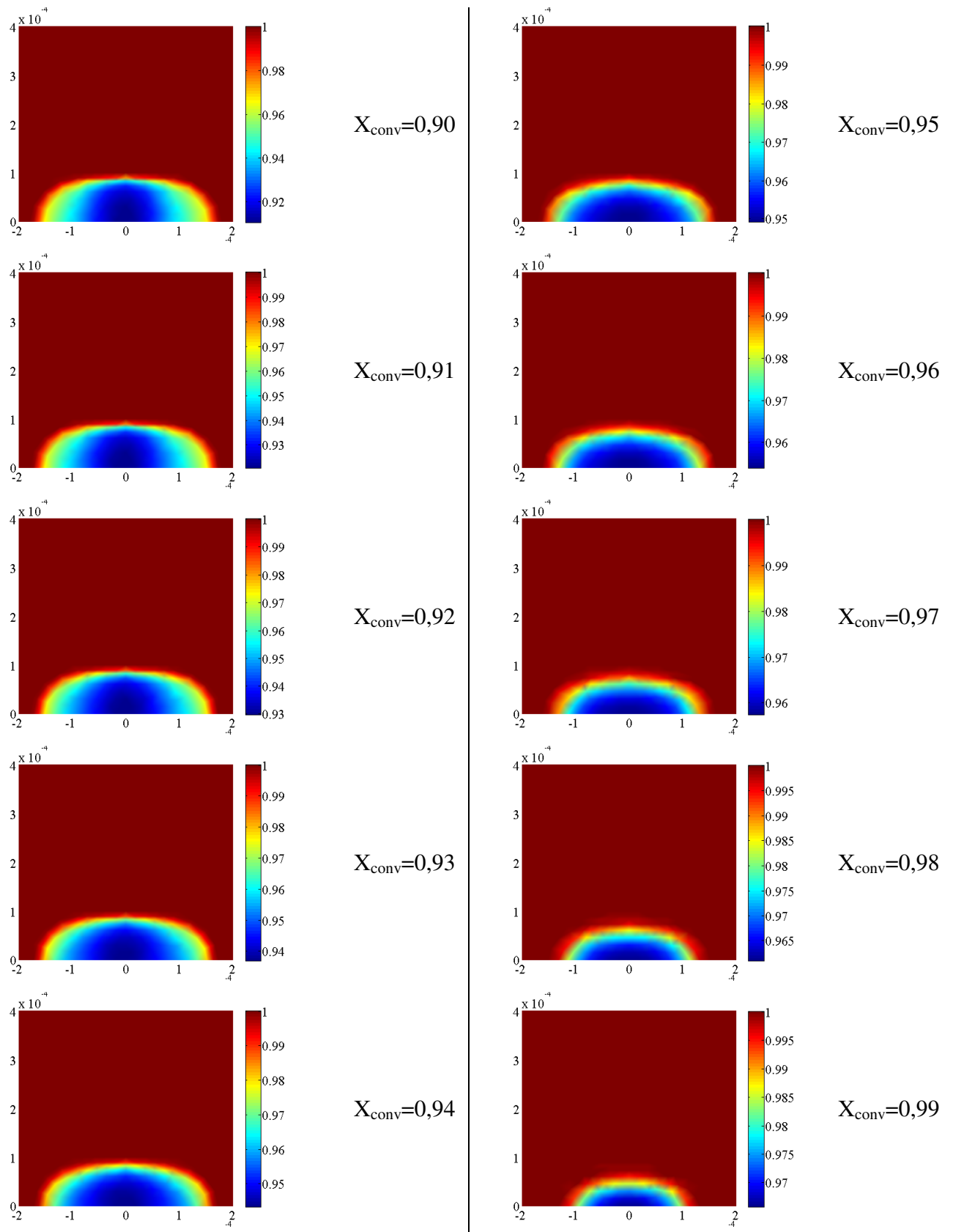


Figura 5.64 – Variação da porosidade com a conversão de material sólido, $X_{conv}=[0,9;0,99]$, para a partícula de forma “cilindro 2d” isenta de cinza.

A figura 5.64 apresenta os resultados da conversão para a mesma partícula, “cilindro 2d” porém isenta de cinza. Observa-se que a ausência de cinza na partícula faz com que a conversão ocorra de forma mais rápida, se comparada com aquela cujo teor de material inerte era de 7%. Obviamente os processos de transferência de calor e de massa são responsáveis por taxas mais elevadas de combustão heterogênea.

Tal como no caso da chama difusão, no presente caso também foram considerados os Algoritmo Sequencial Iterativo (ASI) e Algoritmo Sequencial Não Iterativo (ASNI), vale lembrar que este último algoritmo utiliza a divisão de operadores para facilitar a solução das equações de conservação. A convergência com o ASI foi extremamente difícil. Diversas malhas numéricas e passos e tempo foram utilizados até que fosse obtida uma convergência. O passo de tempo que estabilizou a solução foi de 10^{-5} s. Um resultado com ASI adequadamente convergido era importante, pois poderia ser empregado como referência para verificar se o desacoplamento do termo de reação química utilizado no ASNI teria grande influência nos resultados. A convergência com ASNI foi obtida sem dificuldade, com passo de tempo de 10^{-5} s para o passo fracionado 1 e 10^{-7} s para o passo fracionado 2, que contempla o termo de reação química.

A figura 5.65 apresenta as curvas de conversão de massa. Um caso simplificado onde é admitido o equilíbrio térmico entre a fase sólida e a gasosa também foi simulado, tais curvas são referidas como: “Cilindro 2d, ASI EQT” e “Cilindro 2d, ASNI EQT”.

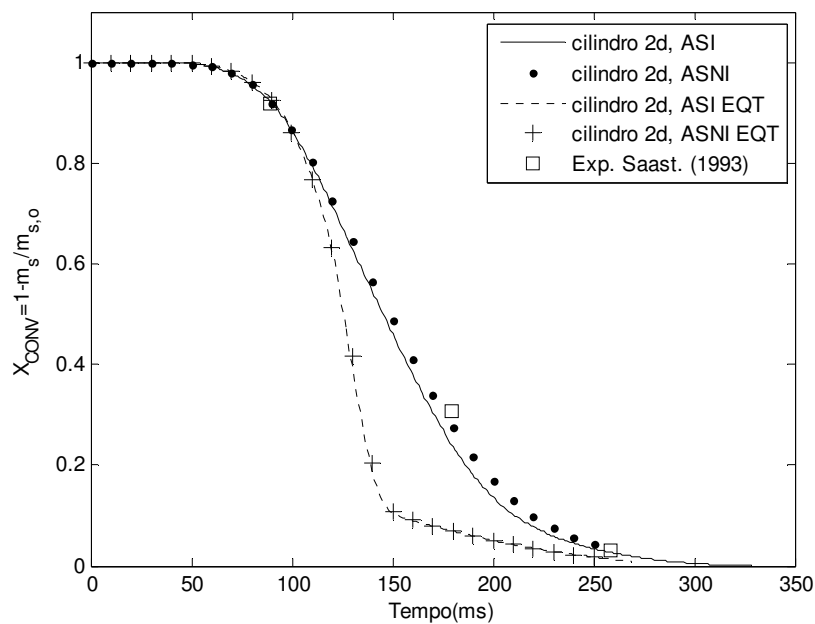


Figura 5.65 – Perfil de temperatura em função do tempo para o “cilindro 2d” com 7% de cinza.

Ambas as curvas apresentam resultados aproximadamente iguais, mas se afastam dos dados experimentais. As curvas onde não é considerado o equilíbrio térmico, “Cilindro 2d, ASI” e “Cilindro 2d, ASNI”, também apresentam resultados bem próximos. Ambas concordam bem com os dados experimentais. Provavelmente as curvas estariam mais concordantes se o passo de tempo considerado fosse inferior 10^{-5} s. Entretanto, não foi possível convergir um caso com um passo de tempo desta magnitude.

A presença de cinza na partícula também foi avaliada teoricamente, figura 5.66. Neste caso foi estabelecido 7% em massa de cinza, conforme citado em Saastamoinen (1993). A cinza nas simulações é contabilizada como um material inerte, não é consumível.

Nota-se que a curva que representa o caso onde é considerada a presença de cinza concorda melhor com os dados experimentais. O tempo de conversão de massa é um pouco maior quando se inclui a cinza porque esta dificulta o transporte de massa, energia e quantidade de movimento através da matriz porosa.

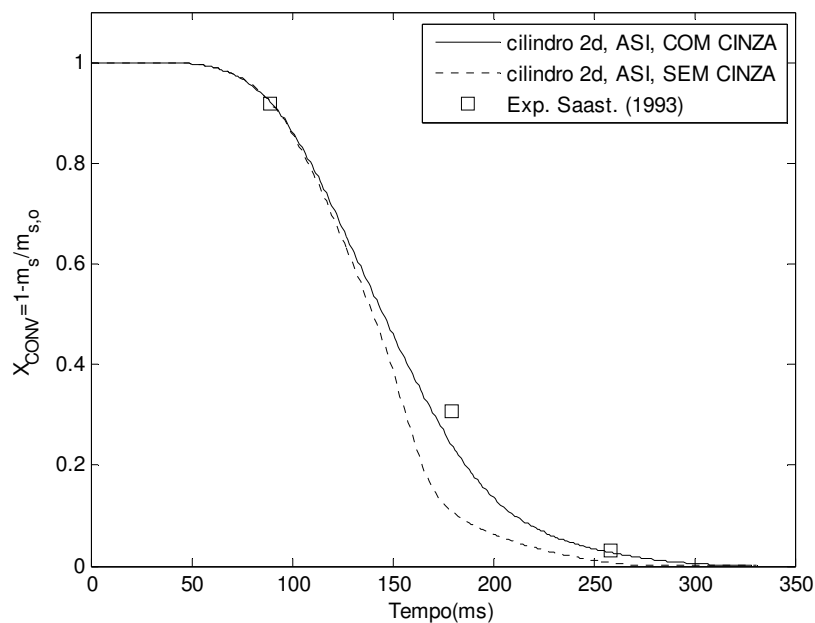


Figura 5.66 - Perfil de temperatura em função do tempo para uma partícula contendo ou não cinza. Forma “cilindro 2d”.

6 – CONCLUSÕES E SUGESTÕES

O objetivo principal deste era desenvolver um modelo matemático apropriado para simular os principais processos termoquímicos que ocorrem na combustão e gaseificação de partícula sólida, em regime de baixo número de Reynolds. O conjunto de equações governantes foi resolvido numericamente por um método aprimorado de volumes finitos baseado em elementos finitos. Importantes modificações, algumas inéditas, foram sugeridas e praticadas no método numérico para melhorar e acelerar a convergência do mesmo. O modelo proposto foi então extensivamente validado e aplicado no estudo da secagem, pirólise e combustão de partícula de carvão e biomassa. As previsões numéricas mostraram excelente concordância com resultados experimentais e teóricos publicados na literatura especializado no assunto. Para partículas de biomassa (~ 80% matéria volátil e elevada umidade) submetidas a elevadas temperaturas as previsões numéricas foram bastante concordantes com dados experimentais.

O modelo proposto tem como aspectos principais:

- Cinética química de conversão de hidrocarboneto em duplo passo com oxidação final do CO e H₂;
- Técnica de divisão de operações (dois passos fracionados) utilizada para solução do acoplamento entre a equação de conservação de energia e de espécies químicas;
- Modificação no algoritmo ESSA de Baliga, que permitiu melhorar o acoplamento entre pressão e velocidade (constatado pelo uso de maiores fatores de sub-relaxação das velocidades), reduzindo o tempo de processamento;
- Proposição de um novo método para o cálculo do comprimento médio característico do elemento triangular para uso na função de interpolação FLO.
- Proposição de uma nova função de interpolação (mista) para a velocidade do termo de convecção;
- Proposição de um novo modo para o cálculo do termo de fonte volumétrico a partir do termo de fonte do elemento;
- Implementação conjunta das novas propostas no método numérico, com ganhos adicionais para a convergência do mesmo;

- Aprimoramento na definição da fase condensada pelo uso de estrutura bimodal, macro-poros e micro-poros, que tornam os cálculos da evolução de massa, por meio da pirólise e das reações heterogêneas, mais realísticos.

Como sugestões para trabalhos futuros têm-se:

- Implementação no código numérico proposto de um modelo de radiação para a fase gasosa que contabilize a participação dos gases nas trocas de calor, com possível formação de fuligem.
- Estudo da ignição de partículas de carvão e biomassa em regimes de combustão e gaseificação;
- Estudo da queima de carvão e biomassa em ambiente oxidativo O_2/CO_2 , típicos de sistemas com captura de carbono,
- Estudo da queima e gaseificação de carvão e biomassa em regime de alta pressão,
- Implementação de um modelo de ruptura da camada de cinza e estudo da queima e gaseificação de carvão mineral brasileiro (alto teor de cinza);
- Estudo da torrefação de partículas de biomassa;
- Estudo da secagem de partículas de biomassa de interesse nacional, como bagaço de cana-de-açúcar, serragem, entre outras.
- Implementação das reações com óxidos de nitrogênio e enxofre para estudo das principais emissões em plantas de potência com queima de carvão/biomassa pulverizado.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Afshar, M., Baliga, B. R. (1993). "A sequential Algorithm for Solution of the Discretized Momentum and Continuity Equations." In: Proc. Eighth Int. Conf. on Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow, Swansea, U.K. 668-680.
- Ammara, I., Masson, C. (2004). "Development of a fully coupled control-volume finite element method for the incompressible Navier–Stokes equations." In: International Journal for Numerical Methods in Fluids, 44, 621-644.
- Arenillas, A., Rubiera, F., Pevida, C., Pis, J.J. (2001). "A comparison of different methods for predicting coal devolatilisation kinetics." In: Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 58–59, 685-701.
- Ayling, A.B., and Smith, I.W. (1972). "Measured Temperatures of Burning Pulverized-Fuel Particles and the Nature of the Primary Reaction Product." In: Combust. and Flame, 18, 173-184.
- Baliga, B.R., Patankar, S.V. (1980). "A new finite-element formulation for convection–diffusion problems." In: Numerical Heat Transfer, 3, 393-409.
- Basu, P. (2006). "Combustion and gasification in fluidized beds". CRC Press, Boca Raton.
- Baxter, L. L., Mitchell, R. E., Fletcher, T. H., Hurt, R. H. (1996). "Nitrogen Release during Coal Combustion." In: Energy & Fuels, 10, 188-196.
- Bejan, A.; Kraus, A. D. (2003). "Heat Transfer Handbook", John Wiley & Sons, New Jersey.
- Belderok, H.J.M. (2007). "Experimental investigation and modeling of the pyrolysis of biomass", master thesis, Eindhoven University of Technology.
- Bellais, M. (2007). "Modeling of the pyrolysis of large wood particles", Doctoral Thesis, Division of Chemical Technology, Department of Chemical Engineering and Technology, KTH - Royal Institute of Technology.
- Bhatia, S. K., & Perlmutter, D. D. (1980). "A random pore model for fluid-solid reactions: I. Isothermal, kinetic control." In: A.I.Ch.E. Journal, 26, 379-386.
- Biggs, M. J., & Agarwal, P. K. (1997). "The CO-CO₂ product ratio for a porous char particle within an incipiently fluidized bed: A numerical study." In: Chemical Engineering Science, 52, 941-952.
- Bird, R.B., Stewart, W.E. and Lightfoot, E.N. (2001). "Transport Phenomena", Second Edition, John Wiley & Sons. ISBN 0-471-41077-2.
- Borman, G. L. e Ragland, K. W. (1998). "Combustion Engineering", McGraw-Hill, USA.

- Botella, O., Peyret, R. (1998) "Benchmark Spectral Results on the Lid-Driven Cavity Flow." In: *Computers & Fluids*, 27(4), 421-433.
- Bradley, D., Lawes, M., Park, H. Y., Usta, N. (2006). "Modeling of laminar pulverized coal flames with speciated devolatilization and comparisons with experiments." In: *Combustion and Flame*, 144, 190-204.
- Bryden, K. M., Hagge, M. J. (2003). "Modeling the combined impact of moisture and char shrinkage on the pyrolysis of a biomass particle." In: *Fuel*, 82, 1633-1644.
- Bryden, K. M., Ragland, K. W., Rutland, C. J. (2002). "Modeling thermally thick pyrolysis of wood." In: *Biomass and Bioenergy*, 22, 41-53.
- Cancès, J., Commandré, J. M., Salvador, S., Dagaut, P. (2008) "NO reduction capacity of four major solid fuels in reburning conditions – Experiments and modeling." In: *Fuel*, 87, 274-289.
- Chen, Y., Charpenay, S., Jensen, A., Wójtowicz, M. A., Serio, M. A. (1988). "Modeling of Biomass Pyrolysis Kinetics." In: *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute*, 1327-1334.
- Costa, V. A. F., Oliveira, L. A., Baliga, B. R., Sousa, A. C. M. (2004). "Simulation of Coupled Flows In Adjacent Porous and Open Domains Using a Control-Volume Finite-Element Method." In: *Numerical Heat Transfer, Part A*, 45, 675-697.
- De Souza-Santos, M. L. (2004). "Solid Fuels Combustion and Gasification: Modeling, Simulation, and Equipment Operation". Marcel Dekker Inc., New York, NY, USA, (ISBN: 0-8247-0971-3).
- Demirbas, A. (2004). "Combustion characteristics of different biomass fuels." In: *Progress in Energy and Combustion Science*, 30, 219-230.
- Di Blasi, C. (1996). "Heat, Momentum and Mass Transport Through a Shrinking Biomass Particle Exposed to Thermal Radiation." In: *Chemical Engineering Science*, 51(7), 1121-1132.
- Di Blasi, C. (1998). "Multi-phase moisture transfer in the hightemperature drying of wood particles." In: *Chemical Engineering Science*, 53(2), 353-366.
- Di Blasi, C. (2008). "Modeling chemical and physical processes of wood and biomass pyrolysis." In: *Progress in Energy and Combustion Science*, 34, 47-90.
- Díez, L. I., Cortés, C., Pallarés, J. (2008). "Numerical investigation of NO_x emissions from a tangentially-fired utility boiler under conventional and overfire air operation." In: *Fuel*, 87, 1259-1269.

- Durst, F. (1985). "Investigations of laminar flow in a pipe with sudden contraction of cross sectional area." In: *Computers & Fluids*, 13, 15-36.
- Eaton, A.M.; Smoot, L.D.; Hill, S.C.; Eatough, C.N. (1999). "Components, Formulations, Solutions, Evaluation, and Application of Comprehensive Combustion Models." In: *Progress in Energy and Combustion Science*, 25, 387-436.
- Ergun, S. (1952). "Fluid flow through packed columns." In: *Chemical Engineering Progress*, 48(2), 89-94.
- Fan, J.R., Jin, J., Liang, X.H., Chen, L.H., Cen, K.F. (1998). "Modeling of coal combustion and NO_x formation in a W-shaped boiler furnace." In: *Chemical Engineering Journal*, 71, 233-242.
- Ferziger, J. H., Peric, M. (2002). "Computational Methods for Fluid Dynamics", 3^a ed., XIV, 423 p.
- Flagan, R. C. e Seinfeld, J. H. (1988), "Fundamentals of Air Pollution Engineering", California Institute of Technology, Prentice-Hall, New Jersey
- Fletcher, C. A. J. (1991). "Computational Techniques for Fluid Dynamics 1", 2^aed, Springer, 123p. New York.
- Fletcher, D.F., Haynes, B.S., Christo, F.C., Joseph, S.D. (2000). "A CFD based combustion model of an entrained flow biomass gasifier." In: *Applied Mathematical Modeling*, 24, 165-182.
- Fletcher, T. H. (1998). "Determination of The Forms of Nitrogen Released In Coal Tar During Rapid Devolatilization." In: Final Report, Chemical Engineering Department, Brigham Young University, Provo, UT 84602.
- Fornberg, B. (1980). "A numerical study of steady viscous flow past a circular cylinder." In: *J. Fluid Mech.*, 98(4), 819-855.
- Förtsch, D., Kluger, F., Schnell, U., Spliethoff, H., Hein, K. R. G. (1998). "A Kinetic Model for the Prediction of NO Emissions from Staged Combustion of Pulverized Coal." In: *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute*, 3037-3044.
- Galgano, A., Di Blasi, C. (2004). "Modeling the propagation of drying and decomposition fronts in wood." In: *Combustion and Flame*, 139, 16-27.
- Genetti, D. B. (1999). "An Advanced Model of Coal Devolatilization Based on Chemical Structure", Degree Master of Science, Department of Chemical Engineering, Brigham Young University.

- Ghabi, C., Rein, G., Ticha, H. B., Sassi, M. (2005). "Bidimensionnal Numerical Model for Polyurethane Smoldering in a Fixed Bed." In: 4th International Conference on Computational Heat and Mass Transfer, Paris-Cachan, FRANCE.
- Ghia U., Ghia K.N., Shin C.T. (1982). "High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method." In: Journal of Computational Physics, 48, 387-411.
- Gronli, M. G. and M. C. Melaaen. (2000) "Mathematical model for wood pyrolysis – comparison of experimental measurements with model predictions." In: Energy & Fuels, 14(4), 791-800.
- Ha, J., zhu, Z. (1998). "Computation of Turbulent Reactive Flows In Industrial Burners." In: Applied Mathematical Modeling, 22, 1059-1070.
- Han, X., Wei, X., Schnell, U., Hein, K. R.G. (2003). "Detailed modeling of hybrid reburn/SNCR processes for NO_x reduction in coal-fired furnaces." In: Combustion and Flame, 132, 374-386.
- Hautman, D. J., Dryer, F. L., Shug, K. P., Glassman, I. (1981). "A Multiple-Step Overall Kinetic Mechanism for the Oxidation of Hydrocarbons." In: Combustion Science and Technology, 25, 219.
- Heikkinen, J. M. (2005). "Characterisation of Supplementary Fuels for Co-combustion with Pulverised Coal", Master of Science, Tampere University of Technology, Finland geboren te Kajaani, Finland.
- Helsen, L. M. L. Van den Bulck, E. V. M. (2001). "Study of a new macro-particle model for the low-temperature pyrolysis of dried wood chips." In: Heat and Mass Transfer, 38, 165-181.
- Hill, S.C., Smoot, L. D. (2000). "Modeling of nitrogen oxides formation and destruction in combustion systems." In: Progress in Energy and Combustion Science, 26, 417–458.
- Hong Lu (2006). "Experimental and Modeling Investigations of Biomass Particle Combustion", Doctoral Thesis, Department Chemical Engineering, Brigham Young University.
- Hong, J. (2000). "Modeling Char Oxidation As A Function Of Pressure Using An Intrinsic Langmuir Rate Equation", Doctoral Thesis, Department of Chemical Engineering, Brigham Young University.
- Hottel, H. C. and Sarofim, A. F. (1967). "Radiative Transfer". McGraw-Hill Book Company, New York.

- Hurt, R. H., Calo, J. M. (2001). "Semi-Global Intrinsic Kinetics for Char Combustion Modeling." In: *Combustion and Flame*, 125:1138-1149.
- Hurt, R. H., Haynes, B. S. (2005). "On the origin of power-law kinetics in carbon oxidation." In: *Proceedings of the Combustion Institute*, 30, 2161-2168.
- Hurt, R. H., Sun, J. K. Lunden, M. (1998). "A Kinetic Model of Carbon Burnout in Pulverized Coal Combustion." In: *Combustion and Flame*, 113, 181-197.
- Ip, Leong-Teng. (2005). *Comprehensive black liquor droplet combustion studies*. Chemical Engineering, Brigham Young University.
- Klason, T., Bai, X.S. (2007). "Computational study of the combustion process and NO formation in a small-scale wood pellet furnace." In: *Fuel*, 86, 1465-1474.
- Kobayashi, H.; Howard, J.B.; Sarofim, A.F. (1976). "Coal Devolatilization at High Temperatures." In: *Sixteenth Symposium (Int.) on Combustion*, p. 411.
- Krabbenhøft, K. (2003). "Moisture Transport in Wood", Doctoral Thesis, Department of Civil Engineering, Technical University of Denmark.
- Krishna, R. e Wesselingh, J. A., (1996), "The Maxwell-Stefan approach to mass transfer." In: *Chemical Engineering Science*, 52, 861-911.
- Larfeldt, J., Leckner, B., Melaaen, M. C. (2000). "Modeling and measurements of heat transfer in charcoal from pyrolysis of large wood particles." In: *Biomass and Bioenergy*, 18, 507-514.
- Law, C. K., (2006). "Combustion Physics", Cambridge University Press, New York.
- Li, J., Chambarel, A., Donneaud, M., Martin, R. (1991). "Numerical study of laminar flow past one and two cylinders." In: *Computers and Fluids*; 19, 155-170.
- Liu, H., Gibbs, B. M. (2002). "Modeling of NO e N₂O emissions from biomass-fired circulating fluidized bed combustors." In: *Fuel*, 81, 271-280.
- Maliska, C. R. (2004). "Transferência De Calor E Mecânica Dos Fluidos Computacional." 2ed. Rio De Janeiro: LTC.
- Merrick, D. (1983). "Mathematical models of the thermal decomposition of coal - 2. Specific heats and heats of reaction." In: *Fuel*, 62(5), 540-546.
- Monson, C. R., Germane, G. J., Blackdam, A. U., Smoot, L. D. (1995). "Char Oxidation at Elevated Pressures." In: *Combustion and Flame*, 100, 669-683.
- Murthy, J. Y. (2002). "Numerical Methods in Heat, Mass, and Momentum Transfer", Draft Notes, School of Mechanical Engineering, Purdue University.
- Nield, D. A., Bejan, A. (2006). "Convection in Porous Media", 3 ed, Springer, New York.

- Niksa, S., Liu, G. S., Hurt, R. H. (2003). "Coal conversion submodels for design applications at elevated pressures. Part I. devolatilization and char oxidation." In: *Progress in Energy and Combustion Science*, 29, 425-477.
- Órfão, J.J.M., Antunes, F.J.A., Figueiredo, J.L. (1999). "Pyrolysis kinetics of lignocellulosic materials-three independent reactions model." In: *Fuel*, 78, 349-358.
- Orlandi, Paolo (1999). "Fluid Flow Phenomena: A Numerical Toolkit (Fluid Mechanics and Its Applications)". 1St edition, December 1, Springer.
- Park, Won Chan. (2008), "A Study of Pyrolysis of Charring Materials and Its Application to Fire Safety and Biomass Utilization", Doctoral Thesis, Mechanical Engineering, University of Michigan.
- Patankar, S. V. (1980). "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere-McGraw-Hill, Washington, DC.
- Perkins, G., Sahajwalla, V. (2005). "A Mathematical Model for the Chemical Reaction of a Semi-infinite Block of Coal in Underground Coal Gasification." In: *Energy & Fuels*, 19, 1679-1692.
- Perry, S. T. (1999). "A Global Free-Radical Mechanism for Nitrogen Release During Coal Devolatilization Based on Chemical Structure", Doctoral Thesis, Department of Chemical Engineering, Brigham Young University.
- Peters, B., Bruch, C. (2002). "Drying and pyrolysis of wood particles: experiments and simulation." In: *Journal Analytical and Applied Pyrolysis*, 00, 1-18.
- Prakash, C., Patankar S.V. (1985). "A control-volume-based-finite-element method for solving the Navier-Stokes equations using equal-order velocity-pressure interpolation." In: *Numerical Heat Transfer*, 8, 259-280.
- Radmanesh, R., Courbariaux, Y., Chaouki, J., Guy, C. (2006). "A unified lumped approach in kinetic modeling of biomass pyrolysis." In: *Fuel*, 85, 1211-1220.
- Ragland, K. W., Aerts, D. J. (1991). "Properties of Wood for Combustion Analysis." In *Bioresource Technology*, 37,161-168.
- Ragland, K. W.; Borman, G. L. (1998). "Combustion Engineering". McGraw-Hill, Usa.
- Raveendran, K., Ganesh, A., Khilar, K. C. (1996). "Pyrolysis characteristics of biomass and biomass components." In: *Fuel*, 75(8), 987-998.
- Rhie, C. M. and Chow, W. L.,A. (1983). "Numerical Study of the Turbulent Flow Past an Isolated Airfoil with Trailing Edge Separation." In: *AIAA J.*, 21, 1525.
- Rostami, A., Murthy, J., Hajaligol, Mohammad. (2004). "Modeling of smoldering process in a porous biomass fuel rod." In: *Fuel*, 83, 1527-1536.

- Rostami, A.A., Hajaligol, M.R., Wrenn, S.E. (2004). "A biomass pyrolysis sub-model for CFD applications." In: *Fuel*, 83, 1519-1525.
- Saabas, H. J., Baliga, B. R. (1994). "Co-Located Equal-Order Control-Volume Finite-Element Method For Multidimensional, Incompressible, Fluid Flow – Part I: Formulation," In: *Numerical Heat Transfer, Part B*, 26,381-407.
- Saastamoinen, J.J. (2004). "Modelling of Dynamics of Combustion of Biomass In Fluidized Beds." In: *Thermal Science*, 8(2), 107-126.
- Saastamoinen, J.J. (2006). "Simplified Model for Calculation of Devolatilization in Fluidized Beds." In: *Fuel*, 85, 2388-2395.
- Saastamoinen, J.J., Richard, J.R.. (1996). "Simultaneous Drying and Pyrolysis of Solid Fuel Particles." In: *Combustion and Flame*, 106, 288-300.
- Sheng, C., Azevedo, J. L. T. (2002). "Modeling the Evolution of Particle Morphology During Coal Devolatilization." In: *Proceedings of the Combustion Institute*, 28, 2225-2232.
- Sotirchos, S. V. and Amundson, N. R. (1984). "Diffusion and Reaction in a Char Particle and in the Surrounding Gas Phase. A continuous model." *Ind. Engng Chem. Fundam.* 23,191.
- Sportisee , B. (2000). "An analysis of operator splitting techniques in the stiff case." In: *Journal of Computational Physics*, 161, 140–168.
- Strang, G.. (1968). "On the construction and comparison of difference schemes." In: *SIAM J Numer Anal* 5:506-517.
- Thunman, H. (2002). *Combustion of Biomass – Nordic Course*. Department of Energy Conversion. Chalmers University of Technology. Lyngby, Danmark, 19-23.
- Thunman, H.; Leckner, B. (2002). "Thermal conductivity of wood—models for different stages of Combustion." In: *Biomass and Bioenergy*, 23, 47-54.
- Thunman, H.; Leckner, B.; Niklasson, F.; Johnsson, F. (2002). "Combustion of Wood Particles-A Particle Model For Eulerian Calculations." In: *Combustion and Flame*, 129, 30-46.
- Thunman, H.; Niklasson, F.; Johnsson, F.; Leckner, B. (2001). "Composition of Volatile Gases and Thermochemical Properties of Wood for Modeling of Fixed or Fluidized Beds." In: *Energy & Fuels*, 15, 1488-1497.
- Thunman, Henrik (2004), *BIOFUEL COMBUSTION*, Department of Energy Conversion, Chalmers University of Technology, Göteborg.

- Tillm, David A. (1991). "The Combustion of Solid Fuels and Waste." Academic Press, INC. San Diego, California.
- Turns, S. R. (2004). "An Introduction to Combustion", McGraw-Hill, USA.
- Ubayakar, S. K., Stickler, D., B., Von Roseburg, C., W. and Ganon, R., E. (1976). "Rapid Devolatilization of Pulverized Coal in Hot Combustion Gases." In: Symposium International on Combustion, 16, Cambridge, MA.
- Ulzama, S. (2007). "A Theoretical Analysis of Single Coal Particle Behavior during Spontaneous Devolatilization and Combustion", Dissertation, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Germany.
- Ushima, A. H. (1999). "Combustão de Sólidos", In: IPT - Curso De Combustão Industrial - AET.
- Veras, C. A. G. (1997). "Estudo Teórico dos Efeitos da Pressão e das Reações na Fase Gasosa na Queima de Combustíveis Sólidos Pulverizados", Tese de Doutorado, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.
- Versteeg, H. K., Malalasekera, W. (1995). "An introduction to Computational Fluid Dynamics", Londres, Editora Prentice Hall - Longman Group.
- Viskanta, R. (2005). "Combustion and Heat Transfer in Inert Porous Media." In: Handbook of Porous Media, 2^a ed, CRC Press: Taylor & Francis Group, Boca Raton.
- Voller, Vaughan R. (2009), "Basic Control Volume Finite Element Methods for Fluids and Solids", World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., USA.
- Wakao, N., e Kaguei, S. (1982). "Heat and Mass Transfer in Packed Beds", Gordon and Breach Science Publications, New York.
- Wang, F. Y., Bhatia, S. K. (2001). "A generalised dynamic model for char particle gasification with structure evolution and peripheral fragmentation." In: Chemical Engineering Science, 56, 3683-3697.
- Warnatz, J. Maas, U. Dibble, R. W. (2009). "Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation". 4th Edition, Springer, Germany.
- Webb, Stephen W e Ho, Clifford K. (2006). "Gas Transport in Porous Media", Springer, Netherlands.
- Wendt, C., Eigenbrod, C., Moriue, O., Rath H. J. (2002). "A Model for Devolatilization and Ignition of an Axisymmetric Coal Particle." In: Proceedings of the Combustion Institute, 29, 449-457.

- Westbrook, C.K. and Dryer, F.C. (1984). "Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion." In: *Progress in Energy and Combustion Science*, 10, 1-57
- Whitaker, S. (2005). "Coupled, Nonlinear Mass Transfer and Heterogeneous Reaction in Porous Media." In: *Handbook of Porous Media*, 2^a ed, CRC Press: Taylor & Francis Group, Boca Raton.
- Wicke, E., and Wurzbacher, G. (1962). "Konzentrationsprofile Vor Einer Im Sauerstoffstrom Verbrennenden Kohlenstoffoberfläche-I. Experimentelle Ergebnisse." In: *Int. J. Heat Mass Transfer*, 5, pp. 277-289.
- Wilke, C. R. (1949). *Ind. Eng. Chem.*, vol.41, p. 1345, apud Borman, G. L., Ragland, K. W., (1998). "Combustion Engineering". McGraw-Hill, Usa.
- Williams, A., Pourkashanian, M., Jones, J. M. (2000). "The Combustion of Coal and Some Other Solid Fuels." In: *Proceedings of the Combustion Institute*, 28, 2141-2162.
- Winter, F. (1995). "Single Fuel Particle and NO_x/NO – Emission Characteristics Under (Circulating) Fluidized Bed Combustor Conditions", Ph. D. Thesis, University of Technology, Vienna.
- Yanenko, N. N. (1971). "The method of fractional steps : the solution of problems of mathematical physics in several variables." In: Springer-Verlag.
- Yang, Y. B., Hampartsoumian, E., Gibbs, B. M. (1998). "The Effects of Temperature, Mixing and Volatile Release on NO Reduction Mechanisms by Coal Reburning." In: *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute*, 3009-3017.
- Zeng, D. (2005). "Effects of Pressure on Coal Pyrolysis at High Heating Rates and Char Combustion", Doctoral Thesis, Department of Chemical Engineering, Brigham Young University.
- Zhang, H. (2001). "Nitrogen Evolution and Soot Formation During Secondary Coal Pyrolysis", Doctoral Thesis, Department of Chemical Engineering, Brigham Young University.
- Zienkiewicz O. C., Taylor R. L., (2000), "Finite Elements Method, volume 3", Ed, McGraw-Hill, London.