

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE A REDAÇÃO FINAL
DA TESE DEFENDIDA POR Rubens Stuginski
Junior E APROVADA PELA
COMISSÃO JULGADORA EM 21 03 91

[Assinatura]
ORIENTADOR

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE TÉRMICA E DE FLUIDOS

ESTUDO COMPARATIVO DE MODELOS
PARA ARMAZENAMENTO DE CALOR
EM LEITOS FIXOS

70/91

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE TÉRMICA E DE FLUIDOS

Tese de Mestrado

**ESTUDO COMPARATIVO DE MODELOS
PARA ARMAZENAMENTO DE CALOR EM
LEITOS FIXOS**

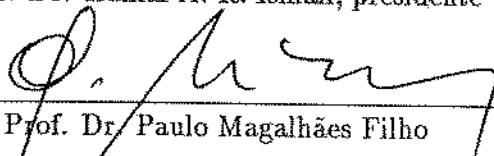
Autor: Rubens Stuginski Júnior

Orientador: Prof. Dr. Kamal A. R. Ismail

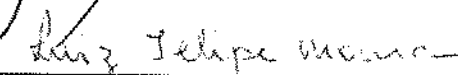
Aprovado por:



Prof. Dr. Kamal A. R. Ismail, presidente

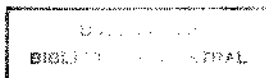


Prof. Dr. Paulo Magalhães Filho



Prof. Dr. Luís Felipe M. de Moura

Campinas, 21 de março de 1991.



Agradecimentos

Aos meu orientador e amigo Prof. Dr. Kamal A. R. Ismail, pelo tempo dedicado a minha orientação, durante a realização deste trabalho;

A equipe técnicas do Laboratório de Armazenadores Térmicos e Tubos de Calor;

Aos amigos e colegas da pós graduação pelos incentivos.

Este trabalho é dicado a
Bi
e
Pedro

Conteúdo

0	Nomenclatura	xi
1	Introdução	1
1.1	Introdução	1
2	Modelos Matemáticos de Armazenadores de Calor em Leitos Fixos	6
2.1	Introdução	6
2.2	Modelos de Fase Sólida Contínua	7
2.2.1	Modelo bidimensional	7
2.2.2	Modelo unidimensional	8
2.2.3	Modelo de Schumann	9
2.3	Modelo com Gradiente Térmico no Interior das Partículas	10
2.4	Modelos de Fase Única	11
2.4.1	Modelo bidimensional	11
2.4.2	Modelo unidimensional	12
3	Condições de Contorno e Avaliação dos Parâmetros	13
3.1	Condições Iniciais	13
3.2	Condições de Contorno	13
3.3	Avaliação dos Parâmetros	16
3.3.1	Estimativa da perda de carga em leitos fixos	16
3.3.2	Coefficiente de película fluido/partícula e fluido/parede	18
3.3.3	Coefficiente global de transferência de calor	24
3.3.4	Parâmetros de transporte	24

4	Métodos Numéricos	28
4.1	Modelos Adimensionalizados	29
4.1.1	Modelos de Fase Sólida Contínua	29
4.1.1.1	Modelo bidimensional	29
4.1.1.2	Modelo unidimensional	31
4.1.1.3	Modelo de Schumann	32
4.1.2	Modelo com Gradiente Térmico no Interior das Partículas	32
4.1.3	Modelos de Fase Única	33
4.1.3.1	Modelo bidimensional	33
4.1.3.2	Modelo unidimensional	34
4.2	Discretização das Equações	34
4.2.1	Considerações gerais	34
4.2.2	Modelos de Fase Sólida Contínua	35
4.2.2.1	Modelo bidimensional	35
4.2.2.2	Modelo unidimensional	51
4.2.2.3	Modelo de Schumann	53
4.2.3	Modelo com Gradiente Térmico no Interior das Partículas	55
4.2.4	Modelos de Fase Única	58
4.2.4.1	Modelo bidimensional	58
4.2.4.2	Modelo unidimensional	66
4.3	Avaliação do Calor Armazenado	67
5	Discussão dos Resultados	73
5.1	Avaliação dos Resultados Fornecidos pelos Modelos em Condições de Operação	74
5.1.1	Variação do diâmetro da partícula	75
5.1.2	Relação altura/diâmetro do leito (β)	82
5.1.3	Variação do fluxo mássico	84
5.1.4	Fluido de trabalho	91
5.1.5	Material de armazenamento	92
5.1.6	Variação da temperatura de entrada	94
5.1.7	Perda de calor pelas paredes do armazenador	99
5.1.8	Efeito da fração de vazios (ϵ)	105

6	Projeto de Uma Unidade Armazenadora de Calor	109
6.1	Introdução	109
6.2	Exemplo Numérico	111
6.2.1	Discussão dos resultados obtidos através da simulação numérica do armazenador	114
7	Conclusão	124
0	Bibliografia	126
0.0	Bibliografia Citada no Texto	126
0.0	Bibliografia Adicional	130

Lista de Figuras

1.1	Esquema típico de montagem de um armazenador de calor.	5
3.1	Condições de contorno do armazenador.	15
3.2	Valores de números de Nusselt fornecidos por diversas correlações, $Pr = 0,7$, $\epsilon = 0,4$	21
3.3	Valores de números de Nusselt fornecidos por diversas correlações, $Pr = 3,5$, $\epsilon = 0,4$	22
3.4	Valores de números de Nusselt fornecidos por diversas correlações, $Pr = 7$, $\epsilon = 0,4$	23
3.5	Mecânismo de troca de calor em um leito fixo.	25
4.1	Célula para cálculo do calor armazenado usando modelos unidimensionais. .	68
4.2	Célula para cálculo do calor armazenado usando modelos bidimensionais. .	70
4.3	Volume de controle para modelo com gradiente térmico no interior da partícula.	71
5.1	Modelos de fase única uni e bidimensional. Fluido de trabalho: água. Material: pedra. $d_p = 25$ mm.	77
5.2	Modelo com gradiente térmico no interior das partículas. Fluido de trabalho: água. Material: pedra. $d_p = 25$ mm.	78
5.3	Variação do calor armazenado com o diâmetro da partícula. Modelo: fase única unidimensional.	79
5.4	Variação do calor armazenado com o diâmetro da partícula. Modelo: fase sólida contínua bidimensional.	80
5.5	Variação do calor armazenado com o diâmetro da partícula. Modelo: gradiente térmico no interior das partículas.	81

5.6	Comparação entre o calor armazenado para diversos β . Modelo: Schumann. Fluido de trabalho: água. Material: pedra.	82
5.7	Comparação entre o calor armazenado para diversos β . Modelo: gradiente térmico no interior da partícula. Fluido de trabalho: água. Material: pedra.	83
5.8	Variação do calor armazenado e da temperatura de saída do fluido, devido a variação do fluxo mássico na entrada do armazenador. Modelo: fase sólida contínua bidimensional.	85
5.9	Variação do calor armazenado e da temperatura de saída do fluido, devido a variação do fluxo mássico na entrada do armazenador. Modelo: fase única unidimensional.	86
5.10	Variação do calor armazenado e da temperatura de saída do fluido, devido a variação do fluxo mássico na entrada do armazenador. Modelo: gradiente térmico no interior das partículas.	87
5.11	Variação do calor armazenado e da temperatura de saída do fluido, devido a variação do fluxo mássico na entrada do armazenador. Modelo: fase sólida contínua bidimensional.	88
5.12	Variação do calor armazenado e da temperatura de saída do fluido, devido a variação do fluxo mássico na entrada do armazenador. Modelo: fase única unidimensional.	89
5.13	Variação do calor armazenado e da temperatura de saída do fluido, devido a variação do fluxo mássico na entrada do armazenador. Modelo: gradiente térmico no interior das partículas.	90
5.14	Comparação entre o calor armazenado para um armazenador operando com ar e água. Modelo: gradiente térmico no interior da partícula.	91
5.15	Influência do material de armazenamento no desempenho do armazenador. Modelo: fase sólida contínua bidimensional.	92
5.16	Influência do material de armazenamento no desempenho do armazenador. Modelo: fase única bidimensional.	93
5.17	Efeito da variação da temperatura de entrada na temperatura de saída do fluido do armazenador. Modelo: todos.	95
5.18	Efeito da variação da temperatura de entrada na temperatura de saída do fluido do armazenador. Modelo: todos.	96
5.19	Efeito da variação da temperatura de entrada na temperatura de saída do fluido do armazenador. Modelo: todos.	97

5.20	Efeito da variação da temperatura de entrada na temperatura de saída do fluido do armazenador. Modelo: todos.	98
5.21	Efeito da perda de calor pelas paredes no calor armazenado. Modelo: fase sólida contínua bidimensional.	100
5.22	Efeito da perda de calor pelas paredes no calor armazenado. Modelo: fase única unidimensional.	101
5.23	Efeito da perda de calor pelas paredes no calor armazenado. Modelo: gradiente térmico no interior das partículas.	102
5.24	Efeito da perda de calor pelas paredes no calor armazenado. Modelo: fase única bidimensional.	103
5.25	Efeito da perda de calor pelas paredes no calor armazenado. Modelo: gradiente térmico no interior das partículas.	104
5.26	Efeito da variação da fração de vazios (ϵ) no calor armazenado.	106
5.27	Efeito da variação da fração de vazios (ϵ) no calor armazenado.	107
5.28	Efeito da variação da fração de vazios (ϵ) no calor armazenado.	108
6.1	Histórico temporal da temperatura do fluido fornecido pela fonte.	112
6.2	Variação da temperatura de saída do fluido em função da variação da temperatura de entrada. Modelo: Schumann.	115
6.3	Comparação entre a energia necessária para manter o fluido a 75°C sem armazenador e com armazenador. Modelo: Schumann.	116
6.4	Comparação entre a potência necessária para manter o fluido a 75°C sem armazenador e com armazenador. Modelo: Schumann.	117
6.5	Variação da temperatura de saída do fluido em função da variação da temperatura de entrada.	119
6.6	Comparação entre a energia necessária para manter o fluido a 75°C sem armazenador e com armazenador.	120
6.7	Comparação entre a potência necessária para manter o fluido a 75°C sem armazenador e com armazenador.	121
6.8	Comparação entre as temperaturas de saída do fluido, para diversas relações β . Modelo: Schuman.	122
6.9	Comparação entre as temperaturas de saída do fluido, para diversas relações β . Modelo: gradiente térmico no interior das partículas.	123

Lista de Tabelas

3.1	Fator de forma para alguns materiais.	17
3.2	Fração de vazios para partículas esféricas.	18
3.3	Fração de vazios para diversos materiais com empacotamento randômico e geometria variada.	18
4.1	Coeficientes do sistema de equações. Fase fluida. Direção: axial. Modelo: Fase Sólida Contínua Bidimensional.	39
4.2	Coeficientes do sistema de equações. Fase fluida. Direção: radial. Modelo: Fase Sólida Contínua Bidimensional.	43
4.3	Coeficientes do sistema de equações. Fase: sólida. Direção: axial. Modelo de Fase Sólida Contínua Bidimensional.	46
4.4	Coeficientes do sistema de equações. Fase: sólida. Direção: radial. Modelo de Fase Sólida Contínua Bidimensional.	50
4.5	Coeficientes do sistema de equações. Fase: fluida. Modelo: Fase Sólida Contínua Unidimensional.	52
4.6	Coeficientes do sistema de equações. Fase: sólida. Modelo: Fase Sólida Contínua Unidimensional.	53
4.7	Coeficientes do sistema de equações. Fase: fluida. Modelo: Schumann.	54
4.8	Coeficientes do sistema de equações. Fase: fluida. Modelo: Gradiente Térmico no Interior da Partícula.	56
4.9	Coeficientes do sistema de equações. Fase: sólida. Modelo: Gradiente Térmico no Interior da Partícula.	57
4.10	Coeficientes do sistema de equações. Direção: axial. Modelo: Fase Única Bidimensional.	62
4.11	Coeficientes do sistema de equações. Direção: radial. Modelo: Fase Única Bidimensional.	66

4.12	Coefficientes do sistema de equações. Modelo: Fase Única Unidimensional. .	67
5.1	Propriedades dos materiais e fluidos usados nas simulações.	73
5.2	Tempo de CPU para os programas dos diversos modelos usados na simulação.	74
6.1	Propriedades do fluido e do sólido.	111
6.2	Perda de carga no leito.	113
6.3	Energia necessária para aquecimento.	118

Nomeclatura

Letras Latinas

A_0	Área da secção transversal do leito.
a_p	Área superficial de partícula por unidade de volume do leito $= 3(1 - \epsilon)/\bar{n}_0$, para partículas esféricas.
a_w	Área superficial do armazenador por unidade de volume do leito.
Bi_{ef}	Número de Biot baseado na condutividade térmica efetiva e no raio do armazenador.
Bi_p	Número de Biot baseado no raio da partícula.
Bi_r	Número de Biot baseado no raio do armazenador.
C_f	Calor específico do fluido.
C_{ef}	Calor específico efetivo da mistura sólido/fluido, usada nos modelos de fase única.
C_f^{ef}	Calor específico efetivo do fluido.
C_s	Calor específico do sólido.
C_s^{ef}	Calor específico efetivo do sólido.
G	Velocidade mássica superficial.
h_p	Coefficiente de película fluido/partícula.
h_w	Coefficiente de película fluido/parede.
i	Posição axial de um nó.
i_{\max}	Número máximo de nós na direção axial.
j	Posição radial de um nó.
j_{\max}	Número máximo de nós na direção radial.
k_{efx}	Condutividade térmica efetiva para modelos de fase única na direção axial.
k_{efr}	Condutividade térmica efetiva para modelos de fase única na direção radial.
k_f	Condutividade térmica molecular do fluido.
k_{fr}	Condutividade térmica efetiva radial do fluido.
k_{fx}	Condutividade térmica efetiva axial do fluido.

k_s	Condutividade térmica molecular do sólido.
k_{sr}	Condutividade térmica efetiva radial do sólido.
k_{sx}	Condutividade térmica efetiva axial do sólido.
L	Comprimento do armazenador.
l	Posição radial de um nó no interior da partícula.
l_{\max}	Número máximo de nós radiais no interior da partícula.
m	Parâmetro adimensional para cálculo da condutividade térmica efetiva.
\dot{m}_f	Vazão mássica.
Nu	Número de Nusselt.
Nu_p	Número de Nusselt modificado.
Pe_x	Número de Peclet efetivo baseado no comprimento do armazenador.
Pe_r	Número de Peclet efetivo baseado no raio do armazenador.
Pe_{fx}	Número de Peclet efetivo baseado no comprimento do armazenador, usando em modelos de fase única.
Pe_{fr}	Número de Peclet efetivo baseado no raio do armazenador, usando em modelos de fase única.
Pr	Número de Prandlt.
Re	Número de Reynolds.
Re_p	Número de Reynolds modificado.
q_i	Calor armazenado no elemento i .
q_{\max}	Máximo calor possível de ser armazenado no leito.
q_p	Calor armazenado numa partícula.
\bar{r}	Coordenada dimensional radial do armazenador.
\bar{r}_0	Raio do armazenador.
T	Temperatura adimensional da fase fluida para modelos de fase sólida contínua.
\bar{T}	Temperatura dimensional da fase fluida para modelos de fase sólida contínua.
\bar{T}_0	Temperatura dimensional ambiente e/ou temperatura inicial do armazenador.

\bar{T}_i	Temperatura dimensional de entrada do fluido no armazenador.
\bar{T}_w	Temperatura dimensional da parede do armazenador.
$T(\bar{x}, \bar{r}, t)$	Função que descreve a variação temporal da temperatura na entrada do armazenador.
U_w	Coefficiente global de transferência de calor fluido/ambiente.
V_∞	Velocidade intersticial.
\bar{x}	Coordenada dimensional axial do armazenador.

Letras Gregas

β	Razão altura/diâmetro do leito.
β_0	Relação $(L/\bar{r}_0)^2$.
β_1	Relação $(L/\bar{\eta}_0)^2$.
θ	Temperatura adimensional da fase sólido para modelos de fase sólida contínua.
$\bar{\theta}$	Temperatura dimensional da fase sólido para modelos de fase sólida contínua.
ϕ	Temperatura adimensional para modelos de fase única.
$\bar{\phi}$	Temperatura dimensional para modelos de fase única.
ϑ	Temperatura adimensional da partícula para modelo com gradiente térmico no interior da partícula.
$\bar{\vartheta}$	Temperatura dimensional da partícula para modelo com gradiente térmico no interior da partícula.
$\bar{\eta}$	Coordenada dimensional radial da partícula.
$\bar{\eta}_0$	Raio da partícula.
$\Delta\eta$	Elemento adimensional infinitesimal radial da partícula.
Δr	Elemento adimensional infinitesimal radial do armazenador.
$\Delta\tau$	Elemento adimensional infinitesimal temporal.
Δx	Elemento adimensional infinitesimal axial do armazenador.
ΔT	Diferença de temperatura.
Δt	Intervalo de tempo.
Γ	Parâmetro adimensional de transferência de calor fluido/partícula.
Γ_w	Parâmetro adimensional de transferência de calor fluido/ambiente.
ρ_f	Massa específica do fluido.
ρ_{ef}	Massa específica efetiva da mistura sólido/fluido, usada nos modelos de fase única.
ρ_f^{ef}	Massa específica efetiva do fluido.
ρ_s	Massa específica do sólido.
ρ_s^{ef}	Massa específica efetiva do sólido.
λ	Relação entre as capacidades térmicas volumétricas do fluido e do sólido.
ϵ	Fração de vazios.

Abstract

This work presents comparative results of a numerical investigation of four possible models for the prediction of thermal performance of fixed bed storage units and their thermal design. These models includes Schumann's model, the radial dispersion model, a model that include both axial heat conduction in the fluid phase and admits thermal gradient in the solids particles and finally a two dimensional single phase model. For each of these models a computer code was written and tested to evaluate the computing time for same data and analyze any other computational problems. The tests of thermal performance included particle size, porosity, particle material, flow rate, inlet temperature and heat losses from tank walls and extremities. Dynamics behaviour of the storage units due to transient variation in either flow rate or inlet temperature was also investigated. The results presented include temperature gradients, pressure drop and heat storage. The results obtained are very useful for analysis and design of fixed bed storage units.

Sumário

Este trabalho apresenta resultados comparativos de uma investigação numérica de quatro possíveis modelos de predição de desempenho térmico de armazenadores de leito fixo e seu projeto térmico. Estes modelos incluem o modelo de Schumann, o modelo com dispersão radial, um modelo que inclui a condução de calor axial e o gradiente térmico no interior das partículas e finalmente o modelo de fase única uni e bidimensional. Para cada um dos modelos foram escritos e testados programas computacionais para avaliar o tempo de processamento para o mesmo conjunto de dados. Os testes de desempenho térmico incluem os efeitos do diâmetro das partículas, porosidade, material da partícula, fluxo mássico, temperatura de entrada e perda de calor pelas paredes do tanque. O comportamento dinâmico da unidade de armazenamento devido a variações transientes em seu fluxo mássico e na temperatura de entrada foram também investigadas. Os resultados apresentados incluem gradiente de temperatura, perda de carga e calor armazenado. Os resultados obtidos são importantes para análise e projeto de unidades de armazenamento térmico em leitos fixos.

Capítulo 1

Introdução

1.1 Introdução

Em diversos processos térmicos a geração da energia não coincide temporalmente com sua utilização, devendo então, ser providenciado algum sistema de armazenamento térmico para que o processo não sofra descontinuidades. Isto é bastante evidente em sistemas de recuperação de calor e em sistemas solares. Entre os sistemas que podem ser usados para armazenar a energia térmica gerada encontram-se os **armazenadores de leitos fixos**.

Em geral, os armazenadores de calor de leito fixo recebem calor durante seu ciclo de carregamento, através de um fluido quente que entrega calor às partículas do armazenador. Durante o ciclo de descarregamento, o fluido frio escoar pelo seu interior retirando o calor armazenado. Deve-se salientar, que esse mesmo tipo de armazenador pode funcionar armazenando calor em baixas temperaturas (*armazenamento de frio*), porém neste caso específico, estamos interessados no armazenamento de calor em média e altas temperaturas. Durante o processo de carregamento, a temperatura de entrada do fluido, bem como sua vazão mássica, podem variar. Em sistemas solares a temperatura de entrada do fluido varia com o tempo e em sistemas de recuperação de calor podemos ter, além da variação da temperatura do fluido, a variação do seu fluxo mássico.

Durante o ciclo de descarregamento essas mesmas variações podem ocorrer. Além disso durante o ciclo de descarregamento existe uma degradação da energia térmica armazenada, devido a difusão térmica através do gradiente térmico que é formado ao longo do leito.

A avaliação do desempenho térmico do armazenador é realizada a partir da determinação da resposta transiente do leito fixo, quando escoar através dele um fluido com

temperatura e fluxo mássico variando com o tempo.

O estudo de escoamento e transferência de calor e massa em leitos fixos tem aplicação em diversos processos industriais, comerciais e domésticos. Entre as aplicações industriais pode-se destacar o uso de leitos fixos em reatores químicos e entre as aplicações comerciais e domésticas destacam-se o uso de leitos fixos em armazenadores de calor. Um grande número de análises foram realizadas para reatores químicos usando modelo unidimensional para cálculo da distribuição da temperatura e da concentração de espécies químicas. Trabalhos que enfocam leitos fixos utilizados como armazenadores de calor foram realizados só recentemente.

Os modelos de armazenadores de leitos fixos de fase única assumem que a temperatura instantânea do fluido e do sólido são iguais, enquanto que os modelos bifásicos assumem que existe diferença entre a temperatura do fluido e do sólido, com transferência de calor inter-fase através de um coeficiente de película fluido/partícula. A grande maioria dos trabalhos de armazenadores de calor em leitos fixos usam o modelo proposto originalmente por Schumann [32] que consiste em um modelo bifásico, unidimensional e transiente, com condições de contorno simples, onde o termo de variação da energia armazenada no fluido é desprezado através da análise de grandeza. Com este modelo é possível prever a distribuição axial e temporal da temperatura do fluido e do sólido, incorporando o coeficiente de película como parâmetro de acoplamento entre as equações da fase fluida e da fase sólida.

Algumas análises tem sido realizadas levando em conta o efeito de duas e/ou três dimensões espaciais. Martin [23] divide um leito cilíndrico em duas regiões distintas, uma perto da parede onde a fração de vazios é mais alta que a outra região localizada mais no centro do leito. Martin calcula o coeficiente de película médio fluido/parede a partir de uma distribuição radial de fração de vazios assumida. Gross et alii [13] usa os resultados obtidos por Martin para predição numérica da distribuição da temperatura num leito fixo. O método numérico utilizado por ele se comporta muito bem para sistemas onde o fluido de trabalho é um líquido, porém não dá bons resultados para sistemas com fluidos de trabalho gasosos. Beasley e Clark [3] encontrou tempos de computação bastante altos quando a relação entre os calores específicos sólido/fluido é grande, usando o método numérico proposto por Gross et alii [13].

Handley e Hegg [16], usando o modelo de Schumann modificado para incluir gradiente térmico no interior das partículas que compõe o leito, usaram o método de Crank-Nicholson implícito para resolver numericamente as equações usando gás como fluido de trabalho.

Beasley e Clark [3] resolveram o mesmo problema incluindo o efeito da parede do leito.

Furnas [9, 10] realizou experimentos usando esferas de aço com diâmetros de 1,85, 3,87 e 4,86 cm para determinar o coeficiente de transferência de calor fluido/sólido. Foi usado ar como fluido de trabalho. Ele encontrou expressões para o coeficiente de película que mostram que o coeficiente de troca de calor fluido/sólido, por unidade de área superficial da partícula é praticamente independente do diâmetro da partícula.

Gunn [14] mostra uma análise do efeito da dispersão térmica radial e axial no leito. Os dados experimentais foram obtidos aquecendo-se as paredes do leito.

Vortmeyer e Schaefer [36] mostra que o modelo de fase única pode ser formalmente derivado do modelo de fase sólida contínua, sem que haja necessidade de se assumir que as temperaturas instantâneas do fluido e do sólido sejam iguais. Usando esses resultados, Vortmeyer e Adam [35] determina a dispersão térmica efetiva axial para leitos fixos como função do número de Reynolds e do número de Peclet.

Persons et alii [27] usam o programa TRNSYS para simular um leito fixo, usando o modelo de Schuman, e comparam os resultados obtidos experimentalmente com os resultados da simulação, indicando que a predição numérica produz bons resultados.

Melanson e Dixon [24] realizaram medidas experimentais em leito fixos estagnantes com baixa relação diâmetro do tubo e diâmetro da partícula para obterem a condutividade térmica efetiva e o coeficiente de transferência de calor na parede. Os resultados mostram que a forma das partículas tem influência relativamente pequena nesses parâmetros.

Hollands et alii [17] determina experimentalmente a magnitude da variação do perfil radial de velocidade do fluido (ar) em um leito fixo, e usando esse resultados realiza uma estimativa teórica da influência dessa variação de velocidade na performance térmica do sistema.

Courtier e Faber [6] usaram o método explícito para simular o leito fixo usando o modelo de Schumann. Apresentam os resultados em forma de curvas e determinam experimentalmente o coeficiente de transferência de calor volumétrico fluido/sólido, usando um armazenador de pedras e ar como fluido de trabalho. Os resultados apresentados são bons para projetos de armazenadores de calor de leito fixo onde o fluido de trabalho é ar.

Raiz [28] apresenta solução analítica para leitos fixos usando o modelo de Schumann e o modelo de fase única unidimensional.

Sowell e Curry [33] modelam um armazenador de calor em leito fixo usando o modelo de Schumann de forma que se possa ter fluido escoando em qualquer direção e temperatura de entrada com variação arbitrária. A temperatura de saída do fluido é obtida pela

soma das temperatura de entrada multiplicada por um *fator de resposta*. Este modelo foi implementado em programas computacionais através da utilização do programa TRNSYS. O modelo é unidimensional e fornece um sistema de duas equações diferenciais ordinárias que devem ser resolvidas simultaneamente.

Littman et alii [19] determinou o coeficiente de película fluido/partícula para Reynolds na faixa de 2 a 100 e partículas com diâmetros de 0,0198 a 0,080 polegadas.

Gupta et alii [15] usando dados experimentais de outros autores calcula, através de regressão, uma expressão para número de Nusselt partícula/fluido, válida, tanto para leitos fixos, como para leitos fluidizados, com número de Reynolds variando de 10 a 10^4 .

Maaliou e McCoy [20] propõe um método para otimização econômica de armazenadores de calor em leitos fixos cilíndricos com esferas sólidas. O valor econômico da energia térmica armazenada é maximizada com relação ao custo do equipamento e custo de operação. O modelo matemático usado para determinar os perfis de temperatura transiente no leito leva em consideração o gradiente térmico no interior das partículas, a dispersão axial e perdas para o ambiente.

O objetivo deste trabalho é comparar seis possíveis modelos para armazenadores de leito fixo. Os modelos utilizados na comparação são: o modelo da fase sólida contínua bidimensional, o modelo da fase sólida contínua unidimensional, o modelo de Schumann, o modelo de fase única bidimensional, o modelo da fase única unidimensional e o modelo com gradiente térmico no interior das partículas.

A comparação é feita a partir de dados obtidos por simulação numérica em computadores. O esquema de operação do armazenador está mostrado na figura (1.1). Os resultados obtidos podem ser utilizados no projeto e análise térmica de armazenadores de leito fixo operando com água ou ar como fluido de trabalho.

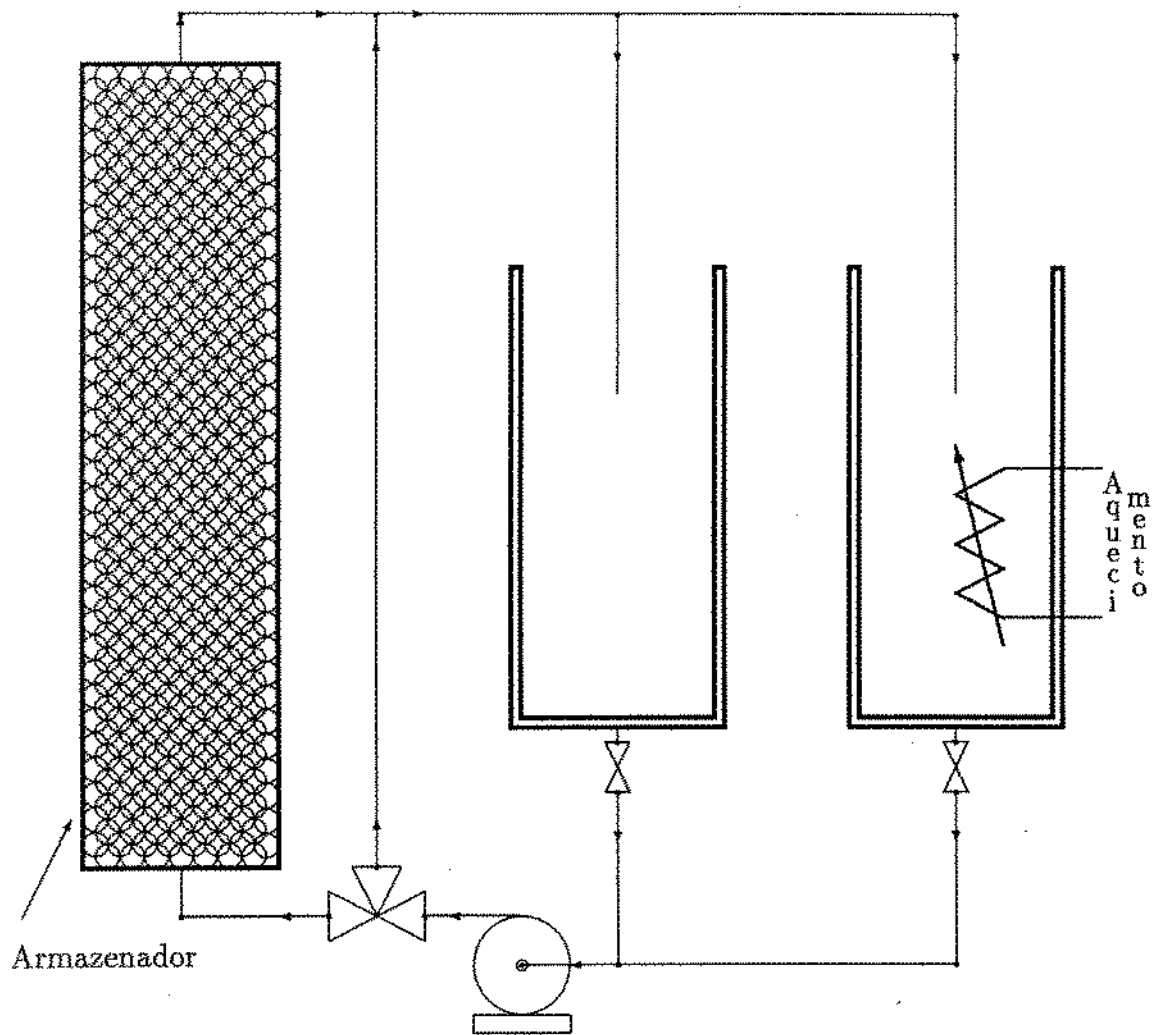


Figura 1.1: Esquema típico de montagem de um armazenador de calor.

Capítulo 2

Modelos Matemáticos de Armazenadores de Calor em Leitos Fixos

2.1 Introdução

O modelamento de armazenadores de calor em leitos fixos podem ser divididos em dois grandes grupos. No primeiro grupo temos os modelos que consideram que a temperatura instantânea da fase sólida e a da fase fluida são iguais, assim chamados *modelos de fase única*. A transferência de calor, nesses modelos, pode ser analisada usando-se modelos unidimensionais ou bidimensionais, conforme a necessidade.

No segundo grupo temos os modelos que analisam o leito fixo a partir das duas fases distintas, uma sólida e outra fluida, assim chamados *modelos bifásicos*. Existem três modelos propostos para descrever o fenômeno de transferência de calor em leitos fixos bifásicos em regime transiente, são eles: o modelo de Schumann [32], o modelo da Fase Sólida Contínua uni e bidimensional [8] e o modelo com Gradiente Térmico no interior das partículas ou modelo com Dispersão Concêntrica [29].

O modelo de Schumann é o mais simples dos três e pode ser derivado do modelo de fase sólida contínua, bastando para isso realizarmos certas considerações, como será exposto mais adiante. Ele é construído assumindo-se que o escoamento no leito é do tipo *slug flow* e que não existe resistência à condução de calor no sólido. Neste modelo a condução de calor é tratada de forma unidimensional.

Nos modelos de Fase Sólida Contínua, a condução de calor no sólido é considerada, porém o sólido é tratado como contínuo e não formado por partículas. Este modelo admite que o tratamento da condução de calor possa ser feito de forma uni ou bidimensional.

O modelo da Dispersão Concêntrica é o mais complexo de todos os três. Neste modelo é considerado que existem um perfil de temperatura em cada partícula e ela é distribuída de forma simétrica em relação ao seu centro geométrico. A condução de calor, tanto no fluido como no leito de partículas, pode ser tratada uni ou bidimensionalmente. O escoamento do fluido é do tipo *slug flow*.

Em todos os modelos as partículas são consideradas esféricas.

2.2 Modelos de Fase Sólida Contínua

Neste modelo é assumido que o sólido se comporta como se formasse uma fase contínua e não composto por partículas independentes. Assim a transferência de calor no sólido ocorre por condução, tanto na direção axial como na direção radial do leito. Também no fluido, a transferência de calor ocorre por condução axial e/ou radial.

2.2.1 Modelo bidimensional

Nesse modelo é assumindo que:

1. a geometria do leito é cilíndrica;
2. as propriedades de transporte do fluido e do sólido não dependem da temperatura;
3. o escoamento é do tipo *slug flow*, incompressível e ocorre na direção axial do leito;
4. não existe gradiente térmico nas partículas que compõem o leito;
5. não há geração interna de calor;
6. a troca de calor por radiação é desprezível;
7. existe de calor para o ambiente.

Feitas essas considerações, a equação da energia, por unidade de volume do leito, para o fluido e para o sólido são escritas como:

• para o fluido:

$$\epsilon \rho_f C_f \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + V_\infty \frac{\partial \bar{T}}{\partial x} \right) = k_{fx} \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x^2} + k_{fr} \left[\frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{T}}{\partial r} \right] + h_p a_p (\bar{\theta} - \bar{T}) \quad (2.1)$$

• para o sólido:

$$(1 - \epsilon) \rho_s C_s \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} = k_{sx} \frac{\partial^2 \bar{\theta}}{\partial x^2} + k_{sr} \left[\frac{\partial^2 \bar{\theta}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial r} \right] + h_p a_p (\bar{T} - \bar{\theta}) \quad (2.2)$$

O termo do lado esquerdo da equação da fase fluida representa a soma da variação temporal da entalpia mais a fluxo de entalpia líquida do fluido presente no volume de controle. O primeiro termo do lado direito representa o calor trocado por condução na direção axial do volume de controle. O segundo termo representa o calor trocado por condução na direção radial do volume de controle. O terceiro termo representa a troca de calor por convecção entre as partículas e o fluido.

O termo do lado esquerdo da equação da fase sólida representa a variação temporal da entalpia no sólido presente no volume de controle. O primeiro termo do lado direito representa o calor trocado por condução axial no volume de controle. O segundo termo representa o calor trocado por condução radial no volume de controle. O terceiro termo representa a troca de calor por convecção entre as partículas e o fluido.

2.2.2 Modelo unidimensional

Primeiramente vamos assumir que em ambas as fases a condução de calor ocorre preferencialmente na direção axial, sendo desprezível o calor conduzido radialmente e além disso, assumindo que:

1. a geometria do leito é cilíndrica;
2. as propriedades de transporte do fluido e do sólido não dependem da temperatura;
3. o escoamento é do tipo *slug flow*, incompressível e ocorre na direção axial do leito;
4. existe perda de calor para o ambiente;
5. o sólido se comporta como se fosse contínuo;
6. não existe condução de calor na direção radial do leito;

7. não há geração interna de calor;
8. a troca de calor por radiação é desprezível.

Assim, a equação da energia para o fluido e para o sólido podem ser escritas como:

• para o fluido:

$$\epsilon \rho_f C_f \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + V_\infty \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{x}} \right) = k_{fx} \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \bar{x}^2} + h_p a_p (\bar{\theta} - \bar{T}) - U_w a_w (\bar{T} - \bar{T}_0) \quad (2.3)$$

• para o sólido:

$$(1 - \epsilon) \rho_s C_s \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} = k_{sx} \frac{\partial^2 \bar{\theta}}{\partial \bar{x}^2} + h_p a_p (\bar{T} - \bar{\theta}) \quad (2.4)$$

2.2.3 Modelo de Schumann

Esta modelagem simples de leitos fixos foi desenvolvida inicialmente por Schumann [32]. Este é um modelo unidimensional no qual o balanço de energia é efetuado nas duas fases, fluida e sólida, fornecendo assim, um sistema de equações diferenciais que devem ser resolvidas simultaneamente.

Para a formulação deste modelo de leito fixo são feitas as seguintes considerações:

1. a geometria do leito é cilíndrica;
2. as propriedades de transporte não dependem da temperatura;
3. o escoamento é do tipo *slug flow*, incompressível e ocorre na direção axial do leito;
4. existe perda de calor para o ambiente;
5. não existe gradiente térmico nas partículas que compem o leito;
6. não existe condução de calor na direção radial;
7. não há condução de calor no fluido;
8. não há troca de calor entre as partículas.

Com essas considerações a equação da energia para o fluido e para o sólido ficam, respectivamente:

• para o fluido:

$$\epsilon \rho_f C_f \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + V_\infty \frac{\partial \bar{T}}{\partial x} \right) = h_p a_p (\bar{\theta} - \bar{T}) - U_w a_w (\bar{T} - \bar{T}_0) \quad (2.5)$$

• para o sólido:

$$(1 - \epsilon) \rho_s C_s \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} = h_p a_p (\bar{T} - \bar{\theta}) \quad (2.6)$$

2.3 Modelo com Gradiente Térmico no Interior das Partículas

O Modelo com gradiente térmico no interior das partículas considera a distribuição de temperatura no interior das partículas. Uma vez que não se considera que existe troca de calor inter-partículas, o gradiente de temperatura na superfície das partículas que compõe o leito, será devido somente à troca de calor entre o fluido e leito. Desta maneira, deve ser incluído na equação da energia do fluido, um termo que leve em consideração esse fenômeno. Segundo [37], a condução de calor na fase sólida, em regime transiente, é importante quando se tem um fluido escoando através do leito.

A formulação matemática deste modelo é feita considerando:

1. a geometria do leito é cilíndrica;
2. as propriedades de transporte do fluido e do sólido não dependem da temperatura;
3. o escoamento é unidimensional, incompressível e ocorre na direção axial do leito;
4. existe perda de calor para o ambiente;
5. existe gradiente térmico nas partículas que compõem o leito;
6. não existe condução de calor na direção radial do leito;
7. não há troca de calor entre as partículas.
8. não há geração interna de calor.

Com essas considerações a equação da energia para o fluido e para o sólido ficam, respectivamente:

• para o fluido:

$$\epsilon \rho_f C_f \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + V_\infty \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{x}} \right) = k_{fx} \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \bar{x}^2} + h_p a_p (\bar{\vartheta}|_{(\bar{\eta}=\bar{\eta}_0)} - \bar{T}) - U_w a_w (\bar{T} - \bar{T}_0) \quad (2.7)$$

• para o sólido:

$$\rho_s C_s \frac{\partial \bar{\vartheta}}{\partial t} = k_s \left[\frac{\partial^2 \bar{\vartheta}}{\partial \bar{\eta}^2} + \frac{2}{\bar{\eta}} \frac{\partial \bar{\vartheta}}{\partial \bar{\eta}} \right] \quad (2.8)$$

2.4 Modelos de Fase Única

Os modelos de fase única podem ser derivados dos modelos bifásicos. Vortmeyer e Schaefer [36] demonstraram que existe uma equivalência entre os modelos unifásicos e bifásicos.

Os modelos unifásicos se prestam para analisar leitos com capacidade e condutividade térmica do sólido muito maiores que as do fluido. Devido a essas duas características a temperatura instantânea da fase sólida e da fase fluida são iguais ponto a ponto.

Para realizarmos a formulação do leito usando modelo de fase única devemos assumir, além do exposto acima, que:

1. a geometria do leito é cilíndrica;
2. as propriedades de transporte do fluido e do sólido não dependem da temperatura;
3. o escoamento é do tipo *slug flow*, incompressível e ocorre na direção axial do leito;
4. existe perdas de calor para o ambiente;
5. não há geração interna de calor.

2.4.1 Modelo bidimensional

O modelo bidimensional é escrito assumindo que há condução de calor na direção radial, assim:

$$[(1 - \epsilon) \rho_s C_s + \epsilon \rho_f C_s] \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} + G C_f \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \bar{x}} = k_{efx} \frac{\partial^2 \bar{\phi}}{\partial \bar{x}^2} + k_{efr} \left[\frac{\partial^2 \bar{\phi}}{\partial \bar{r}^2} + \frac{1}{\bar{r}} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \bar{r}} \right] \quad (2.9)$$

2.4.2 Modelo unidimensional

Na formulação do modelo de fase única unidimensional, assumido que não existe gradiente térmico na direção radial do leito, podemos escrever:

$$[(1 - \epsilon) \rho_s C_s + \epsilon \rho_f C_f] \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} + G C_f \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} = k_{efx} \frac{\partial^2 \bar{\phi}}{\partial x^2} - U_w a_w (\bar{\phi} - \bar{T}_0) \quad (2.10)$$

Capítulo 3

Condições de Contorno e Avaliação dos Parâmetros

3.1 Condições Iniciais

A solução dos modelos de uma e/ou duas fases requerem condições de contorno e condições iniciais apropriadas. A condição inicial, para todos os modelos, pode ser determinada pelas condições de operação do armazenador. Inicialmente circula pelo armazenador um fluido com a mesma temperatura que o ambiente (\bar{T}_0), mantendo assim o leito em equilíbrio térmico com o ambiente. Num certo instante convencionado como instante zero, é aplicado ao fluido um degrau de temperatura e o fluido passa a ter uma temperatura $T_i > \bar{T}_0$, iniciando assim o processo de carregamento térmico do armazenador.

Quando o leito está carregado termicamente, a condição inicial para o descarregamento térmico é definida pelo perfil interno de temperatura que o armazenador possui e pela nova temperatura que o fluido passará a ter na entrada do armazenador.

3.2 Condições de Contorno

As condições de contorno para todos os modelos são fisicamente iguais. Isto é importante, pois quando comparamos os modelos, as condições de contorno e inicial devem ser as mesmas.

Na entrada do armazenador, num certo tempo convencionado como tempo zero ($t = 0$), é imposto um degrau de temperatura $T_i^n \neq \bar{T}_0$. Assim, a condição de contorno para o

fluido na entrada do armazenador será [7, 19, 29, 30, 36]:

$$T_i^n = T(\bar{x}, \bar{r}, t) \quad \text{para } \bar{x} = 0, \quad 0 \leq \bar{r} \leq \bar{r}_0, \quad t > 0 \quad (3.1)$$

onde $T(\bar{x}, \bar{r}, t)$ é uma função que descreve a variação temporal da temperatura na entrada do armazenador.

O sólido presente na secção de entrada do armazenador, figura (3.1), troca calor por convecção com o fluido que entra e troca calor por condução com o resto do sólido presente no leito. Estas duas componentes de troca de calor constam na equação da energia. Antes da entrada do armazenador não existe sólido, o sólido não troca calor por condução através da face de entrada, assim, podemos escrever em $\bar{x} = 0$ [7]:

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial \bar{x}} = 0 \quad \text{para } \bar{x} = 0 \quad (3.2)$$

Da maneira análoga, na saída do armazenador o sólido não troca calor por condução através da sua face voltada para fora, desta maneira temos:

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial \bar{x}} = 0 \quad \text{para } \bar{x} = L \quad (3.3)$$

Também o fluido na saída não troca calor por condução com o fluido que está a sua frente, desta maneira:

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{x}} = 0 \quad \text{para } \bar{x} = L \quad (3.4)$$

Alguns autores [19, 36] utilizam equações específicas para esses contornos, deduzidas a partir de um balanço de energia simplificado, aplicado a um elemento diferencial localizado na fronteira. Esta forma de escrever as *condições de contorno*, além de complicar a implementação de um modelo numérico/computacional, adiciona erros de aproximação que as condições acima descritas não adicionam.

Os modelos de armazenadores bidimensionais necessitam de mais duas condições de contorno na direção radial, tanto para o fluido como para o sólido. No centro do armazenador o fluxo de calor é nulo (condição de simetria), assim temos, para o fluido e para o sólido respectivamente:

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{r}} = 0 \quad \text{para } \bar{r} = 0 \text{ e } 0 \leq \bar{x} \leq L \quad (3.5)$$

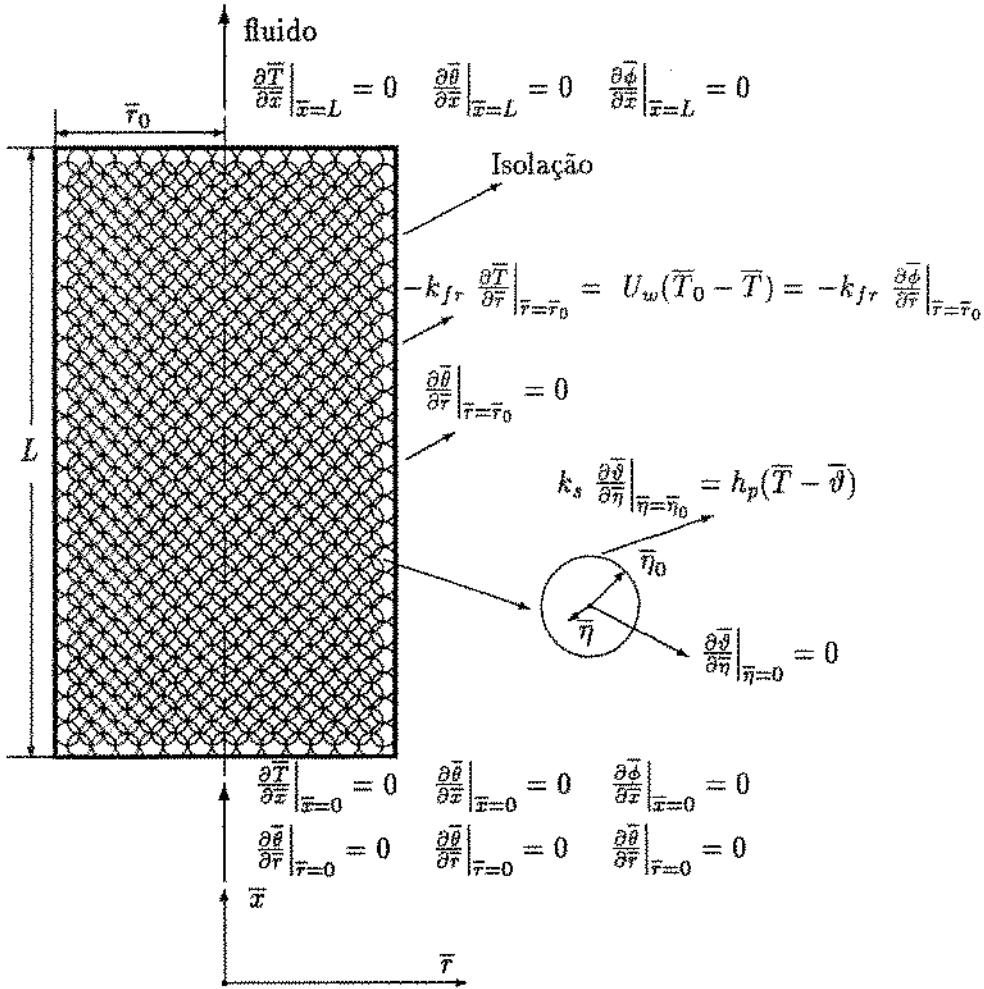


Figura 3.1: Condições de contorno do armazenador.

e

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial \bar{r}} = 0 \quad \text{para } \bar{r} = 0 \text{ e } 0 \leq \bar{x} \leq L \quad (3.6)$$

O fluido e o sólido perdem calor para o ambiente através da parede do armazenador. Devido às dificuldades físicas de se medir com razoável precisão a área de contato das partículas sólidas com a parede e a resistência térmica de contato partícula/parede, a perda de calor para o meio ambiente é assumida que é realizada apenas pelo fluido. Isso é bastante razoável, uma vez que o equacionamento térmico do fluido é acoplado ao equacionamento térmico do sólido e adotando um coeficiente de película fluido/parede conveniente pode

se assumir que apenas o fluido troca calor com o ambiente. Como o calor trocado entre o sólido e o fluido já está considerado nas equações da energia para ambas as fases e o sólido não troca calor com o meio, podemos escrever para o sólido:

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial \bar{r}} = 0 \quad \text{para } \bar{r} = \bar{r}_0 \text{ e } 0 \leq \bar{x} \leq L \quad (3.7)$$

Entre o fluido e o ambiente que circunda o leito existe troca de calor por condução através da parede do leito e do isolante térmico e troca de calor por convecção entre a superfície do isolante e o ambiente. Assim a condição de contorno para o fluido na parede será:

$$-k_{fr} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{r}} = U_w(\bar{T}_0 - \bar{T}) \quad \text{para } \bar{r} = \bar{r}_0 \text{ e } 0 \leq \bar{x} \leq L \quad (3.8)$$

onde U_w é o coeficiente global de troca de calor entre o fluido e o ambiente

No modelo onde é assumido a existência de gradiente térmico no interior das partículas, duas outras condições de contorno são necessárias. Assumido que no interior das partículas só existe gradiente térmico na direção radial, no centro da partícula temos:

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial \bar{\eta}} = 0 \quad \text{para } \bar{\eta} = 0 \quad (3.9)$$

Na superfície da partícula temos troca de calor por convecção com o fluido que escoia através do leito, assim:

$$k_s \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial \bar{\eta}} = h_p(\bar{T} - \bar{\theta}|_{(\bar{\eta}=\bar{\eta}_0)}) \quad \text{para } \bar{\eta} = \bar{\eta}_0 \quad (3.10)$$

3.3 Avaliação dos Parâmetros

3.3.1 Estimativa da perda de carga em leitos fixos

A perda de carga ao longo de leitos fixos depende das propriedades do fluido, da sua velocidade e de características geométricas das partículas que o compõe. Segundo Gabor e Botterill [11] expressão que relaciona a perda de carga ao longo do leito com os fatores de influência é:

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{G^2}{\rho_f d_p} \left[\left(\frac{(1-\epsilon)}{\epsilon^3} \right) \left(1,75 + 150 \frac{(1-\epsilon)}{Re_p} \right) \right] \quad (3.11)$$

onde Re_p é o número de Reynolds modificado, dado por:

$$Re_p = \frac{Gd_p}{\mu} \quad (3.12)$$

O diâmetro equivalente (d_p) da partícula corresponde ao diâmetro de uma esfera com o mesmo volume da partícula.

O fator de forma (ϕ), leva em conta a esfericidade das partículas que compõe o leito. A esfericidade é a relação entre a área superficial de uma esfera que tem um diâmetro igual ao diâmetro equivalente partícula e a área superficial da partícula. Assim:

$$\phi = \frac{\text{área superficial da esfera (com mesmo diâmetro equivalente)}}{\text{área superficial da partícula}}$$

a tabela (3.1) [11] apresenta o fator de forma para várias geometrias de partículas.

Tabela 3.1: Fator de forma para alguns materiais.

material (ou geometria)	fator de forma ϕ
Esferas	1,000
Cubos	0,806
Pirâmides equiláteras	0,671
Cilindro ($d = h$)	0,874
Areia	0,534 - 0,861
Sílica	0,554 - 0,628
Carvão	0,625 - 0,696
Ferro catalítico	0,578
Cilindro de celite	0,861 - 0,877
Sólidos picados	0,63

A fração de vazios do leito (ϵ) é definida como a relação entre o volume de vazios e o volume total do leito. A fração de vazios é influenciada tanto pela geometria do sólido como pela forma que eles são arranjados no leito. A tabela (3.2) [11] apresenta a fração de vazios para partículas esféricas com os arranjos mais comuns. A tabela (3.3) apresenta a fração de vazios para diversas matérias com partículas não esféricas com empacotamento randômico.

Tabela 3.2: Fração de vazios para partículas esféricas.

Empacotamento	Fração de vazios ϵ
Romboédrico	0,2595
Esferoidal-tetragonal	0,3019
Ortorrômico	0,3954
Cúbico	0,476
Randômico	0,36 - 0,43

Tabela 3.3: Fração de vazios para diversos materiais com empacotamento randômico e geometria variada.

Material	fração de vazios ϵ	referência
Areia	0,37 - 0,50	[11]
Rocha granulada	0,44 - 0,45	[11]
Rochas de formas irregulares	0,42	[1]
Areia de rio	0,359	[25]
Escoria	0,366 - 0,370	[25]
Fibras cilíndricas	0,682 - 0,919	[21]
Cilindros vazados	0,531 - 0,705	[22]

3.3.2 Coeficiente de película fluido/partícula e fluido/parede

O coeficiente de película entre o fluido e as partículas que compõe o leito é um dos fatores de maior importância para obtenção de dados corretos de simulação de leitos fixos. A grande maioria dos trabalhos consultados durante o desenvolvimento deste trabalho apresentam relações para cálculo do coeficiente de película para leitos compostos por partículas de pequeno diâmetro ($d_p \approx 1\text{ mm}$), com gás escoando entre elas. Estas relações são de grande importância para cálculo de reatores químicos, porém são de pouca valia para uso em cálculos de transferência de calor em leitos fixos projetados para operar como armazenadores térmicos, uma vez que os leitos contruídos para esse fim possuem partículas

de diâmetros maiores e pode haver líquido escoando por entre elas.

Para partículas de grande diâmetro as expressões de número de Nusselt encontradas variam de autor para autor, porém a maior parte dessas expressões produzem um número de Nusselt bastantes próximos um do outro. Beek [4] apresenta duas relação para cálculo do número de Nusselt. A expressão (3.13) é recomendada para partícula esféricas com arranjo randômico e a expressão (3.14) para partícula esféricas com arranjo cúbico centrada e escoamento através do centro do arranjo.

$$Nu_p = 3,22 Re_p^{1/3} Pr^{1/3} + 0,117 Re_p^{0,8} Pr^{0,4} \quad (3.13)$$

$$Nu_p = 2,42 Re_p^{1/3} Pr^{1/3} + 0,129 Re_p^{0,8} Pr^{0,4} + 1,4 Re_p^{0,4} \quad (3.14)$$

Estas expressões são válidas para $Re_p > 40$.

Gabor e Botterill [11] apresenta uma relação de número de Nusselt para partículas esféricas com arranjo randômico e fração de vazios alta ($\epsilon \approx 0,4$) bem como para partículas com arranjo romboédrico ($\epsilon = 0,26$) e $Re_p > 50$:

$$Nu_p = \frac{h_p d_p}{k_f} = 2 + 1,8 Pr^{1/3} Re_p^{1/2} \quad (3.15)$$

Baldwin et alii [2], a partir de dados de vários outros investigadores, correlaciona o número de Nusselt com o número de Reynolds e obtém a expressão (3.16) válida para ($20 < Re_p < 10^4$).

$$Nu_p = \left(0,0108 + \frac{0,929}{Re_p^{0,58} - 0,483} \right) \frac{Re_p Pr^{1/3}}{\epsilon} \quad (3.16)$$

Gupta et alii [15] obteve uma expressão para número de Nusselt a partir de dados experimentais obtidos por vários investigadores, para $10 < Re_p < 10^4$. Esta expressão (3.17) é válida tanto para leitos fixos como para leitos fluidizados.

$$Nu_p = \left(\frac{2,876}{Re_p} + \frac{0,3023}{Re_p^{0,35}} \right) \frac{Re_p Pr^{1/3}}{\epsilon} \quad (3.17)$$

Beasley e Clark [3] usa uma correlação para número de Nusselt fornecida por Galloway e Sage [12] para simular um armazenador de calor em leito fixo operando com ar como fluido de trabalho. Esta relação (3.18) fornece valores inferiores aos obtidos experimentalmente.

Beasley sugere que as constantes sejam mudadas para se obter uma melhor correlação, fornecendo, assim, a expressão (3.19).

$$Nu_p = 1,354 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} + 0,0326 Re_p Pr^{1/2} \quad (3.18)$$

$$Nu_p = 2,03 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} + 0,049 Re_p Pr^{1/2} \quad (3.19)$$

Littman e Silva, citado por Vortmeyer [34], propõe as seguintes expressões para cálculo do número de Nusselt:

$$Nu_p = 1,75 Re_p^{0,49} Pr^{1/3} \quad \text{para } 13 < Re_p < 180 \quad (3.20)$$

$$Nu_p = 1,03 Re_p^{0,59} Pr^{1/3} \quad \text{para } Re_p > 180 \quad (3.21)$$

Vortmeyer apresenta, ainda, uma expressão para cálculo do número de Nusselt, obtida por Bird, Steward e Lightfoot, através de regressão a partir de outras correlações. Esta expressão válida para $Re_p > 13$, é:

$$Nu_p = 1,10 \frac{Re_p Pr^{1/3}}{Re_p^{0,41} - 1,5} \quad (3.22)$$

Estas expressões estão mostradas na figura (3.2) a (3.4), para número de Prandtl diferentes.

A correlação fornecida por Beek [4] (3.13) foi usada neste trabalho, pois representa um valor médio entre as outras correlações, e dada a dificuldades de verificação de cada uma dessas correlações com dados experimentais essa correlação foi adotada.

Beek [4] diz que uma aproximação razoável para o coeficiente de película fluido/parede pode ser conseguido multiplicando-se uma constante igual a 0,8 ao coeficiente de película fluido/partícula. Assim o coeficiente fluido/parede será:

$$h_w = \left(\frac{k_f}{2\eta_0} \right) \left[2,576 Re^{1/3} Pr^{1/3} + 0,0936 Re^{0,8} Pr^{0,4} \right] \quad (3.23)$$

A comparação do número de Nusselt versus número de Reynolds, obtidos a partir das diversas expressões é mostrada nas figuras (3.2) a (3.4).

A escolha da expressão proposta por Beek [4] (3.13) para uso nas simulações é justificável, pois ela representa um *valor médio* entre as diversas expressões apresentadas.

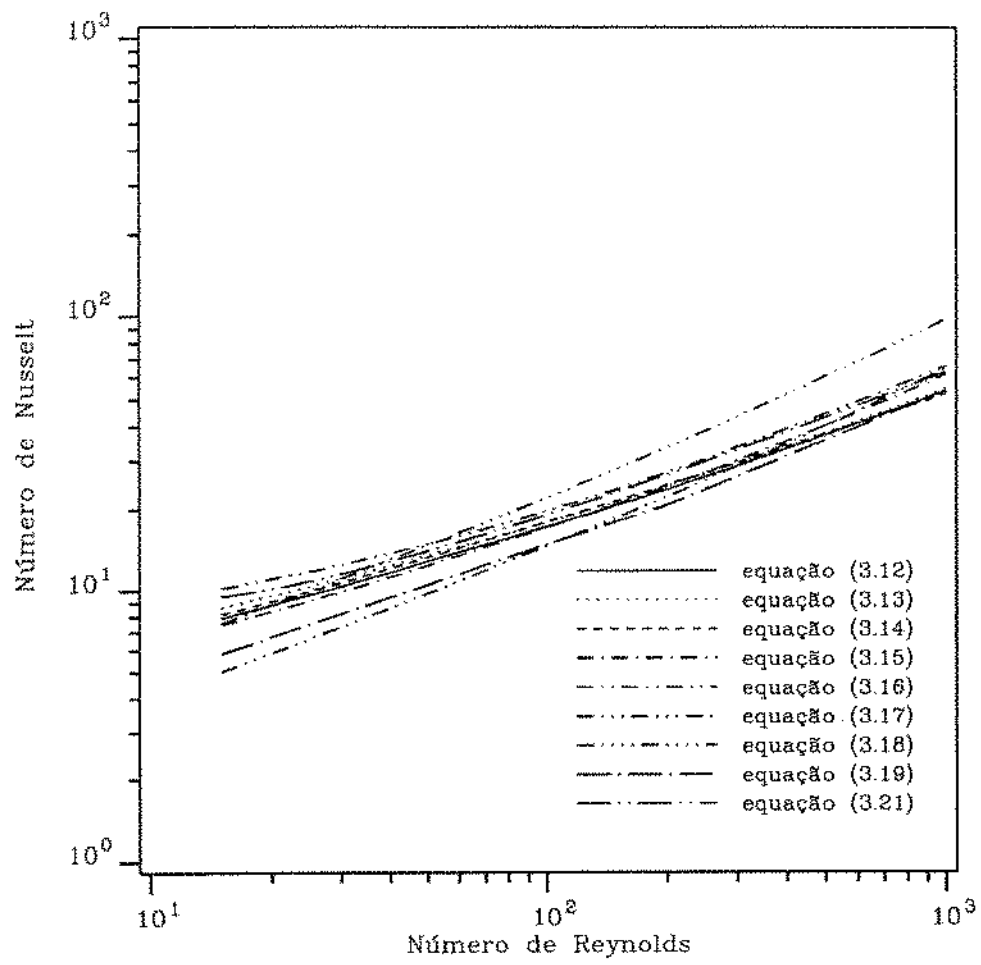


Figura 3.2: Valores de números de Nusselt fornecidos por diversas correlações, $Pr = 0,7$, $\epsilon = 0,4$.

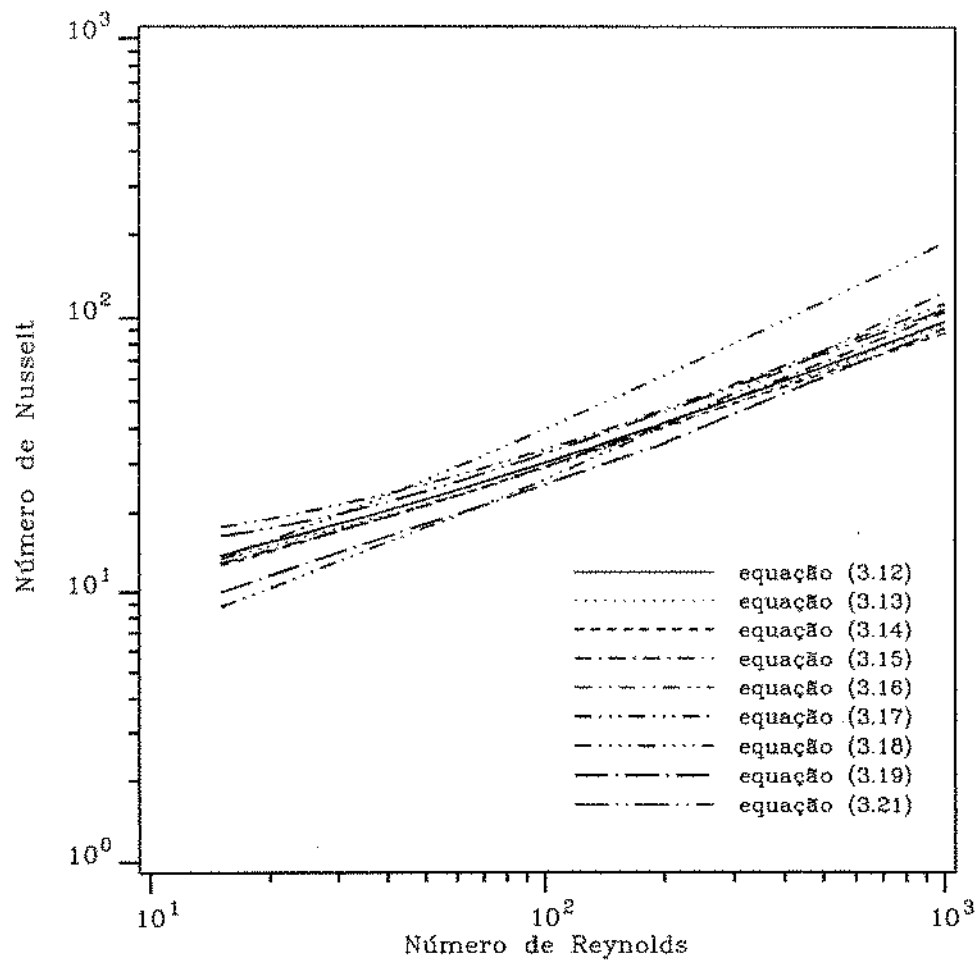


Figura 3.3: Valores de números de Nusselt fornecidos por diversas correlações, $Pr = 3,5$, $\epsilon = 0,4$.

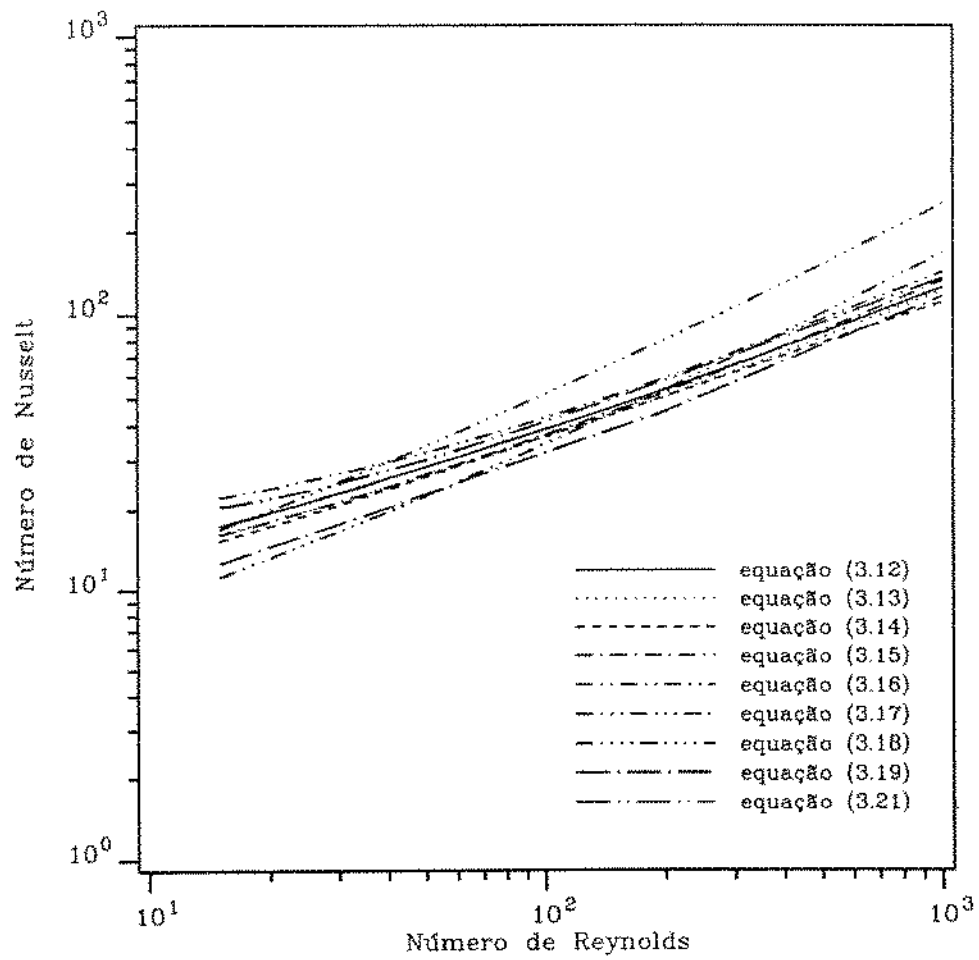


Figura 3.4: Valores de números de Nusselt fornecidos por diversas correlações, $Pr = 7$, $\epsilon = 0,4$.

3.3.3 Coeficiente global de transferência de calor

O coeficiente global de transferência de calor (U_w), foi estimado assumido que a parede do armazenador possui resistência térmica nula, e existe sobre a parede uma camada de isolante térmico. O coeficiente de película entre a camada de isolante e o meio ambiente foi calculado usando as expressões encontradas na literatura para coeficiente de película para cilindro verticais. Desta maneira a expressão para o coeficiente global de transferência de calor fica:

$$U_w = \frac{1}{\frac{1}{A_0 h_w} + \frac{\ln((\bar{r}_0 + e)/\bar{r}_0)}{2\pi L k_{iso}} + \frac{1}{A_x h_x}} \quad (3.24)$$

onde h_x é o coeficiente de película entre o isolante e o meio ambiente e pode ser calculado pela expressão [18]:

$$h_x = 1,42 \left(\frac{\Delta T}{L} \right)^{1/4} \quad (3.25)$$

A diferença de temperatura (ΔT) é assumida constante e igual a 75°C. O material isolante possui uma condutividade térmica $k_{iso} = 0,06 \text{ W/m K}$.

3.3.4 Parâmetros de transporte

A frase *transferência de calor em leitos fixos* é normalmente usada para descrever uma série de fenômenos de trocas de calor que ocorrer no interior do leito, o que inclui condução, convecção e radiação. As diversas maneiras possíveis de troca de calor em um leito fixo está mostrada na figura (3.5). Ao analisarmos esta figura podemos observar as seguintes formas de troca de calor:

1. Transferência de calor através do sólido;
2. Transferência de calor através do contato sólido/sólido;
3. Transferência de calor por radiação entre as superfícies dos sólidos;
4. Transferência de calor através da película de fluido existente na superfície do sólido;
5. Transferência de calor por convecção fluido/partícula sólida;
6. Transferência de calor por dispersão lateral do fluido;

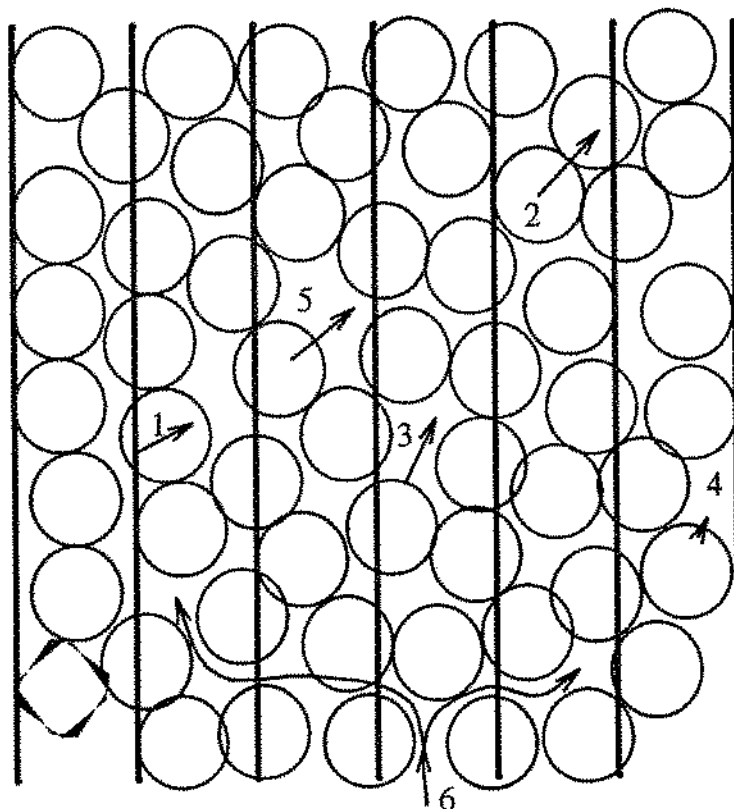


Figura 3.5: Mecânismo de troca de calor em um leito fixo.

Esses mecanismos de transferência de calor são normalmente englobados em um parâmetro de forma a simplificar o equacionamento do problema. Esse parâmetro é chamado de *condutividade térmica efetiva*. Nos modelos de fase única todos os mecanismos citados acima são englobados num único parâmetro, enquanto que nos modelos de duas fases eles são relacionados em parâmetros distintos para sólido e para o fluido. Os efeitos de troca de calor por radiação são desprezados.

Wakao e Kaguei [38] sugere que a condutividade térmica efetiva axial pode ser calculada pela expressão:

$$\frac{k_{eff}}{k_f} = \frac{k_e^0}{k_f} + 0,5 \text{ Pr Re}_p \quad (3.26)$$

onde k_e^0 é condutividade térmica efetiva de estagnação e é dada pela expressão:

$$\frac{k_e^0}{k_f} = \left(\frac{k_s}{k_f} \right)^m \quad (3.27)$$

onde

$$m = 0,280 - 0,757 \log_{10} \epsilon - 0,057 \log_{10} \left(\frac{k_s}{k_f} \right) \quad (3.28)$$

A condutividade térmica efetiva radial pode ser calculada [38] como:

$$\frac{k_{efr}}{k_f} = \frac{k_e^0}{k_f} + 0,1 \text{ Pr Re}_p \quad (3.29)$$

A condutividade térmica efetiva axial (k_{efx}) e a condutividade térmica efetiva radial (k_{efr}) são usadas para modelos de fase única. Para modelos de duas fases a condutividade térmica efetiva do fluido e a condutividade térmica efetiva do sólido são computadas de formas distintas. A soma das condutividades térmicas efetivas de cada fase numa mesma direção é igual a condutividade térmica efetiva naquela direção. A condutividade térmica efetiva do fluido para direção axial (k_{fx}) é calculada usando as seguintes relações:

$$\begin{aligned} k_{fx} &= 0,7\epsilon k_f & \text{para } \text{Re}_p \leq 0,8 \\ &= 0,5 \text{ Pr Re}_p k_f & \text{para } \text{Re}_p > 0,8 \end{aligned} \quad (3.30)$$

A condutividade térmica efetiva axial do sólido (k_{sx}) é calculada como:

$$k_{sx} = k_{efx} - k_{fx} \quad (3.31)$$

A condutividade térmica efetiva radial do fluido (k_{fr}) é calculada como a condutividade térmica efetiva axial do fluido:

$$\begin{aligned} k_{fr} &= 0,7\epsilon k_f & \text{para } \text{Re}_p \leq 0,8 \\ &= 0,5 \text{ Pr Re}_p k_f & \text{para } \text{Re}_p > 0,8 \end{aligned} \quad (3.32)$$

e para o sólido:

$$k_{sr} = k_{efr} + k_{fr} \quad (3.33)$$

A densidade efetiva e o calor específico efetivo para modelos de fase única são definidas, respectivamente, como:

$$\rho_{ef} = \epsilon \rho_f + (1 - \epsilon) \rho_s \quad (3.34)$$

e

$$C_{ef} = \epsilon C_f + (1 - \epsilon) C_s \quad (3.35)$$

Esses dois parâmetros já foram incluídos, de forma explícita, na formulação dos modelos de fase única. Para modelos de duas fases esses parâmetros também já foram incluídos de forma explícita na formulação. A densidade efetiva do fluido é:

$$\rho_f^{ef} = \epsilon \rho_f \quad (3.36)$$

e a densidade efetiva do sólido é:

$$\rho_s^{ef} = (1 - \epsilon) \rho_s \quad (3.37)$$

O calor específico efetivo do fluido será:

$$C_f^{ef} = \epsilon C_f \quad (3.38)$$

e do sólido será:

$$C_s^{ef} = (1 - \epsilon) C_s \quad (3.39)$$

Capítulo 4

Métodos Numéricos

As equações dos modelos apresentados no capítulo 2 foram discretizadas usando-se diferenças finitas. Antes de serem discretizadas, porém, elas foram adimensionalizadas de forma a permitir uma maior facilidade na comparação dos resultados e melhor controle sobre os parâmetros de interesse nesse estudo.

Para realização das adimensionalizações foram escolhidos grupos adimensionais normalmente usados na análise de armazenadores de calor. Os grupos adimensionais usados são:

• Coordenadas:

$$x = \frac{\bar{x}}{L} \quad (\text{coordenada axial})$$

$$r = \frac{\bar{r}}{\bar{r}_0} \quad (\text{coordenada radial})$$

$$\eta = \frac{\bar{\eta}}{\bar{\eta}_0} \quad (\text{coordenada radial no interior da partícula})$$

• Temperatura:

$$T = \frac{\bar{T} - \bar{T}_0}{\bar{T}_i - \bar{T}_0} \quad (\text{para a fase fluida})$$

$$\theta = \frac{\bar{\theta} - \bar{T}_0}{\bar{T}_i - \bar{T}_0} \quad (\text{para a fase sólida})$$

$$\phi = \frac{\bar{\phi} - \bar{T}_0}{\bar{T}_i - \bar{T}_0} \quad (\text{para modelos de fase única})$$

$$\vartheta = \frac{\bar{\vartheta} - \bar{T}_0}{\bar{T}_i - \bar{T}_0} \quad (\text{para interior da partícula})$$

• Tempo:

$$\tau = \frac{G C_f t}{(1 - \epsilon) \rho_s C_s L}$$

• Parâmetros de transferência de calor e de transporte:

$$Pe_{fx} = \frac{G C_f L}{k_{efx}}$$

$$Pe_x = \frac{G C_f L}{k_{fx}}$$

$$Pe_{fr} = \frac{G C_f L}{k_{efr}}$$

$$Pe_r = \frac{G C_f L}{k_{fr}}$$

$$Bi_p = \frac{h_p d_p}{k_s}$$

$$Bi_r = \frac{U_w \bar{r}_0}{k_{fr}}$$

$$Bi_{ef} = \frac{U_w \bar{r}_0}{k_{efr}}$$

$$\lambda = \frac{\epsilon \rho_f C_f}{(1 - \epsilon) \rho_s C_s}$$

$$\beta_0 = \left(\frac{L}{\bar{r}_0} \right)^2$$

$$\beta_1 = \left(\frac{L}{\bar{\eta}_0} \right)^2$$

$$\Gamma = \frac{h_p a_p}{G C_f L}$$

$$\Gamma_w = \frac{U_w a_w}{G C_f L}$$

Usando esses parâmetros de adimensionalização as equações foram discretizadas e resolvidas pelo método ADI, no caso de modelos bidimensionais e pelo método IMPLÍCITO, no caso de modelos unidimensionais.

4.1 Modelos Adimensionalizados

Usando os grupos adimensionais descritos anteriormente, os diversos modelos podem ser adimensionalizados e posteriormente poderão ser discretizados.

4.1.1 Modelos de Fase Sólida Contínua

4.1.1.1 Modelo bidimensional

As equações (2.1) e (2.2) que definem o modelo de fase sólida contínua bidimensional, depois de adimensionalizadas ficam:

• para o fluido:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial \tau} + \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{1}{Pe_x} \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right] + \frac{\beta_0}{Pe_r} \left[\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right] + \Gamma(\theta - T) \quad (4.1)$$

• para o sólido:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{k_{sx}/k_{fx}}{Pe_x} \left[\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \right] + \frac{k_{sr}/k_{fr}\beta_0}{Pe_r} \left[\frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \theta}{\partial r} \right] + \Gamma(T - \theta) \quad (4.2)$$

Usando as condições de contorno para o fluido definidas nas expressões (3.1) e (3.4), para a direção axial e as condições de contorno definidas pelas expressões (3.5) e (3.8) para a direção radial, obtemos:

• para o fluido:

$$x = 0 \Rightarrow T = 1 \quad (4.3)$$

$$x = 1 \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad (4.4)$$

$$r = 0 \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (4.5)$$

$$r = 1 \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial r} + Bi_r T = 0 \quad (4.6)$$

As condições de contorno para a fase sólida foram definidas pela expressões (3.2) e (3.3) para a direção axial e pelas expressões (3.6) e (3.7), para a direção radial. Desta forma teremos, para a fase sólida as seguintes condições de contorno:

• para o sólido:

$$x = 0 \Rightarrow \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0 \quad (4.7)$$

$$x = 1 \Rightarrow \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0 \quad (4.8)$$

$$r = 0 \Rightarrow \frac{\partial \theta}{\partial r} = 0 \quad (4.9)$$

$$r = 1 \Rightarrow \frac{\partial \theta}{\partial r} = 0 \quad (4.10)$$

Inicialmente temos o armazenador em equilíbrio térmico com o meio ambiente e a temperatura do fluido que circula por ele é a temperatura do ambiente. Assim a condição

inicial para este modelo, assim como para todos os outros modelos, será:

$$T = \theta = 0 \quad \text{para} \quad \begin{cases} 0 \leq x \leq 1, \\ 0 \leq r \leq 1 \text{ e} \\ r \leq 0 \end{cases} \quad (4.11)$$

4.1.1.2 Modelo unidimensional

Procedendo da mesma maneira como foi feito para o modelo bidimensional, obtemos a partir das equações (2.3) e (2.4), as equações adimensionalizadas para o modelo unidimensional:

• para o fluido:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial \tau} + \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{1}{Pe_x} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \Gamma(\theta - T) - \Gamma_w T \quad (4.12)$$

• para o sólido:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{k_{sx}/k_{fx}}{Pe_x} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \Gamma(T - \theta) \quad (4.13)$$

Neste modelo necessitamos duas condições de contorno para cada fase na direção axial do armazenador. Assim, usando as condições de contorno definidas em (3.1) e (3.4) para a fase fluido e as condições de contorno (3.2) e (3.3) para a fase sólida, obtemos:

• para o fluido:

$$x = 0 \Rightarrow T = 1 \quad (4.14)$$

$$x = 1 \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad (4.15)$$

• para o sólido:

$$x = 0 \Rightarrow \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0 \quad (4.16)$$

$$x = 1 \Rightarrow \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0 \quad (4.17)$$

A condição inicial é assumida igual ao do modelo bidimensional, assim:

$$T = \theta = 0 \quad \text{para} \quad \begin{cases} 0 \leq x \leq 1 \\ \text{e} \\ r \leq 0 \end{cases} \quad (4.18)$$

4.1.1.3 Modelo de Schumann

Usando os parâmetros adimensionais já definidos, o modelo de Schumann fica:

- para o fluido:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial \tau} + \frac{\partial T}{\partial x} = \Gamma(\theta - T) - \Gamma_w T \quad (4.19)$$

- para o sólido:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \Gamma(T - \theta) \quad (4.20)$$

Para solução deste modelo necessita-se apenas uma condição de contorno para o fluido em $x = 0$ e a condição inicial do armazenador. Desta maneira temos:

- para o fluido:

$$x = 0 \Rightarrow T = 1 \quad (4.21)$$

e a condição inicial é:

$$T = \theta = 0 \quad \text{para} \quad \begin{cases} 0 \leq x \leq 1 \\ \text{e} \\ \tau \leq 0 \end{cases} \quad (4.22)$$

4.1.2 Modelo com Gradiente Térmico no Interior das Partículas

Usando os parâmetros adimensionais já definidos, as equações para a fase fluida e a fase sólida ficam:

- para o fluido:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial \tau} + \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{1}{\text{Pe}_x} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \Gamma(\vartheta|_{(\eta=1)} - T) - \Gamma_w T \quad (4.23)$$

- para o sólido:

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial \tau} = \beta_1 \frac{(1 - \epsilon) k_s / k_{fx}}{\text{Pe}_x} \left[\frac{\partial^2 \vartheta}{\partial \eta^2} + \frac{2}{\eta} \frac{\partial \vartheta}{\partial \eta} \right] \quad (4.24)$$

As condições de contorno são as definidas pelas expressões (3.1) e (3.3) para o fluido e (3.9) e (3.10) para o sólido. Assim teremos:

- para o fluido:

$$x = 0 \Rightarrow T = 1 \quad (4.25)$$

$$x = 1 \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad (4.26)$$

• para o sólido:

$$\eta = 0 \Rightarrow \frac{\partial \vartheta}{\partial \eta} = 0 \quad (4.27)$$

$$\eta = 1 \Rightarrow \frac{\partial \vartheta}{\partial \eta} - \text{Bi}_p [T - \vartheta|_{(\eta=1)}] = 0 \quad (4.28)$$

Inicialmente o armazenador é assumido como estando em equilíbrio térmico com, o meio ambiente, bem como o fluido que se encontra dentro dele. Desta maneira temos:

$$T = \vartheta = 0 \quad \text{para} \begin{cases} 0 \leq x \leq 1, \\ 0 \leq \eta \leq 1 \text{ e} \\ \tau \leq 0 \end{cases} \quad (4.29)$$

4.1.3 Modelos de Fase Única

4.1.3.1 Modelo bidimensional

O modelo de fase única bidimensional foi definido pela equação (2.9) e adimensionalizado com os parâmetros definidos na página 29, ficando:

$$[1 + \lambda] \frac{\partial \phi}{\partial \tau} + \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{1}{\text{Pe}_{fx}} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\beta_0}{\text{Pe}_{fr}} \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} \right] \quad (4.30)$$

As condições de contorno para este modelo são as definidas pelas expressões (3.2) e (3.3) para direção axial do leito e pelas expressões (3.4) e (3.5) para a direção radial do leito. Essas expressões adimensionailizadas ficam:

$$x = 0 \Rightarrow \phi = 0 \quad (4.31)$$

$$x = 1 \Rightarrow \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (4.32)$$

$$r = 0 \Rightarrow \frac{\partial \phi}{\partial r} = 0 \quad (4.33)$$

$$r = 1 \Rightarrow \frac{\partial \phi}{\partial r} - \text{Bi}_{ef} = 0 \quad (4.34)$$

A condição inicial para este modelo é dada por:

$$\phi = 0 \quad \text{para} \begin{cases} 0 \leq x \leq 1, \\ 0 \leq r \leq 1 \text{ e} \\ \tau \leq 0 \end{cases} \quad (4.35)$$

4.1.3.2 Modelo unidimensional

De maneira semelhante como foi feito anteriormente, a adimensionalização do modelo de fase única unidimensional nos fornece:

$$[1 + \lambda] \frac{\partial \phi}{\partial \tau} + \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{1}{Pe_{fx}} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \Gamma_w \phi \quad (4.36)$$

As condições de contorno são:

$$x = 0 \Rightarrow \phi = 0 \quad (4.37)$$

$$x = 1 \Rightarrow \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (4.38)$$

e a condição inicial é a mesma condição usada nos outros modelos:

$$\phi = 0 \quad \text{para} \quad \begin{cases} 0 \leq x \leq 1, \\ \text{e} \\ \tau \leq 0 \end{cases} \quad (4.39)$$

4.2 Discretização das Equações

4.2.1 Considerações gerais

As equações governantes dos diversos modelos, já adimensionalizadas, foram aproximadas por diferenças finitas usando-se a expansão por série de Taylor. Para obter as equações em diferenças finitas foi usado o método implícito, nos casos de modelos unidimensionais, e ADI, no casos de modelos bidimensionais. O uso desses dois métodos de discretização resulta em sistemas de equações semelhantes para todos os modelos.

Utilizando esses métodos de discretização obtemos um sistema de $m \times m$ equações que pode ser genericamente escrito como:

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & a_{m-1} & b_{m-1} & c_{m-1} \\ & & & & a_m & b_m \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ \vdots \\ T_{m-1} \\ T_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{m-1} \\ d_m \end{pmatrix} \quad (4.40)$$

Esse sistema de equações tem características que o torna interessante do ponto de vista de implementação computacional:

- (a) usa relativamente pouca memória para armazenar o sistema de equações formado, mesmo para grandes sistemas, uma vez que são necessárias apenas quatro variáveis indexadas para armazenar todo o sistema;
- (b) o algoritmo para solução desse sistema de equações é bastante simples e requer um número reduzido de operação aritméticas, o que diminui o tempo computacional se comparado com outros métodos de solução de sistemas de equações;
- (c) a diminuição do número de operação aritméticas diminui o erro de arredondamento no resultado final.

Esses fatores são de fundamental importância na escolha de um algoritmo para solução de sistemas de equações, uma vez que o sistema de equações diferenciais a ser resolvido é um sistema não linear o que implica em iterações até chegar ao resultado final com um erro de convergência pré-fixado.

Além dos métodos de discretização produzem sistemas de equações algébricas semelhantes, outro fator que determinou a escolha desses dois métodos de discretização, implícito e ADI, foi o fato desses métodos serem *incondicionalmente estáveis* [5].

Desta maneira ao realizarmos as discretizações chegamos a um sistema de equações que podem ser expressas sempre da mesma forma:

$$a_k T_{k-1} + b_k T_k + c_k T_{k+1} = d_k \quad (4.41)$$

onde k é o número do nó onde é definida a temperatura. Esse sistema de equações tem outra particularidade. O termo a_k é nulo quando k é igual ao k inicial e o termo c_k também é nulo quando k é igual ao k final.

Em Patankar [26] encontra-se a dedução do algoritmo usado para solução desse sistema de equações.

4.2.2 Modelos de Fase Sólida Contínua

4.2.2.1 Modelo bidimensional

As equações governantes do modelo bidimensional, equações (4.1) e (4.2) e suas condições de contorno, equações (4.3) a (4.11) foram discretizadas usando o método ADI.

Discretizando a equação da fase fluida (4.1), na direção axial obtemos:

• Para $x = 0$ e $r = 0 \rightarrow i = 1$ e $j = 1$

$$\begin{aligned}
& \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} \\
& - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) T_{i+1,j}^{n+1/2} = \left[1 - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) \right] T_{i,j}^n \\
& + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) T_{i,j+1}^n + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1/2} \\
& + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \right] T_{i-} \quad (4.42)
\end{aligned}$$

• Para $0 < x < 1$ e $r = 0 \rightarrow 1 < i < i_{\max}$ e $j = 1$

$$\begin{aligned}
& - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \right] T_{i-1,j}^{n+1/2} \\
& + \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} \\
& - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) T_{i+1,j}^{n+1/2} = \left[1 - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) \right] T_{i,j}^n \\
& + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) T_{i,j+1}^n + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1/2} \quad (4.43)
\end{aligned}$$

• Para $x = 1$ e $r = 0 \rightarrow i = i_{\max}$ e $j = 1$

$$\begin{aligned}
& - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \right] T_{i-1,j}^{n+1/2} \\
& + \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} \\
& = \left[1 - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) \right] T_{i,j}^n + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) T_{i,j+1}^n \\
& + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1/2} \quad (4.44)
\end{aligned}$$

• Para $x = 0$ e $0 < r < 1 \rightarrow i = 1$ e $1 < j < j_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} \\
 & - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) T_{i+1,j}^{n+1/2} = \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r r_j} \right) \right] T_{i,j-1}^n \\
 & + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) \right] T_{i,j}^n + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r r_j} \right) \right] T_{i,j+1}^n \\
 & + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1/2} + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \right] T_{i,-} \quad (4.45)
 \end{aligned}$$

• Para $0 < x < 1$ e $0 < r < 1 \rightarrow 1 < i < i_{\max}$ e $1 < j < j_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \right] T_{i-1,j}^{n+1/2} \\
 & + \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} \\
 & - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) T_{i+1,j}^{n+1/2} = \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r r_j} \right) \right] T_{i,j-1}^n \\
 & + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) \right] T_{i,j}^n + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r r_j} \right) \right] T_{i,j+1}^n \\
 & + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1/2} \quad (4.46)
 \end{aligned}$$

• Para $x = 1$ e $0 < r < 1 \rightarrow i = i_{\max}$ e $1 < j < j_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \right] T_{i-1,j}^{n+1/2} \\
 & + \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} \\
 & = \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r r_j} \right) \right] T_{i,j-1}^n + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) \right] T_{i,j}^n \\
 & + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) T_{i,j+1}^n + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1/2} \quad (4.47)
 \end{aligned}$$

• Para $x = 0$ e $r = 1 \rightarrow i = 1$ e $j = j_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} \\
 & - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) T_{i+1,j}^{n+1/2} = 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) T_{i,j-1}^n \\
 & + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) - 2\Delta r \text{Bi}_r \left(\left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r r_j} \right) \right) \right] T_{i,j}^n \\
 & + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1/2} + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \right] T_{i,-}
 \end{aligned} \tag{4.48}$$

• Para $0 < x < 1$ e $r = 1 \rightarrow 1 < i < i_{\max}$ e $j = j_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \right] T_{i-1,j}^{n+1/2} \\
 & + \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} \\
 & - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) T_{i+1,j}^{n+1/2} = 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) T_{i,j-1}^n \\
 & + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) - 2\Delta r \text{Bi}_r \left(\left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r r_j} \right) \right) \right] T_{i,j}^n \\
 & + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1/2}
 \end{aligned} \tag{4.49}$$

• Para $x = 1$ e $r = 1 \rightarrow i = i_{\max}$ e $j = j_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \right] T_{i-1,j}^{n+1/2} \\
 & + \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} \\
 & = 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) T_{i,j-1}^n \\
 & + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) - 2\Delta r \text{Bi}_r \left(\left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r r_j} \right) \right) \right] T_{i,j}^n \\
 & + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1/2}
 \end{aligned} \tag{4.50}$$

Tabela 4.1: Coeficientes do sistema de equações. Fase fluida. Direção: axial. Modelo: Fase Sólida Contínua Bidimensional.

	a_i	b_i	c_i
$x = 0$	0	$1 + R_{f1} + 2R_{f2} + R_{f5}$	$-R_{f2}$
$0 < x < 1$	$-(R_{f1} + R_{f2})$	$1 + R_{f1} + 2R_{f2} + R_{f5}$	$-R_{f2}$
$x = 1$	$-(R_{f1} + 2R_{f2})$	$1 + R_{f1} + 2R_{f2} + R_{f5}$	0

	d_i
$r = 0$	$(1 - 4R_{f3}) T_{i,j}^n + 4R_{f3} T_{i,j+1}^n + R_{f5} \theta_{i,j}^{n+1/2}$
$0 < r < 1$	$(R_{f3} - R_{f4}) T_{i,j-1}^n + (1 - 2R_{f3}) T_{i,j}^n + (R_{f3} + R_{f4}) T_{i,j+1}^n + R_{f5} \theta_{i,j}^{n+1/2}$
$r = 1$	$2R_{f3} T_{i,j+1}^n + (1 - 2R_{f3} + R_{f6}(R_{f3} + R_{f4})) T_{i,j}^n + R_{f5} \theta_{i,j}^{n+1/2}$

onde:

$$\begin{aligned}
 R_{f1} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) & R_{f2} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) & R_{f3} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) \\
 R_{f4} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r r_j} \right) & R_{f5} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) & R_{f6} &= 2\Delta r \text{ Bi}_r
 \end{aligned} \tag{4.51}$$

O termo $(R_{f1} + R_{f2})T_{i-}$ deve ser acrescentado ao coeficiente d_i sempre que $x = 0$.

Discretizando a mesma equação para a direção radial obtemos:

- Para $r = 0$ e $x = 0 \rightarrow j = 1$ e $i = 1$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \right] T_{i,j}^{n+1} - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) T_{i,j+1}^{n+1} \\
 &= \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) T_{i+1,j}^{n+1/2} \\
 &+ \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1} + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \right] T_{i-}
 \end{aligned} \tag{4.52}$$

• Para $0 < r < 1$ e $x = 0 \rightarrow 1 < j < j_{\max}$ e $i = 1$

$$\begin{aligned}
& - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r r_j} \right) \right] T_{i,j-1}^{n+1} \\
& + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \Gamma}{\lambda} \right) \right] T_{i,j}^{n+1} \\
& - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r r_j} \right) \right] T_{i,j+1}^{n+1} \\
& = \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda \Delta x} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) T_{i+1,j}^{n+1/2} \\
& + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1} + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda \Delta x} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i-}
\end{aligned} \tag{4.53}$$

• Para $r = 1$ e $x = 0 \rightarrow j = j_{\max}$ e $i = 1$

$$\begin{aligned}
& - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) T_{i,j-1}^{n+1} \\
& + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \Gamma}{\lambda} \right) \right. \\
& \quad \left. + 2 \Delta r \text{Bi}_r \left(\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r r_j} \right) \right) \right] T_{i,j}^{n+1} \\
& = \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda \Delta x} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) T_{i+1,j}^{n+1/2} \\
& + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1} + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda \Delta x} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i-}
\end{aligned} \tag{4.54}$$

• Para $r = 0$ e $0 < x < 1 \rightarrow j = 1$ e $1 < i < i_{\max}$

$$\begin{aligned}
& \left[1 + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \Gamma}{\lambda} \right) \right] T_{i,j}^{n+1} - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) T_{i,j+1}^{n+1} \\
& = \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda \Delta x} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i-1,j}^{n+1/2} \\
& + \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda \Delta x} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} \\
& + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) T_{i+1,j}^{n+1/2} + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1}
\end{aligned} \tag{4.55}$$

• Para $0 < r < 1$ e $0 < x < 1 \rightarrow 1 < j < j_{\max}$ e $1 < i < i_{\max}$

$$\begin{aligned}
& - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r r_j} \right) \right] T_{i,j-1}^{n+1} \\
& + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \Gamma}{\lambda} \right) \right] T_{i,j}^{n+1} \\
& - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r r_j} \right) \right] T_{i,j+1}^{n+1} \\
& = \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda \Delta x} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i-1,j}^{n+1/2} \\
& + \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda \Delta x} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} \\
& + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) T_{i+1,j}^{n+1/2} + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1}
\end{aligned} \tag{4.56}$$

• Para $r = 1$ e $0 < x < 1 \rightarrow j = j_{\max}$ e $1 < i < i_{\max}$

$$\begin{aligned}
& - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) T_{i,j-1}^{n+1} \\
& + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \Gamma}{\lambda} \right) \right. \\
& \quad \left. + 2 \Delta r \text{Bi}_r \left(\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r r_j} \right) \right) \right] T_{i,j}^{n+1} \\
& = \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda \Delta x} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i-1,j}^{n+1/2} \\
& + \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda \Delta x} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} \\
& + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) T_{i+1,j}^{n+1/2} + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1}
\end{aligned} \tag{4.57}$$

• Para $r = 0$ e $x = 1 \rightarrow j = 1$ e $i = i_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \Gamma}{\lambda} \right) \right] T_{i,j}^{n+1} - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) T_{i,j+1}^{n+1} \\
 &= \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda \Delta x} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i-1,j}^{n+1/2} \\
 &+ \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda \Delta x} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} \\
 &+ \left(\frac{(\Delta\tau/2) \Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1} \tag{4.58}
 \end{aligned}$$

• Para $0 < r < 1$ e $x = 1 \rightarrow 1 < j < j_{\max}$ e $i = i_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r r_j} \right) \right] T_{i,j-1}^{n+1} \\
 &+ \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \Gamma}{\lambda} \right) \right] T_{i,j}^{n+1} \\
 &- \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r r_j} \right) \right] T_{i,j+1}^{n+1} \\
 &= \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda \Delta x} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i-1,j}^{n+1/2} \\
 &+ \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda \Delta x} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1} \tag{4.59}
 \end{aligned}$$

• Para $r = 1$ e $x = 1 \rightarrow j = j_{\max}$ e $i = i_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) T_{i,j-1}^{n+1} \\
 &+ \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \Gamma}{\lambda} \right) \right. \\
 &\quad \left. + 2 \Delta r \text{Bi}_r \left(\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_r \lambda \Delta r r_j} \right) \right) \right] T_{i,j}^{n+1} \\
 &= \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda \Delta x} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i-1,j}^{n+1/2} \\
 &+ \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda \Delta x} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i,j}^{n+1/2} + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \Gamma}{\lambda} \right) \theta_{i,j}^{n+1} \tag{4.60}
 \end{aligned}$$

Tabela 4.2: Coeficientes do sistema de equações. Fase fluida. Direção: radial. Modelo: Fase Sólida Contínua Bidimensional.

	a_j	b_j	c_j
$r = 0$	0	$1 + 4R_{f3} + R_{f5}$	$-4R_{f3}$
$0 < r < 1$	$-(R_{f3} - R_{f4})$	$1 + 2R_{f3} + R_{f5}$	$-(R_{f3} + R_{f4})$
$r = 1$	$-2R_{f3}$	$1 + 2R_{f3} + R_{f6}(R_{f3} + R_{f4}) + R_{f5}$	0

	d_j
$x = 0$	$(1 - R_{f1} - 2R_{f2}) T_{i,j}^{n+1/2} + R_{f2} T_{i+1,j}^{n+1/2} + R_{f5} \theta_{i,j}^{n+1} + R_{f1} + R_{f2}$
$0 < x < 1$	$(R_{f1} + R_{f2}) T_{i-1,j}^{n+1/2} + (1 - R_{f1} - 2R_{f2}) T_{i,j}^{n+1/2} + R_{f2} T_{i+1,j}^{n+1/2} + R_{f5} \theta_{i,j}^{n+1}$
$x = 1$	$(R_{f1} + 2R_{f2}) T_{i-1,j}^{n+1/2} + (1 - R_{f1} - 2R_{f2}) T_{i,j}^{n+1/2} + R_{f5} \theta_{i,j}^{n+1}$

onde:

$$\begin{aligned}
 R_{f1} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\lambda\Delta x} \right) & R_{f2} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) & R_{f3} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r^2} \right) \\
 R_{f4} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_r\lambda\Delta r r_j} \right) & R_{f5} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)\Gamma}{\lambda} \right) & R_{f6} &= 2\Delta r \text{Bi}_r
 \end{aligned} \tag{4.61}$$

A equação da fase sólida (4.2) discretizada na direção axial nos fornece:

- Para $x = 0$ e $r = 0 \rightarrow i = 1$ e $j = 1$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta x^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1/2} \\
 & - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta x^2} \right) \theta_{i+1,j}^{n+1/2} = \left[1 - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r\Delta r^2} \right) \right] \theta_{i,j}^n \\
 & + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r\Delta r^2} \right) \theta_{i,j+1}^n + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) T_{i,j}^{n+1/2}
 \end{aligned} \tag{4.62}$$

• Para $0 < x < 1$ e $r = 0 \rightarrow 1 < i < i_{\max}$ e $j = 1$

$$\begin{aligned}
 & - \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) T_{i-1,j}^{n+1/2} + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau}{2} \Gamma \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1/2} \\
 & - \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i+1,j}^{n+1/2} = \left[1 - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \right] \theta_{i,j}^n \\
 & + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \theta_{i,j+1}^n + \left(\frac{\Delta\tau}{2} \Gamma \right) T_{i,j}^{n+1/2}
 \end{aligned} \tag{4.63}$$

• Para $x = 1$ e $r = 0 \rightarrow i = i_{\max}$ e $j = 1$

$$\begin{aligned}
 & - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i+1,j}^{n+1/2} \\
 & + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau}{2} \Gamma \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1/2} \\
 & = \left[1 - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \right] \theta_{i,j}^n \\
 & + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \theta_{i,j+1}^n + \left(\frac{\Delta\tau}{2} \Gamma \right) T_{i,j}^{n+1/2}
 \end{aligned} \tag{4.64}$$

• Para $x = 0$ e $0 < r < 1 \rightarrow i = 1$ e $1 < j < j_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau}{2} \Gamma \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1/2} \\
 & - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i+1,j}^{n+1/2} \\
 & = \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r \tau_j} \right) \right] \theta_{i,j-1}^n \\
 & + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \right] \theta_{i,j}^n \\
 & + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r \tau_j} \right) \right] \theta_{i,j+1}^n \\
 & + \left(\frac{\Delta\tau}{2} \Gamma \right) T_{i,j}^{n+1/2}
 \end{aligned} \tag{4.65}$$

• Para $0 < x < 1$ e $0 < r < 1 \rightarrow 1 < i < i_{\max}$ e $1 < j < j_{\max}$

$$\begin{aligned}
& - \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i-1,j}^{n+1/2} + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau}{2} \Gamma \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1/2} \\
& - \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i+1,j}^{n+1/2} \\
& = \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r r_j} \right) \right] \theta_{i,j-1}^n \\
& + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \right] \theta_{i,j}^n \\
& + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r r_j} \right) \right] \theta_{i,j+1}^n \\
& + \left(\frac{\Delta\tau}{2} \Gamma \right) T_{i,j}^{n+1/2} \tag{4.66}
\end{aligned}$$

• Para $x = 1$ e $0 < r < 1 \rightarrow i = i_{\max}$ e $1 < j < j_{\max}$

$$\begin{aligned}
& - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i+1,j}^{n+1/2} \\
& + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau}{2} \Gamma \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1/2} \\
& = \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r r_j} \right) \right] \theta_{i,j-1}^n \\
& + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \right] \theta_{i,j}^n \\
& + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r r_j} \right) \right] \theta_{i,j+1}^n \\
& + \left(\frac{\Delta\tau}{2} \Gamma \right) T_{i,j}^{n+1/2} \tag{4.67}
\end{aligned}$$

Tabela 4.3: Coeficientes do sistema de equações. Fase: sólida. Direção: axial. Modelo de Fase Sólida Contínua Bidimensional.

	a_i	b_i	c_i
$x = 0$	0	$1 + 2R_{s1} + R_{s4}$	$-2R_{s1}$
$0 < x < 1$	$-R_{s1}$	$1 + 2R_{s1} + R_{s4}$	$-R_{s1}$
$x = 1$	$-2R_{f1}$	$1 + 2R_{s1} + R_{s4}$	0

	d_i
$r = 0$	$(1 - 4R_{s2}) \theta_{i,j}^n + 4R_{s2} \theta_{i,j+1}^n + R_{f4} T_{i,j}^{n+1/2}$
$0 < r < 1$	$(R_{s2} - R_{s3}) \theta_{i,j-1}^n + (1 - 2R_{s2}) \theta_{i,j}^n + (R_{s2} + R_{s3}) \theta_{i,j+1}^n + R_{s4} T_{i,j}^{n+1/2}$
$r = 1$	$2R_{s2} \theta_{i,j-1}^n + (1 - 2R_{s2}) \theta_{i,j}^n + R_{s4} T_{i,j}^{n+1/2}$

onde:

$$\begin{aligned}
 R_{s1} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) & R_{s2} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \\
 R_{s3} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r \tau_j} \right) & R_{s4} &= \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right)
 \end{aligned} \tag{4.68}$$

Discretizando a equação da fase sólida (4.2) para direção radial obtém-se:

- Para $r = 0$ e $x = 0 \rightarrow j = 1$ e $i = 1$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1} \\
 & - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \theta_{i,j+1}^{n+1} = \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1/2} \\
 & + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i+1,j}^{n+1/2} + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) T_{i,j}^{n+1}
 \end{aligned} \tag{4.69}$$

• Para $r = 0$ e $0 < x < 1 \rightarrow j = 1$ e $1 < i < i_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1} \\
 & - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \theta_{i,j+1}^{n+1} \\
 & = \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i-1,j}^{n+1/2} + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1/2} \\
 & + \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i+1,j}^{n+1/2} + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) T_{i,j}^{n+1}
 \end{aligned} \tag{4.70}$$

• Para $r = 0$ e $x = 1 \rightarrow j = 1$ e $i = i_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1} \\
 & - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \theta_{i,j+1}^{n+1} \\
 & = 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i-1,j}^{n+1/2} + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1/2} \\
 & + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) T_{i,j}^{n+1}
 \end{aligned} \tag{4.71}$$

• Para $0 < r < 1$ e $x = 0 \rightarrow 1 < j < j_{\max}$ e $i = 1$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r r_j} \right) \right] \theta_{i,j-1}^{n+1} \\
 & + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1} \\
 & - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r r_j} \right) \right] \theta_{i,j+1}^{n+1} \\
 & = \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1/2} \\
 & + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i+1,j}^{n+1/2} + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) T_{i,j}^{n+1}
 \end{aligned} \tag{4.72}$$

• Para $0 < r < 1$ e $0 < x < 1 \rightarrow 1 < j < j_{\max}$ e $1 < i < i_{\max}$

$$\begin{aligned}
& - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r r_j} \right) \right] \theta_{i,j-1}^{n+1} \\
& + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1} \\
& - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r r_j} \right) \right] \theta_{i,j+1}^{n+1} \\
& = \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i-1,j}^{n+1/2} + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1/2} \\
& + \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i+1,j}^{n+1/2} + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) T_{i,j}^{n+1}
\end{aligned} \tag{4.73}$$

• Para $0 < r < 1$ e $x = 1 \rightarrow 1 < j < j_{\max}$ e $i = i_{\max}$

$$\begin{aligned}
& - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r r_j} \right) \right] \theta_{i,j-1}^{n+1} \\
& + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1} \\
& - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r r_j} \right) \right] \theta_{i,j+1}^{n+1} \\
& = 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i-1,j}^{n+1/2} \\
& + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1/2} + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) T_{i,j}^{n+1}
\end{aligned} \tag{4.74}$$

• Para $r = 1$ e $x = 0 \rightarrow j = j_{\max}$ e $i = 1$

$$\begin{aligned}
& - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \theta_{i,j-1}^{n+1} \\
& + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1} \\
& = \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1/2} \\
& + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i+1,j}^{n+1/2} + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) T_{i,j}^{n+1}
\end{aligned} \tag{4.75}$$

• Para $r = 1$ e $0 < x < 1 \rightarrow j = j_{\max}$ e $1 < i < i_{\max}$

$$\begin{aligned}
& - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \theta_{i,j-1}^{n+1} \\
& + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1} \\
& = \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i-1,j}^{n+1/2} + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1/2} \\
& + \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i+1,j}^{n+1/2} + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) T_{i,j}^{n+1}
\end{aligned} \tag{4.76}$$

• Para $r = 1$ e $x = 1 \rightarrow j = j_{\max}$ e $i = i_{\max}$

$$\begin{aligned}
& - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \theta_{i,j-1}^{n+1} \\
& + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1} \\
& = 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) \theta_{i-1,j}^{n+1/2} \\
& + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \right] \theta_{i,j}^{n+1/2} + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) T_{i,j}^{n+1}
\end{aligned} \tag{4.77}$$

Tabela 4.4: Coeficientes do sistema de equações. Fase: sólida. Direção: radial. Modelo de Fase Sólida Contínua Bidimensional.

	a_j	b_j	c_j
$r = 0$	0	$1 + 4R_{s2} + R_{s4}$	$-4R_{s2}$
$0 < r < 1$	$-(R_{s2} - R_{s3})$	$1 + 2R_{s2} + R_{s4}$	$-(R_{s2} + R_{s3})$
$r = 1$	$-2R_{s2}$	$1 + 2R_{s2} + R_{s4}$	0

	d_j
$x = 0$	$(1 - 2R_{s1}) \theta_{i,j}^{n+1/2} + 2R_{s1} \theta_{i+1,j}^{n+1/2} + R_{s4} T_{i,j}^{n+1} + R_{s1}$
$0 < x < 1$	$R_{s1} \theta_{i-1,j}^{n+1/2} + (1 - 2R_{s1}) \theta_{i,j}^{n+1/2} + R_{s1} \theta_{i+1,j}^{n+1/2} + R_{s4} T_{i,j}^{n+1}$
$x = 1$	$2R_{s1} \theta_{i-1,j}^{n+1/2} + (1 - 2R_{s1}) \theta_{i,j}^{n+1/2} + R_{s4} T_{i,j}^{n+1}$

onde:

$$\begin{aligned} R_{s1} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x \Delta x^2} \right) & R_{s2} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r^2} \right) \\ R_{s3} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)(k_{sr}/k_{fr})\beta_1}{\text{Pe}_r \Delta r \tau_j} \right) & R_{s4} &= \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{2} \right) \end{aligned}$$

(4.78)

4.2.2.2 Modelo unidimensional

As equações governantes do modelo de fase sólida contínua unidimensional (4.12) e (4.13) e suas condições de contorno, equações (4.14) a (4.17), foram discretizadas implicitamente no tempo e nos forneceu um sistema de equações para a fase fluida e outro para a fase sólida. Discretizando a equação da fase fluida obtém-se:

• Para $x = 0 \rightarrow i = 1$

$$\begin{aligned} & \left[1 + \left(\frac{\Delta\tau}{\lambda\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau\Gamma}{\lambda} \right) + \left(\frac{\Delta\tau\Gamma_w}{\lambda} \right) \right] T_i^{n+1} \\ & - \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) T_{i+1}^{n+1} \\ & = T_i^n + \left(\frac{\Delta\tau\Gamma}{\lambda} \right) \theta_i^{n+1} + \left[\left(\frac{\Delta\tau}{\lambda\Delta x} \right) + \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \right] T_{i-1}^{n+1} \end{aligned} \quad (4.79)$$

• Para $0 < x < 1 \rightarrow 1 < i < i_{\max}$

$$\begin{aligned} & - \left[\left(\frac{\Delta\tau}{\lambda\Delta x} \right) + \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \right] T_{i-1}^{n+1} \\ & + \left[1 + \left(\frac{\Delta\tau}{\lambda\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau\Gamma}{\lambda} \right) + \left(\frac{\Delta\tau\Gamma_w}{\lambda} \right) \right] T_i^{n+1} \\ & - \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) T_{i+1}^{n+1} \\ & = T_i^n + \left(\frac{\Delta\tau\Gamma}{\lambda} \right) \theta_i^{n+1} \end{aligned} \quad (4.80)$$

• Para $x = 1 \rightarrow i = i_{\max}$

$$\begin{aligned} & - \left[\left(\frac{\Delta\tau}{\lambda\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \right] T_{i-1}^{n+1} \\ & + \left[1 + \left(\frac{\Delta\tau}{\lambda\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau\Gamma}{\lambda} \right) + \left(\frac{\Delta\tau\Gamma_w}{\lambda} \right) \right] T_i^{n+1} \\ & = T_i^n + \left(\frac{\Delta\tau\Gamma}{\lambda} \right) \theta_i^{n+1} \end{aligned} \quad (4.81)$$

Tabela 4.5: Coeficientes do sistema de equações. Fase: fluida. Modelo: Fase Sólida Contínua Unidimensional.

	a_i	b_i	c_i
$x = 0$	0	$1 + C_{f1} + 2C_{f2} + C_{f3} + C_{f4}$	$-C_{f2}$
$0 < x < 1$	$-(C_{f1} + C_{f2})$	$1 + C_{f1} + 2C_{f2} + C_{f3} + C_{f4}$	$-C_{f2}$
$x = 1$	$-(C_{f1} + 2C_{f2})$	$1 + C_{f1} + 2C_{f2} + C_{f3} + C_{f4}$	0

	d_i
$x = 0$	$T_i^n + C_{f3} \theta_i^{n+1} + (C_{f1} + C_{f2})T_i^n -$
$0 < x < 1$	$T_i^n + C_{f3} \theta_i^{n+1}$
$x = 1$	$T_i^n + C_{f3} \theta_i^{n+1}$

onde:

$$\begin{aligned} C_{f1} &= \left(\frac{\Delta\tau}{\lambda\Delta x} \right) & C_{f2} &= \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \\ C_{f3} &= \left(\frac{\Delta\tau}{\lambda} \Gamma \right) & C_{f4} &= \left(\frac{\Delta\tau}{\lambda} \Gamma_w \right) \end{aligned} \quad (4.82)$$

Para a fase sólida, equação (4.13) temos:

- Para $x = 0 \rightarrow i = 1$

$$\begin{aligned} & \left[1 + 2 \left(\frac{\Delta\tau(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta x^2} \right) + \Delta\tau \Gamma \right] \theta_i^{n+1} - 2 \left(\frac{\Delta\tau(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta x^2} \right) \theta_{i+1}^{n+1} \\ &= \theta_i^n + \Delta\tau \Gamma T_i^{n+1} \end{aligned} \quad (4.83)$$

- Para $0 < x < 1 \rightarrow 1 < i < i_{\max}$

$$\begin{aligned} & - \left(\frac{\Delta\tau(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta x^2} \right) \theta_{i-1}^{n+1} + \left[1 + 2 \left(\frac{\Delta\tau(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta x^2} \right) + \Delta\tau \Gamma \right] \theta_i^{n+1} \\ & - \left(\frac{\Delta\tau(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta x^2} \right) \theta_{i+1}^{n+1} = \theta_i^n + \Delta\tau \Gamma T_i^{n+1} \end{aligned} \quad (4.84)$$

- Para $x = 1 \rightarrow i = i_{\max}$

$$\begin{aligned} & - 2 \left(\frac{\Delta\tau(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta x^2} \right) \theta_{i-1}^{n+1} + \left[1 + 2 \left(\frac{\Delta\tau(k_{sx}/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta x^2} \right) + \Delta\tau \Gamma \right] \theta_i^{n+1} \\ &= \theta_i^n + \Delta\tau \Gamma T_i^{n+1} \end{aligned} \quad (4.85)$$

Tabela 4.6: Coeficientes do sistema de equações. Fase: sólida. Modelo: Fase Sólida Contínua Unidimensional.

	a_j	b_j	c_j
$x = 0$	0	$1 + 2C_{s1} + C_{s2}$	$-2C_{s1}$
$0 < x < 1$	$-C_{s1}$	$1 + 2C_{s1} + C_{s2}$	$-C_{s1}$
$x = 1$	$-2C_{s1}$	$1 + 2C_{s1} + C_{s2}$	0

	d_j
$x = 0$	$C_{s2} T_i^{n+1} + \theta_i^n$
$0 < x < 1$	$C_{s2} T_i^{n+1} + \theta_i^n$
$x = 1$	$C_{s2} T_i^{n+1} + \theta_i^n$

onde:

$$C_{s1} = \left(\frac{\Delta\tau(k_{sx}/k_{fx})}{Pe_x \Delta x^2} \right) \quad C_{s2} = \Delta\tau \Gamma \quad (4.86)$$

4.2.2.3 Modelo de Schumann

As equações governantes do modelo de Schumann (4.19) e (4.20) e sua condição de contorno (4.21) foram discretizadas implicitamente e nos forneceu, para a fase fluida a seguinte expressão:

- Para $x = 0 \rightarrow i = 1$

$$\begin{aligned} & \left[1 + \left(\frac{\Delta\tau}{\lambda \Delta x} \right) + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{\lambda} \right) + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma_w}{\lambda} \right) \right] T_i^{n+1} \\ &= T_i^n + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{\lambda} \right) \theta_i^{n+1} + \left(\frac{\Delta\tau}{\lambda \Delta x} \right) T_i^n \end{aligned} \quad (4.87)$$

- Para $0 < x \leq 1 \rightarrow 1 < i \leq i_{\max}$

$$\begin{aligned} & - \left(\frac{\Delta\tau}{\lambda \Delta x} \right) T_{i-1}^{n+1} + \left[1 + \left(\frac{\Delta\tau}{\lambda \Delta x} \right) + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{\lambda} \right) + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma_w}{\lambda} \right) \right] T_i^{n+1} \\ &= T_i^n + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma}{\lambda} \right) \theta_i^{n+1} \end{aligned} \quad (4.88)$$

Tabela 4.7: Coeficientes do sistema de equações. Fase: fluida. Modelo: Schumann.

	a_i	b_i	c_i
$x = 0$	0	$1 + S_{f1} + S_{f2} + S_{f3}$	0
$0 < x \leq 1$	$-S_{f1}$	$1 + S_{f1} + S_{f2} + S_{f3}$	0

	d_i
$x = 0$	$T_i^n + S_{f2} \theta_i^{n+1} + S_{f1} T_i -$
$0 < x \leq 1$	$T_i^n + S_{f2} \theta_i^{n+1}$

onde:

$$S_{f1} = \left(\frac{\Delta \tau}{\lambda \Delta x}\right) \quad S_{f2} = \left(\frac{\Delta \tau \Gamma}{\lambda}\right) \quad S_{f3} = \left(\frac{\Delta \tau \Gamma_w}{\lambda}\right)$$

(4.89)

A equação da fase sólida discretizada fornece:

- Para $0 \leq x \leq 1 \rightarrow 1 \leq i \leq i_{\max}$

$$[1 + \Delta \tau \Gamma] \theta_i^{n+1} = \Delta \tau \Gamma T_i^{n+1} + \theta_i^n$$

(4.90)

A equação (4.90) é válida para todos os pontos dentro do armazenador e pode ser calculada diretamente sem necessidade de resolver um sistema de equações lineares, uma vez que a temperatura da fase fluida T_i^{n+1} pode ser calculada antes de se calcular a temperatura θ_i^{n+1} .

4.2.3 Modelo com Gradiente Térmico no Interior das Partículas

As equações governantes desse modelo (4.23) e (4.24) e suas condições de contorno (4.25) a (4.28) foram discretizadas implicitamente no tempo, o que nos forneceu um sistema de equações algébricas para cada uma das fases. As equações discretizadas para a fase fluida são:

- Para $x = 0 \rightarrow i = 1$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + \left(\frac{\Delta \tau}{\lambda \Delta x} \right) + 2 \left(\frac{\Delta \tau}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) + \left(\frac{\Delta \tau \Gamma}{\lambda} \right) + \left(\frac{\Delta \tau \Gamma_w}{\lambda} \right) \right] T_i^{n+1} \\
 & - \left(\frac{\Delta \tau}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) T_{i+1}^{n+1} \\
 & = \left(\frac{\Delta \tau \Gamma}{\lambda} \right) \vartheta_{i,i_{\max}}^{n+1} + T_i^n + \left[\left(\frac{\Delta \tau}{\lambda \Delta x} \right) + \left(\frac{\Delta \tau}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i-1}^n
 \end{aligned} \tag{4.91}$$

- Para $0 < x < 1 \rightarrow 1 < i < i_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\left(\frac{\Delta \tau}{\lambda \Delta x} \right) + \left(\frac{\Delta \tau}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i-1}^{n+1} \\
 & + \left[1 + \left(\frac{\Delta \tau}{\lambda \Delta x} \right) + 2 \left(\frac{\Delta \tau}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) + \left(\frac{\Delta \tau \Gamma}{\lambda} \right) + \left(\frac{\Delta \tau \Gamma_w}{\lambda} \right) \right] T_i^{n+1} \\
 & - \left(\frac{\Delta \tau}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) T_{i+1}^{n+1} = \left(\frac{\Delta \tau \Gamma}{\lambda} \right) \vartheta_{i,i_{\max}}^{n+1} + T_i^n
 \end{aligned} \tag{4.92}$$

- Para $x = 1 \rightarrow i = i_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\left(\frac{\Delta \tau}{\lambda \Delta x} \right) + 2 \left(\frac{\Delta \tau}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) \right] T_{i-1}^{n+1} \\
 & + \left[1 + \left(\frac{\Delta \tau}{\lambda \Delta x} \right) + 2 \left(\frac{\Delta \tau}{\text{Pe}_x \lambda \Delta x^2} \right) + \left(\frac{\Delta \tau \Gamma}{\lambda} \right) + \left(\frac{\Delta \tau \Gamma_w}{\lambda} \right) \right] T_i^{n+1} \\
 & = \left(\frac{\Delta \tau \Gamma}{\lambda} \right) \vartheta_{i,i_{\max}}^{n+1} + T_i^n
 \end{aligned} \tag{4.93}$$

Tabela 4.8: Coeficientes do sistema de equações. Fase: fluida. Modelo: Gradiente Térmico no Interior da Partícula.

	a_i	b_i	c_i
$x = 0$	0	$1 + G_{f1} + 2G_{f2} + G_{f3} + G_{f4}$	$-G_{f2}$
$0 < x < 1$	$-(G_{f1} + G_{f2})$	$1 + G_{f1} + 2G_{f2} + G_{f3} + G_{f4}$	$-G_{f2}$
$x = 1$	$-(G_{f1} + 2G_{f2})$	$1 + G_{f1} + 2G_{f2} + G_{f3} + G_{f4}$	0

	d_i
$x = 0$	$G_{f3} \vartheta_{i,l_{\max}}^{n+1} + T_i^n + (G_{f1} + G_{f2})T_i -$
$0 < x < 1$	$G_{f3} \vartheta_{i,l_{\max}}^{n+1} + T_i^n$
$x = 1$	$G_{f3} \vartheta_{i,l_{\max}}^{n+1} + T_i^n$

onde:

$$\begin{aligned} G_{f1} &= \left(\frac{\Delta\tau}{\lambda\Delta x} \right) & G_{f2} &= \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \\ G_{f3} &= \left(\frac{\Delta\tau}{\lambda} \Gamma \right) & G_{f4} &= \left(\frac{\Delta\tau}{\lambda} \Gamma_w \right) \end{aligned} \quad (4.94)$$

Para a fase sólida temos:

- Para $\eta = 0 \rightarrow l = 1$

$$\begin{aligned} & \left[1 + 6 \left(\frac{\Delta\tau\beta_0(1-\epsilon)(k_s/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta\eta^2} \right) \right] \vartheta_{i,l}^{n+1} - 6 \left(\frac{\Delta\tau\beta_0(1-\epsilon)(k_s/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta\eta^2} \right) \vartheta_{i,l+1}^{n+1} \\ &= \vartheta_{i,l}^n \end{aligned} \quad (4.95)$$

- Para $0 < \eta < 1 \rightarrow 1 < l < l_{\max}$

$$\begin{aligned} & - \left[\left(\frac{\Delta\tau\beta_0(1-\epsilon)(k_s/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta\eta^2} \right) - \left(\frac{\Delta\tau\beta_0(1-\epsilon)(k_s/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta\eta \eta_l} \right) \right] \vartheta_{i,l-1}^{n+1} \\ & + \left[1 + 2 \left(\frac{\Delta\tau\beta_0(1-\epsilon)(k_s/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta\eta^2} \right) \right] \vartheta_{i,l}^{n+1} \\ & - \left[\left(\frac{\Delta\tau\beta_0(1-\epsilon)(k_s/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta\eta^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau\beta_0(1-\epsilon)(k_s/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta\eta \eta_l} \right) \right] \vartheta_{i,l+1}^{n+1} = \vartheta_{i,l}^n \end{aligned} \quad (4.96)$$

• Para $\eta = 1 \rightarrow l = l_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & - 2 \left(\frac{\Delta\tau\beta_0(1-\epsilon)(k_s/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta\eta^2} \right) \vartheta_{i,l-1}^{n+1} \\
 & + \left[1 + 2 \left(\frac{\Delta\tau\beta_0(1-\epsilon)(k_s/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta\eta^2} \right) + \Delta\eta \text{Bi}_p \left(\frac{\Delta\tau\beta_0(1-\epsilon)(k_s/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta\eta\eta_l} \right) \right] \vartheta_{i,l}^{n+1} \\
 & = \Delta\eta \text{Bi}_p \left[\left(\frac{\Delta\tau\beta_0(1-\epsilon)(k_s/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta\eta^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau\beta_0(1-\epsilon)(k_s/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta\eta\eta_l} \right) \right] T_i^{n+1} \\
 & + \vartheta_{i,l}^n
 \end{aligned} \tag{4.97}$$

Tabela 4.9: Coeficientes do sistema de equações. Fase: sólida. Modelo: Gradiente Térmico no Interior da Partícula.

	a_i	b_i	c_i
$\eta = 0$	0	$1 + 6G_{s1}$	$-6G_{s1}$
$0 < \eta < 1$	$-(G_{s1} + G_{s2})$	$1 + 2G_{s1}$	$-(G_{s1} - G_{s2})$
$\eta = 1$	$-2G_{s1}$	$1 + 2G_{s1} + G_{s3}G_{s2}$	0

	d_i
$\eta = 0$	$\vartheta_{i,l}^n$
$0 < \eta < 1$	$\vartheta_{i,l}^n$
$\eta = 1$	$\vartheta_{i,l}^n + G_{s3}(G_{s1} + G_{s2}) T_i^{n+1}$

onde:

$$G_{s1} = \left(\frac{\Delta\tau\beta_0(1-\epsilon)(k_s/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta\eta^2} \right) \quad G_{s2} = \left(\frac{\Delta\tau\beta_0(1-\epsilon)(k_s/k_{fx})}{\text{Pe}_x\Delta\eta\eta_l} \right) \tag{4.98}$$

$$G_{s3} = \Delta\eta \text{Bi}_p$$

4.2.4 Modelos de Fase Única

4.2.4.1 Modelo bidimensional

A equação que descreve o modelo de fase única bidimensional (4.30) e suas condições de contorno, equações (4.31) a (4.34) foram discretizadas usando ADI. A discretização na direção axial forneceu as seguintes expressões:

• Para $x = 0$ e $r = 0 \rightarrow i = 1$ e $j = 1$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \\
 & - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \phi_{i+1,j}^{n+1/2} \\
 & = \left[1 - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \right] \phi_{i,j}^n + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \phi_{i,j+1}^n \\
 & + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] T_i
 \end{aligned} \tag{4.99}$$

• Para $0 < x < 1$ e $r = 0 \rightarrow 1 < i < i_{\max}$ e $j = 1$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i-1,j}^{n+1/2} \\
 & + \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \\
 & - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \phi_{i+1,j}^{n+1/2} = \left[1 - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \right] \phi_{i,j}^n \\
 & + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \phi_{i,j+1}^n
 \end{aligned} \tag{4.100}$$

• Para $x = 1$ e $r = 0 \rightarrow i = i_{\max}$ e $j = 1$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i-1,j}^{n+1/2} \\
 & + \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \\
 & = \left[1 - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \right] \phi_{i,j}^n + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \phi_{i,j+1}^n \quad (4.101)
 \end{aligned}$$

• Para $x = 0$ e $0 < r < 1 \rightarrow i = 1$ e $1 < j < j_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \\
 & - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \phi_{i+1,j}^{n+1/2} \\
 & = \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r r_j} \right) \right] \phi_{i,j-1}^n \\
 & + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \right] \phi_{i,j}^n \\
 & + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r r_j} \right) \right] \phi_{i,j+1}^n \\
 & + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] T_i \quad (4.102)
 \end{aligned}$$

• Para $0 < x < 1$ e $0 < r < 1 \rightarrow 1 < i < i_{\max}$ e $1 < j < j_{\max}$

$$\begin{aligned}
& - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i-1,j}^{n+1/2} \\
& + \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \\
& - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \phi_{i+1,j}^{n+1/2} \\
& = \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r r_j} \right) \right] \phi_{i,j-1}^n \\
& + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \right] \phi_{i,j}^n \\
& + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r r_j} \right) \right] \phi_{i,j+1}^n
\end{aligned} \tag{4.103}$$

• Para $x = 1$ e $0 < r < 1 \rightarrow i = i_{\max}$ e $1 < j < j_{\max}$

$$\begin{aligned}
& - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i-1,j}^{n+1/2} \\
& + \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \\
& = \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r r_j} \right) \right] \phi_{i,j-1}^n \\
& + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \right] \phi_{i,j}^n \\
& + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r r_j} \right) \right] \phi_{i,j+1}^n
\end{aligned} \tag{4.104}$$

• Para $x = 0$ e $r = 1 \rightarrow i = 1$ e $j = j_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \\
 & - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \phi_{i+1,j}^{n+1/2} \\
 & = 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \phi_{i,j-1}^n \\
 & + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) (1 + \Delta r \text{Bi}_r) \right] \phi_{i,j}^n \\
 & + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] T_{i-}
 \end{aligned} \tag{4.105}$$

• Para $0 < x < 1$ e $r = 1 \rightarrow 1 < i < i_{\max}$ e $j = j_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i-1,j}^{n+1/2} \\
 & + \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \\
 & - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \phi_{i+1,j}^{n+1/2} = 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \phi_{i,j-1}^n \\
 & + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) (1 + \Delta r \text{Bi}_r) \right] \phi_{i,j}^n
 \end{aligned} \tag{4.106}$$

• Para $x = 1$ e $r = 1 \rightarrow i = i_{\max}$ e $j = j_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i-1,j}^{n+1/2} \\
 & + \left[1 + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \\
 & = 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \phi_{i,j-1}^n \\
 & + \left[1 - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) (1 + \Delta r \text{Bi}_r) \right] \phi_{i,j}^n
 \end{aligned} \tag{4.107}$$

Tabela 4.10: Coeficientes do sistema de equações. Direção: axial. Modelo: Fase Única Bidimensional.

	a_i	b_i	c_i
$x = 0$	0	$1 + B_{f1} + 2B_{f2}$	$-B_{f2}$
$0 < x < 1$	$-(B_{f1} + B_{f2})$	$(1 + B_{f1} + 2B_{f2})$	$-B_{f2}$
$x = 1$	$-(B_{f1} + 2B_{f2})$	$(1 + B_{f1} + 2B_{f2})$	0

	d_i
$r = 0$	$(1 - 4B_{f3}) \phi_{i,j}^n + 4B_{f3} \phi_{i,j+1}^n$
$0 < r < 1$	$(B_{f3} - B_{f4}) \phi_{i,j-1}^n + (1 - 2B_{f3}) \phi_{i,j}^n + (B_{f3} + B_{f4}) \phi_{i,j+1}^n$
$r = 1$	$2B_{f3} \phi_{i,j-1}^n + (1 - 2B_{f3}(1 + B_{f5})) \phi_{i,j}^n$

onde:

$$\begin{aligned}
 B_{f1} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) & B_{f2} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \\
 B_{f3} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) & B_{f4} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r r_j} \right)
 \end{aligned} \tag{4.108}$$

$$B_{f5} = \Delta r \text{ Bi}_r$$

O termo $(B_{f1} + B_{f2})T_{i-}$ deve ser acrescentado ao coeficiente d_i sempre que $x = 0$.

Discretizando a equação (4.30) para direção radial, obtemos:

- Para $r = 0$ e $x = 0 \rightarrow j = 1$ e $i = 1$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1} - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \phi_{i,j+1}^{n+1} \\
 &= \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \\
 &+ \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \phi_{i+1,j}^{n+1/2} \\
 &+ \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] T_{i-}
 \end{aligned} \tag{4.109}$$

• Para $0 < r < 1$ e $x = 0 \rightarrow 1 < j < j_{\max}$ e $i = 1$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r r_j} \right) \right] \phi_{i,j-1}^{n+1} \\
 & + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1} \\
 & - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r r_j} \right) \right] \phi_{i,j+1}^{n+1} \\
 & = \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \\
 & + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \phi_{i+1,j}^{n+1/2} + \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] T_i - (4.110)
 \end{aligned}$$

• Para $r = 1$ e $x = 0 \rightarrow j = j_{\max}$ e $i = 1$

$$\begin{aligned}
 & - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \phi_{i,j-1}^{n+1} \\
 & + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) (2 + \Delta r \text{Bi}_r) \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r r_j} \right) \Delta r \text{Bi}_r \right] \phi_{i,j}^n \\
 & = \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \\
 & + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \phi_{i+1,j}^{n+1/2} + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \quad (4.111)
 \end{aligned}$$

• Para $r = 0$ e $0 < x < 1 \rightarrow j = 1$ e $1 < i < i_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1} - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \phi_{i,j+1}^{n+1} \\
 & = \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i-1,j}^{n+1/2} \\
 & + \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \\
 & + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \phi_{i+1,j}^{n+1/2} \quad (4.112)
 \end{aligned}$$

• Para $0 < r < 1$ e $0 < x < 1 \rightarrow 1 < j < j_{\max}$ e $1 < i < i_{\max}$

$$\begin{aligned}
& - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r \tau_j} \right) \right] \phi_{i,j-1}^{n+1} \\
& + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1} \\
& - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r \tau_j} \right) \right] \phi_{i,j+1}^{n+1} \\
& = \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i-1,j}^{n+1/2} \\
& \quad \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \\
& + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \phi_{i+1,j}^{n+1/2} \tag{4.113}
\end{aligned}$$

• Para $r = 1$ e $0 < x < 1 \rightarrow j = j_{\max}$ e $1 < i < i_{\max}$

$$\begin{aligned}
& - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \phi_{i,j-1}^{n+1} \\
& + \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) (2 + \Delta r \text{Bi}_r) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r \tau_j} \right) \Delta r \text{Bi}_r \right] \phi_{i,j}^n \\
& = \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j+1}^{n+1} \\
& + \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \\
& + \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \phi_{i+1,j}^{n+1/2} \tag{4.114}
\end{aligned}$$

• Para $r = 0$ e $x = 1 \rightarrow j = 1$ e $i = i_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1} - 4 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \phi_{i,j+1}^{n+1} \\
 &= \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i-1,j}^{n+1/2} \\
 &+ \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \quad (4.115)
 \end{aligned}$$

• Para $0 < r < 1$ e $x = 1 \rightarrow 1 < j < j_{\max}$ e $i = i_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) - \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r \tau_j} \right) \right] \phi_{i,j-1}^{n+1} \\
 &+ \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1} \\
 &- \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) + \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r \tau_j} \right) \right] \phi_{i,j+1}^{n+1} \\
 &= \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i-1,j}^{n+1/2} \\
 &\left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \quad (4.116)
 \end{aligned}$$

• Para $r = 1$ e $x = 1 \rightarrow j = j_{\max}$ e $i = i_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) \phi_{i,j-1}^{n+1} \\
 &+ \left[1 + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r^2} \right) (2 + \Delta r \text{Bi}_r) \left(\frac{(\Delta\tau/2) \beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta r \tau_j} \right) \Delta r \text{Bi}_r \right] \phi_{i,j}^{n+1} \\
 &= \left[\left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) + 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j+1}^{n+1} \\
 &+ \left[1 - \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) - 2 \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i,j}^{n+1/2} \quad (4.117)
 \end{aligned}$$

Tabela 4.11: Coeficientes do sistema de equações. Direção: radial. Modelo: Fase Única Bidimensional.

	a_j	b_j	c_j
$\tau = 0$	0	$1 + 4B_{f3}$	$-4B_{f3}$
$0 < \tau < 1$	$-(B_{f3} + B_{f4})$	$1 + 2B_{f3}$	$-(B_{f3} + B_{f4})$
$\tau = 1$	$-2B_{f3}$	$1 + 2B_{f3}(2 + B_{f5}) + B_{f4}B_{f5}$	0

	d_j
$x = 0$	$(1 - B_{f1} - 2B_{f2}) \phi_{i,j}^{n+1/2} + B_{f2} \phi_{i+1,j}^{n+1/2} + (B_{f1} + B_{f2})T_{i-}$
$0 < x < 1$	$(B_{f1} + B_{f2}) \phi_{i-1,j}^{n+1/2} + (1 - B_{f1} - 2B_{f2}) \phi_{i,j}^{n+1/2} + B_{f2} \phi_{i+1,j}^{n+1/2}$
$x = 1$	$(B_{f1} + 2B_{f2}) \phi_{i-1,j}^{n+1/2} + (1 - B_{f1} - 2B_{f2}) \phi_{i,j}^{n+1/2}$

onde:

$$\begin{aligned}
 B_{f1} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\Delta x(1+\lambda)} \right) & B_{f2} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \\
 B_{f3} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta\tau^2} \right) & B_{f4} &= \left(\frac{(\Delta\tau/2)\beta_1}{2\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta\tau\tau_j} \right)
 \end{aligned} \tag{4.118}$$

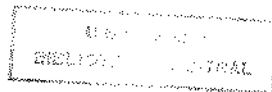
$$B_{f5} = \Delta\tau \text{ Bi}_r$$

4.2.4.2 Modelo unidimensional

A equação que descreve o modelo de fase única unidimensional, equação (4.36) e suas condições de contorno, equações (4.37) e (4.38) foram discretizadas implicitamente. A partir da discretização, obteve-se:

• Para $x = 0 \rightarrow i = 1$

$$\begin{aligned}
 & \left[1 + \left(\frac{\Delta\tau}{(1+\lambda)\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau \Gamma_w}{(1+\lambda)} \right) \right] \phi_i^{n+1} \\
 & - \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \phi_{i+1}^{n+1} = \phi_i^n \\
 & + \left[\left(\frac{\Delta\tau}{(1+\lambda)\Delta x} \right) + \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] T_{i-}
 \end{aligned} \tag{4.119}$$



• Para $0 < x < 1 \rightarrow 1 < i < i_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\left(\frac{\Delta\tau}{(1+\lambda)\Delta x} \right) + \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i-1}^{n+1} \\
 & + \left[1 + \left(\frac{\Delta\tau}{(1+\lambda)\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau}{(1+\lambda)} \frac{\Gamma_w}{\Gamma} \right) \right] \phi_i^{n+1} \\
 & - \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \phi_{i+1}^{n+1} = \phi_i^n
 \end{aligned} \tag{4.120}$$

• Para $x = 1 \rightarrow i = i_{\max}$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\left(\frac{\Delta\tau}{(1+\lambda)\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) \right] \phi_{i-1}^{n+1} \\
 & + \left[1 + \left(\frac{\Delta\tau}{(1+\lambda)\Delta x} \right) + 2 \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_f(1+\lambda)\Delta x^2} \right) + \left(\frac{\Delta\tau}{(1+\lambda)} \frac{\Gamma_w}{\Gamma} \right) \right] \phi_i^{n+1} = \phi_i^n \tag{4.121}
 \end{aligned}$$

Tabela 4.12: Coeficientes do sistema de equações. Modelo: Fase Única Unidimensional.

	a_i	b_i	c_i	d_i
$x = 0$	0	$1 + U_{f1} + 2U_{f2} + U_{f3}$	$-U_{f2}$	$\phi_i^n + (U_{f1} + U_{f2})T_i$
$0 < x < 1$	$-(U_{f1} + U_{f2})$	$1 + U_{f1} + 2U_{f2} + U_{f3}$	$-U_{f2}$	ϕ_i^n
$x = 1$	$-(U_{f1} + 2U_{f2})$	$1 + U_{f1} + 2U_{f2} + U_{f3}$	0	ϕ_i^n

onde:

$$\begin{aligned}
 C_{f1} &= \left(\frac{\Delta\tau}{\lambda\Delta x} \right) & C_{f2} &= \left(\frac{\Delta\tau}{\text{Pe}_x\lambda\Delta x^2} \right) \\
 C_{f3} &= \left(\frac{\Delta\tau}{\lambda} \frac{\Gamma}{\Gamma_w} \right) & C_{f4} &= \left(\frac{\Delta\tau}{\lambda} \frac{\Gamma_w}{\Gamma} \right)
 \end{aligned} \tag{4.122}$$

4.3 Avaliação do Calor Armazenado

O calor armazenado foi calculado a partir da avaliação do calor retido no sólido em cada volume de controle. A figura (4.1) mostra esquematicamente um volume de controle para modelos unidimensionais.

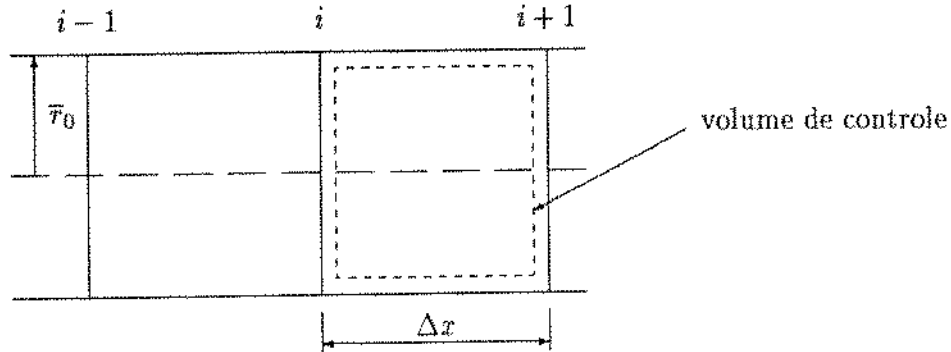


Figura 4.1: Célula para cálculo do calor armazenado usando modelos unidimensionais.

O calor armazenado no sólido desde o instante inicial até um tempo t qualquer, num volume de controle, é dado por:

$$q_i = V_i(1 - \epsilon) \rho_s C_s (\bar{\theta}_{i+1/2}^n - \bar{T}_0) \quad (4.123)$$

onde $\bar{\theta}_{i+1/2}^n$ é a temperatura média do volume de controle e V_i é o volume do volume de controle, dados por:

$$\bar{\theta}_{i+1/2}^n = \frac{1}{2}(\bar{\theta}_i + \bar{\theta}_{i+1}) \quad (4.124)$$

$$V_i = \pi \bar{r}_0^2 \Delta \bar{x} \quad (4.125)$$

O calor total armazenado no sólido ao longo do leito será:

$$q = \sum_{i=1}^{i_{\max}-1} q_i \quad (4.126)$$

O máximo calor possível de ser armazenado no leito será:

$$q_{\max} = V_L(1 - \epsilon) \rho_s C_s (\bar{T}_i - \bar{T}_0) \quad (4.127)$$

onde V_L é o volume total do armazenador dado por:

$$V_L = \pi \bar{r}_0^2 L \quad (4.128)$$

A relação entre o calor armazenado e o máximo calor possível de ser armazenada pode ser conseguida dividindo-se as relações (4.126) e (4.127), assim:

$$\frac{q}{q_{\max}} = \sum_{i=1}^{i_{\max}-1} \frac{q_i}{q_{\max}} = \sum_{i=1}^{i_{\max}-1} \frac{V_i(1-\epsilon) \rho_s C_s (\bar{\theta}_{i+1/2}^n - \bar{T}_0)}{V_L(1-\epsilon) \rho_s C_s (\bar{T}_i - \bar{T}_0)} \quad (4.129)$$

A relação entre os volumes do volume de controle e do armazenador será:

$$\frac{V_i}{V_L} = \frac{\Delta \bar{x}}{L} = \Delta x \quad (4.130)$$

Substituindo as expressões (4.125) e (4.130) na expressão (4.129) e simplificando, obtemos:

$$\frac{q}{q_{\max}} = \Delta x \sum_{i=1}^{i_{\max}-1} \theta_{i+1/2}^n = \frac{\Delta x}{2} \sum_{i=1}^{i_{\max}-1} (\theta_i + \theta_{i+1}) \quad (4.131)$$

No caso do modelo unifásico unidimensional, a temperatura do sólido (θ) é substituída pela temperatura do leito (ϕ).

Para os modelos bidimensional procede-se de maneira semelhante. A figura (4.2) mostra esquematicamente a distribuição dos volumes de controle usados para o cálculo do calor armazenado.

O calor armazenado em cada volume de controle é calculado em função da temperatura média desse volume. A temperatura média do volume de controle será:

$$\begin{aligned} \bar{\theta}_{i+1/2,j+1,2} &= \frac{1}{2} [\bar{\theta}_{i+1/2,j} + \bar{\theta}_{i+1/2,j+1}] \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} (\bar{\theta}_{i,j} + \bar{\theta}_{i+1,j}) + \frac{1}{2} (\bar{\theta}_{i,j+1} + \bar{\theta}_{i+1,j+1}) \right] \\ &= \frac{1}{4} [\bar{\theta}_{i,j} + \bar{\theta}_{i+1,j} + \bar{\theta}_{i,j+1} + \bar{\theta}_{i+1,j+1}] \end{aligned} \quad (4.132)$$

Como não existe gradiente térmico na direção azimutal o volume de controle será um anel como mostrado na figura (4.2) e seu volume será:

$$V_{i,j} = \pi (\bar{r}_{j+1}^2 - \bar{r}_j^2) \Delta \bar{x} \quad (4.133)$$

Assim o calor armazenado por elemento de volume do leito será:

$$q_{i,j} = V_{i,j} (1-\epsilon) \rho_s C_s (\bar{\theta}_{i+1/2,j+1/2} - \bar{T}_0) \quad (4.134)$$

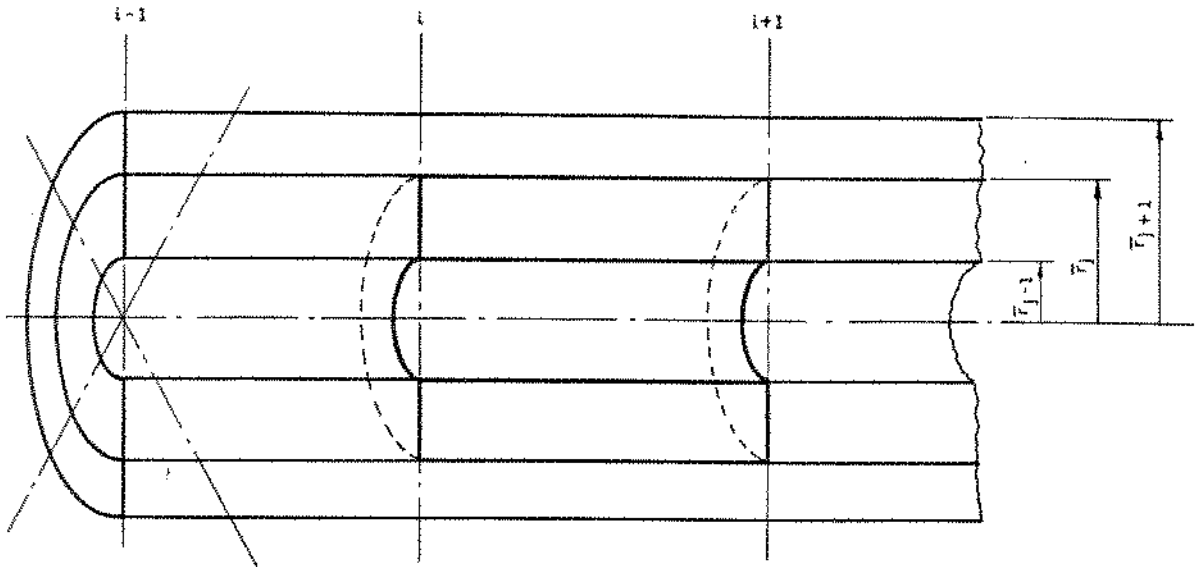


Figura 4.2: Célula para cálculo do calor armazenado usando modelos bidimensionais.

e o calor total armazenado no leito será:

$$q = (1 - \epsilon) \rho_s C_s \sum_{i=1}^{i_{\max}-1} \sum_{j=1}^{j_{\max}-1} V_{i,j} (\bar{\theta}_{i+1/2,j+1/2}) \quad (4.135)$$

O máximo calor possível de ser armazenado pelo leito será:

$$q_{\max} = V_L (1 - \epsilon) \rho_s C_s (\bar{T}_i - \bar{T}_0) \quad (4.136)$$

onde

$$V_L = \pi \bar{r}_0^2 L \quad (4.137)$$

A relação entre os volumes de cada elemento e o volume total do leito é:

$$\frac{V_{i,j}}{V_L} = \frac{(\bar{r}_{j+1}^2 - \bar{r}_j^2) \Delta \bar{x}}{\bar{r}_0^2 L} = (r_{j+1}^2 - r_j^2) \Delta x \quad (4.138)$$

A relação entre o calor armazenado e o máximo calor possível de ser armazenado será:

$$\begin{aligned} \frac{q}{q_{\max}} &= \frac{(1 - \epsilon) \rho_s C_s}{(1 - \epsilon) \rho_s C_s} \sum_{i=1}^{i_{\max}-1} \sum_{j=1}^{j_{\max}-1} \frac{V_{i,j}}{V_L} \frac{\bar{\theta}_{i+1/2,j+1/2} - \bar{T}_0}{\bar{T}_i - \bar{T}_0} \\ &= \Delta x \sum_{i=1}^{i_{\max}-1} \sum_{j=1}^{j_{\max}-1} (r_{j+1}^2 - r_j^2) \theta_{i+1/2,j+1/2} \end{aligned} \quad (4.139)$$

ou

$$\frac{q}{q_{\max}} = \frac{\Delta x}{4} \sum_{i=1}^{i_{\max}-1} \sum_{j=1}^{j_{\max}-1} (r_{j+1}^2 - r_j^2) [\theta_{i,j} + \theta_{i+1,j} + \theta_{i,j+1} + \theta_{i+1,j+1}] \quad (4.140)$$

Para o modelo com gradiente térmico nas partículas, o cálculo do calor armazenado será feito por partícula. Desta maneira, para cada partícula, temos:

$$q_p = \sum_{l=1}^{l_{\max}-1} V_l \rho_s C_s (\bar{\theta}_{i+1/2,l+1/2} - \bar{T}_0) \quad (4.141)$$

onde V_l é o volume das l -ésima capa da partícula (4.3) e $\bar{\theta}_{i+1/2,l+1/2}$ é a sua temperatura média. A temperatura média de cada capa da partícula será:

$$\bar{\theta}_{i,l+1/2} = \frac{1}{2} [\bar{\theta}_{i,l} + \bar{\theta}_{i,l+1}] \quad (4.142)$$

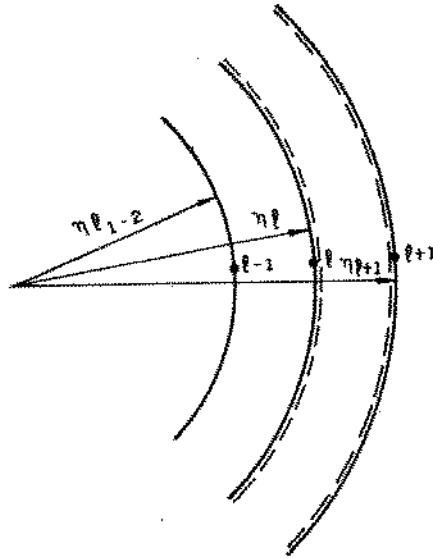


Figura 4.3: Volume de controle para modelo com gradiente térmico no interior da partícula.

A temperatura média da capa das partículas entre duas secções, figura (4.3), será:

$$\bar{\theta}_{i+1/2,l+1/2} = \frac{1}{4} [\bar{\theta}_{i,l} + \bar{\theta}_{i+1,l} + \bar{\theta}_{i,l+1} + \bar{\theta}_{i+1,l+1}] \quad (4.143)$$

O número de partículas em cada secção do leito será:

$$n_p = \frac{V_s}{V_p} = \frac{3 \bar{r}_0^2 \Delta \bar{x} (1 - \epsilon)}{4 \bar{\eta}_0^3} \quad (4.144)$$

Assim o calor armazenado entre cada secção do leito será:

$$q_i = n_p q_p = \pi (1 - \epsilon) \rho_s C_s \bar{r}_0^2 \Delta \bar{x} \sum_{l=1}^{l_{\max}} \left[\frac{\bar{\eta}_{l+1}^3}{\bar{\eta}_0^3} - \frac{\bar{\eta}_l^3}{\bar{\eta}_0^3} \right] (\bar{\theta}_{i+1/2, l+1/2} - \bar{T}_0) \quad (4.145)$$

O calor total armazenado no leito será:

$$q = \sum_{i=1}^{i_{\max}-1} q_i \quad (4.146)$$

O máximo calor possível de ser armazenado pelo leito será:

$$q_{\max} = \pi (1 - \epsilon) \bar{r}_0 L \rho_s C_s (\bar{T}_{i_{\max}} - \bar{T}_0) \quad (4.147)$$

A relação entre o calor armazenado e o máximo calor possível de ser armazenado pode ser calculada usando as expressões (4.146) e (4.147) combinada com a expressão (4.145). Desta maneira chega-se a:

$$\frac{q}{q_{\max}} = \Delta x \sum_{i=1}^{i_{\max}-1} \sum_{l=1}^{l_{\max}-1} [\eta_{l+1}^3 - \eta_l^3] (\theta_{i+1/2, l+1/2}) \quad (4.148)$$

$$= \frac{\Delta x}{4} \sum_{i=1}^{i_{\max}-1} \sum_{l=1}^{l_{\max}-1} [\eta_{l+1}^3 - \eta_l^3] (\theta_{i,l} + \theta_{i+1,l} + \theta_{i,l+1} + \theta_{i+1,l+1}) \quad (4.149)$$

Capítulo 5

Discussão dos Resultados

As equações discretizadas foram implementadas em programas computacionais escritos em FORTRAN e foram testados para escolha correta dos parâmetros de simulação. Para simulação dos modelos foi escolhido dois fluidos de trabalho: ar e água, e dois materiais de armazenamento: pedras e aço. As propriedades de transporte dos fluidos de trabalho e dos sólidos foram avaliadas a temperatura de 50°C e seus valores estão mostrados na tabela (5.1). O leito usado na simulação tem comprimento $L = 1$ m e raio $\bar{r}_0 = 0,3$ m.

Tabela 5.1: Propriedades dos materiais e fluidos usados nas simulações.

Propriedades	Material			
	água	ar	aço	pedra
massa específica (kg/m ³)	988,18	1,0943	7833	2560
calor específico (J/kg K)	4175	1007,23	465	960
condutividade térmica (W/m K)	0,645	0,0280	182	0,48
viscosidade absoluta (Pa s)	$5,522 \times 10^{-4}$	$1,9725 \times 10^{-5}$	—	—

Baseado nesses parâmetros foi possível determinar o número de divisões axial, radial e no interior das partículas que seriam necessários para que os resultados da simulação tivessem consistência. Assim foi determinado que 30 divisões na direção axial, 10 divisões na direção radial e 15 divisões no interior das partículas, associadas a um incremento de tempo adimensional $\Delta\tau = 1 \times 10^{-3}$ seriam suficientes para uma precisão nos resultados de 1×10^{-4} .

Tabela 5.2: Tempo de CPU para os programas dos diversos modelos usados na simulação.

Modelo	Tempo de CPU (segundos)
Fase única unidimensional	7,1
Schumann	29,6
Fase sólida contínua unidimensional	51,6
Fase única bidimensional	141,5
Gradiente térmico no interior da partícula	574,6
Fase sólida contínua bidimensional	1277,7

Fluido de tabalho: água.
Material de armazenamento: pedras.
Computador: SPARCstation 1+, com FPU Weitec 3170 - 25,0 MHz.
Tolerância de cálculo: 1×10^{-10}

Usando esses valores, os programas foram rodados e tendo as mesmas condições iniciais e as mesmas condições de parada foi possível avaliar o tempo de CPU necessário para executar cada um dos programas. Esse tempo está mostrado na tabela (5.2).

5.1 Avaliação dos Resultados Fornecidos pelos Modelos em Condições de Operação

- Os fatores de influência na performance do leito armazenador são:
- 1. tamanho da partícula;
 - 2. relação altura/diâmetro do leito (β);
 - 3. variação do fluxo mássico;
 - 4. fluido de trabalho;
 - 5. material de armazenamento;
 - 6. variação da temperaturatura de entrada;

7. perdas pelas paredes;
8. fração de vazios.

Cada um desses parâmetros foi analisado separadamente de forma a permitir que seu efeito fosse destacado dos demais.

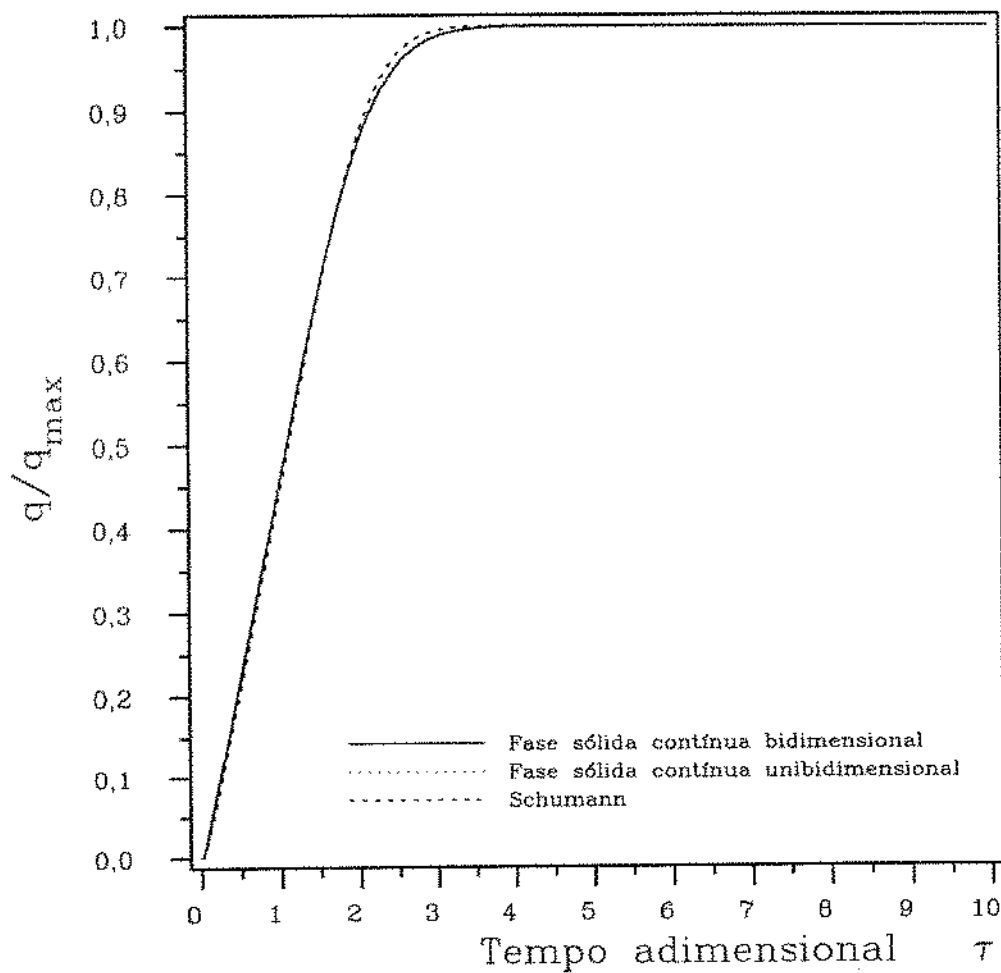
Os modelos foram agrupados em três categorias distintas. O primeiro grupo engloba os modelos de fase sólida contínua uni e bidimensional e o modelo de Schumann, figura (5.1). O segundo grupo contém os modelos de fase única uni e bidimensional, figura (5.1). O terceiro grupo contém o modelo com gradiente térmico no interior das partículas, figura (5.2).

A razão de agrupar os modelos em três grupos distintos deve-se a semelhança dos resultados fornecidos por eles. Desta maneira apenas um modelo de cada grupo será utilizado nas comparações. Em alguns casos, quando os resultados dos diversos modelos não são semelhantes, todos os resultados são apresentados.

5.1.1 Variação do diâmetro da partícula

A influência do diâmetro da partícula que compõe o leito, no desempenho do armazenador pode ser vista nas figuras (5.3) a (5.5).

Para os modelos onde o gradiente térmico no interior das partículas é desconsiderado, nota-se que a influência da variação do diâmetro da partícula é menor do que a variação apresentada pelo modelo que considera o gradiente térmico no interior da partícula. Para vazão mássica e fração de vazios (ϵ) constantes, o aumento do diâmetro da partícula provoca uma diminuição da perda de carga, uma vez que ela é inversamente proporcional ao número de Reynolds baseado no diâmetro da partícula (Re_p) e um aumento do número de Nusselt (Nu_p). Além do aumento do número de Nusselt haverá um aumento da superfície de troca de calor por unidade de volume (a_p), o que aumentará a troca de calor fluido/partícula. O aumento do número de Nusselt não é muito grande (passa de 14,9 para partícula com $d_p = 25$ mm, para 19,7 para partículas com $d_p = 50$ mm). Além disso o volume útil de material sólido no leito é aumentado com o aumento no diâmetro da partícula. Apesar do aumento da taxa de troca de calor fluido/partícula a relação q/q_{max} não apresentará diferença significativa com a variação do diâmetro da partícula, a menos que seja considerado o gradiente térmico no interior das partículas que tende a acentuar com o aumento do diâmetro. Como o calor trocado entre o fluido e a partícula depende do gradiente térmico interior das partículas, as partículas de maiores diâmetro armazenarão



caption Modelos de fase sólida contínua uni e bidimensional e modelo de Schumann.

Fluido de trabalho: água. Material: pedra. $d_p = 25$ mm.

menos calor, que as partículas com diâmetros menores em relação ao máximo calor que elas podem armazenar.

Pode-se concluir que para partícula de diâmetros relativamente grandes, o gradiente térmico no seu interior pode ter influência significativa e deve ser considerado sempre que se desejar um resultado de melhor qualidade.

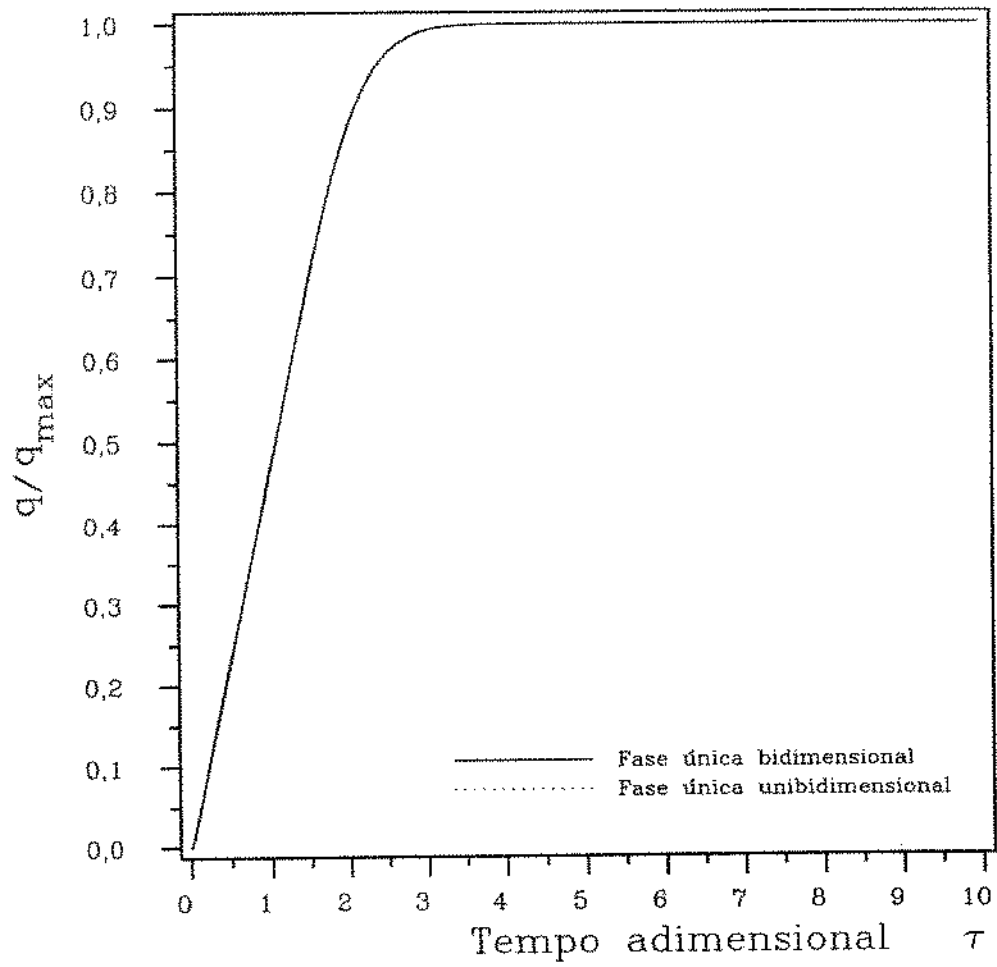


Figura 5.1: Modelos de fase única uni e bidimensional. Fluido de trabalho: água. Material: pedra. $d_p = 25$ mm.

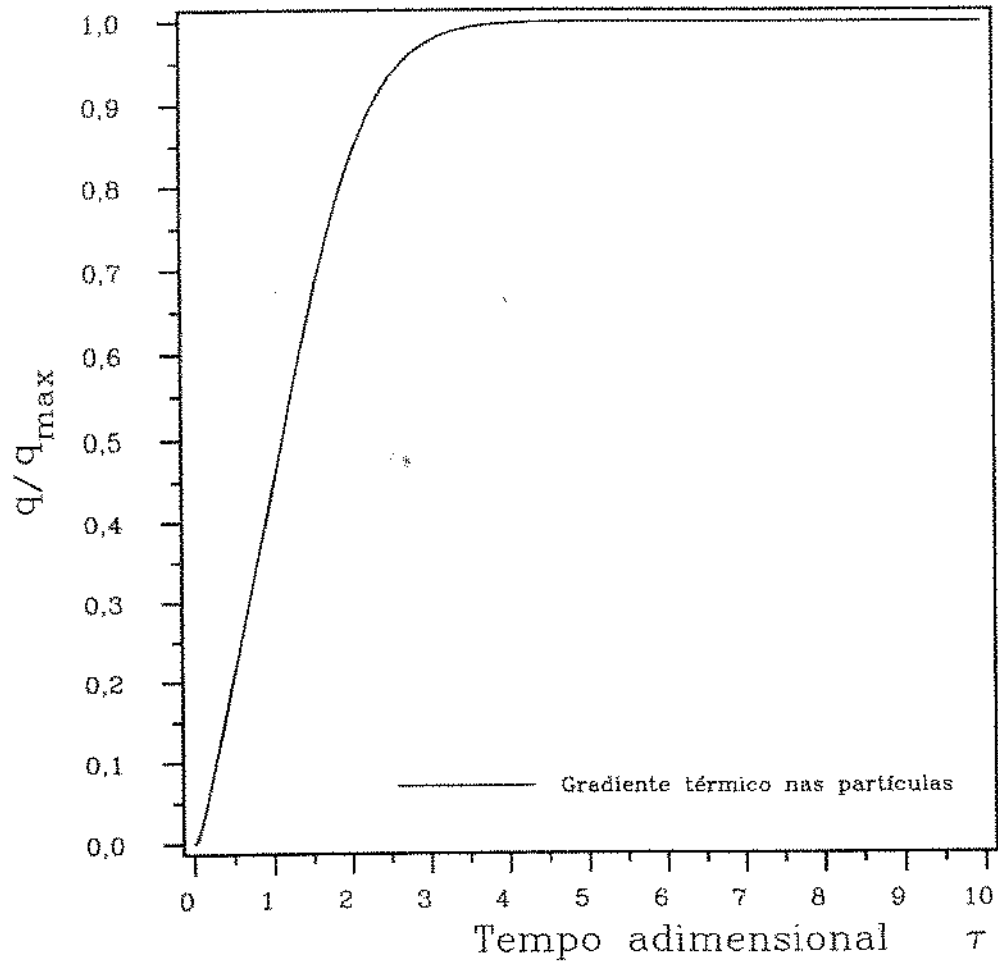


Figura 5.2: Modelo com gradiente térmico no interior das partículas. Fluido de trabalho: água. Material: pedra. $d_p = 25$ mm.

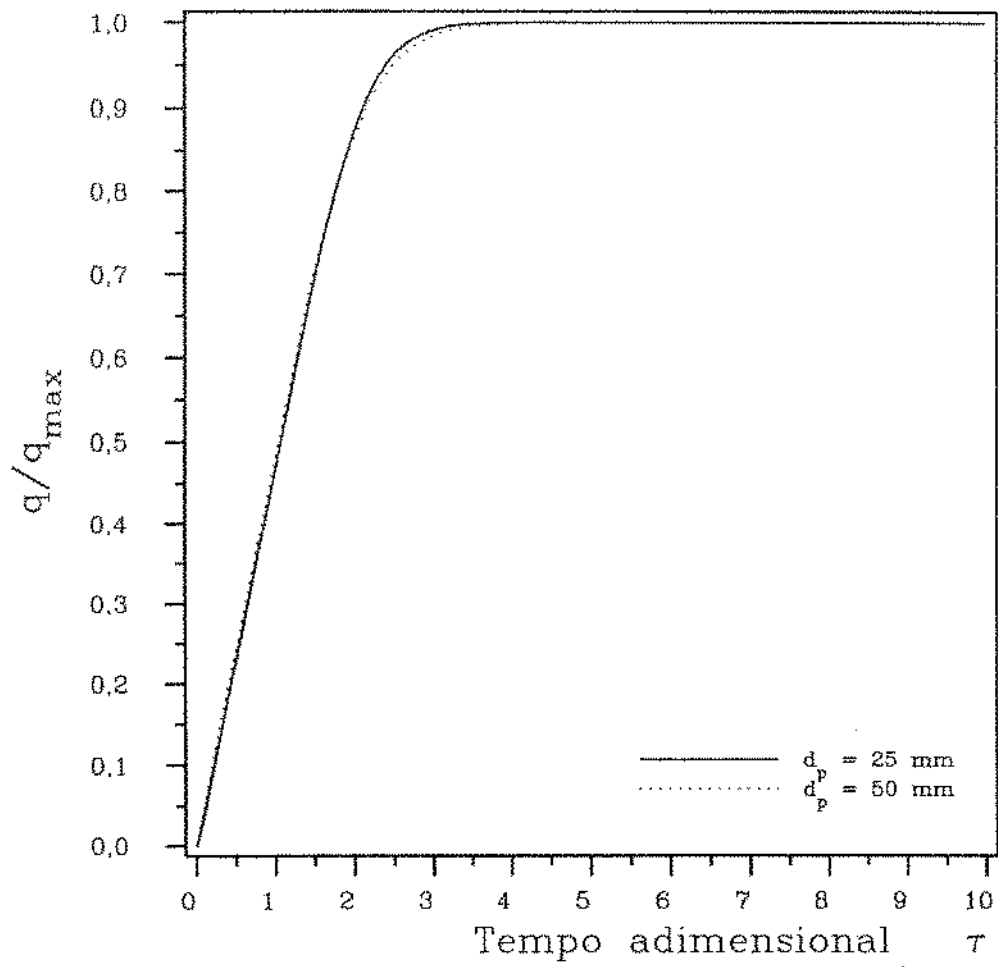


Figura 5.3: Variação do calor armazenado com o diâmetro da partícula. Modelo: fase única unidimensional. Fluido de trabalho: água, material: pedra.

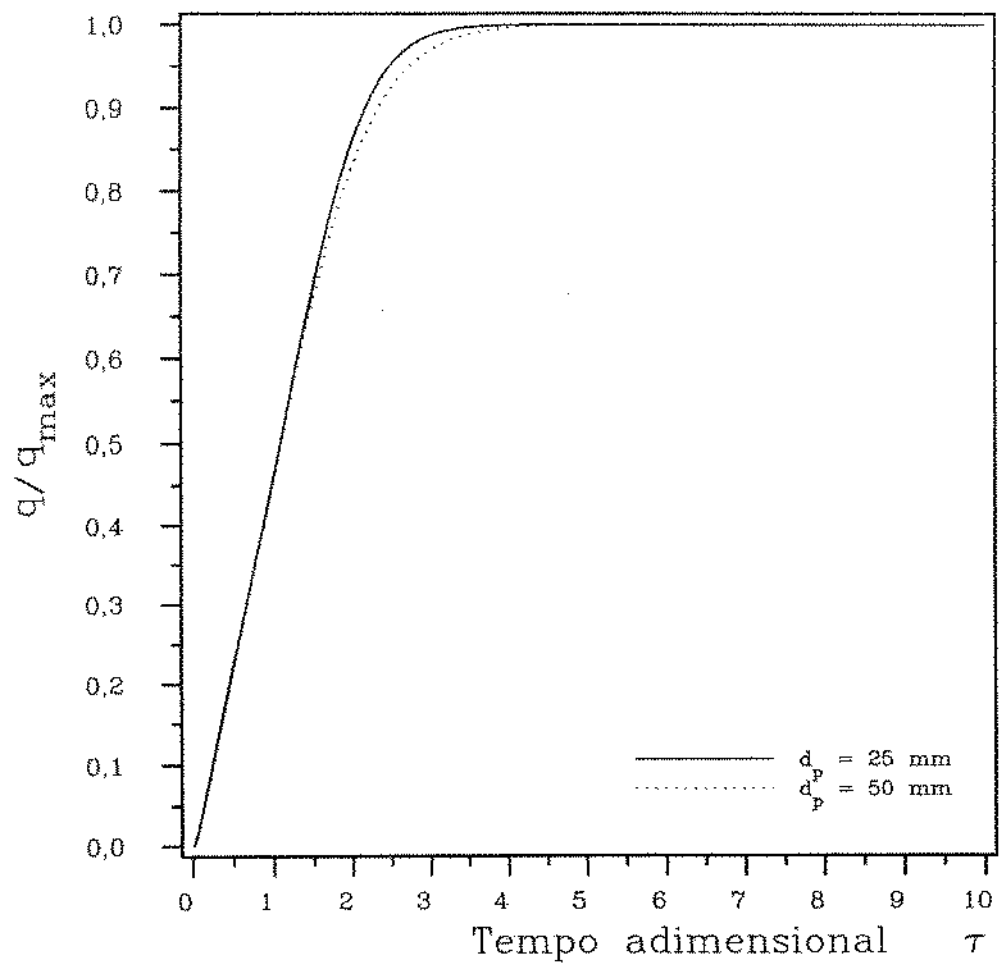


Figura 5.4: Variação do calor armazenado com o diâmetro da partícula. Modelo: fase sólida contínua bidimensional. Fluido de trabalho: água, material: pedra.

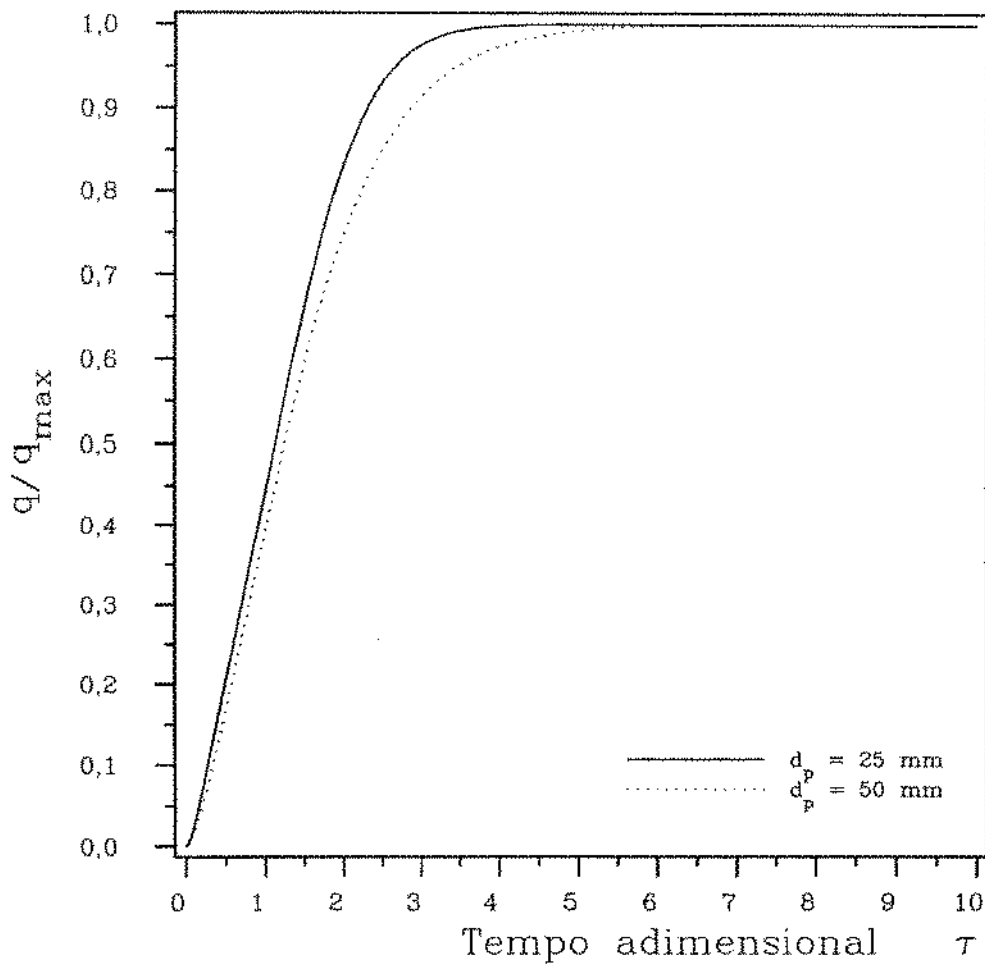


Figura 5.5: Variação do calor armazenado com o diâmetro da partícula. Modelo: gradiente térmico no interior das partículas. Fluido de trabalho: água, material: pedra.

5.1.2 Relação altura/diâmetro do leito (β)

A alteração do parâmetro β , para um mesmo armazenador, causa mudança na perda de carga do fluxo de fluido que atravessa o leito. A sua influência na razão de calor armazenado e na temperatura de saída são bastantes pequenas, como pode ser visto nas figuras (5.10) e (5.11) e nas figuras (5.6) e (5.7). Nas figuras (5.6) e (5.7), pode ser visto a variação do calor armazenado com o tempo, quando a temperatura de entrada varia em forma de degrau e existe perda de calor pelas paredes. As variações apresentadas são suficientemente pequenas para serem desprezadas.

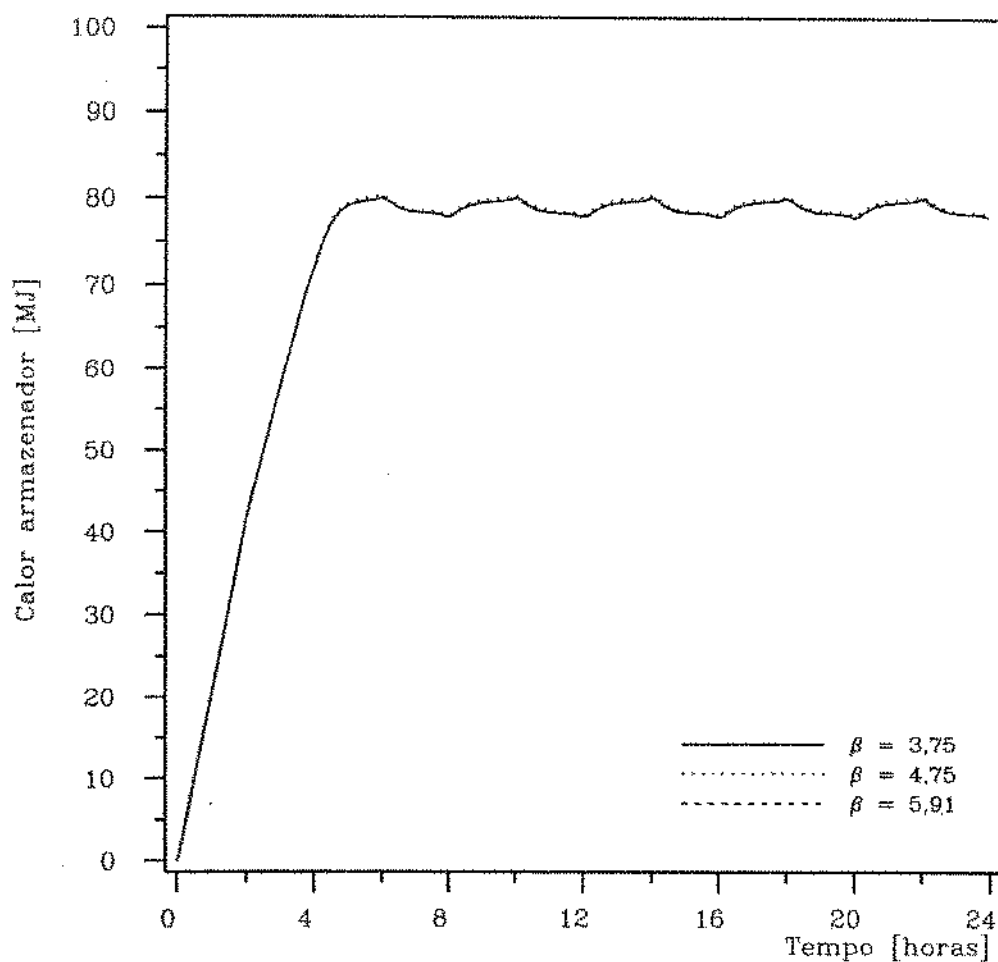


Figura 5.6: Comparação entre o calor armazenado para diversos β . Modelo: Schumann. Fluido de trabalho: água. Material: pedra.

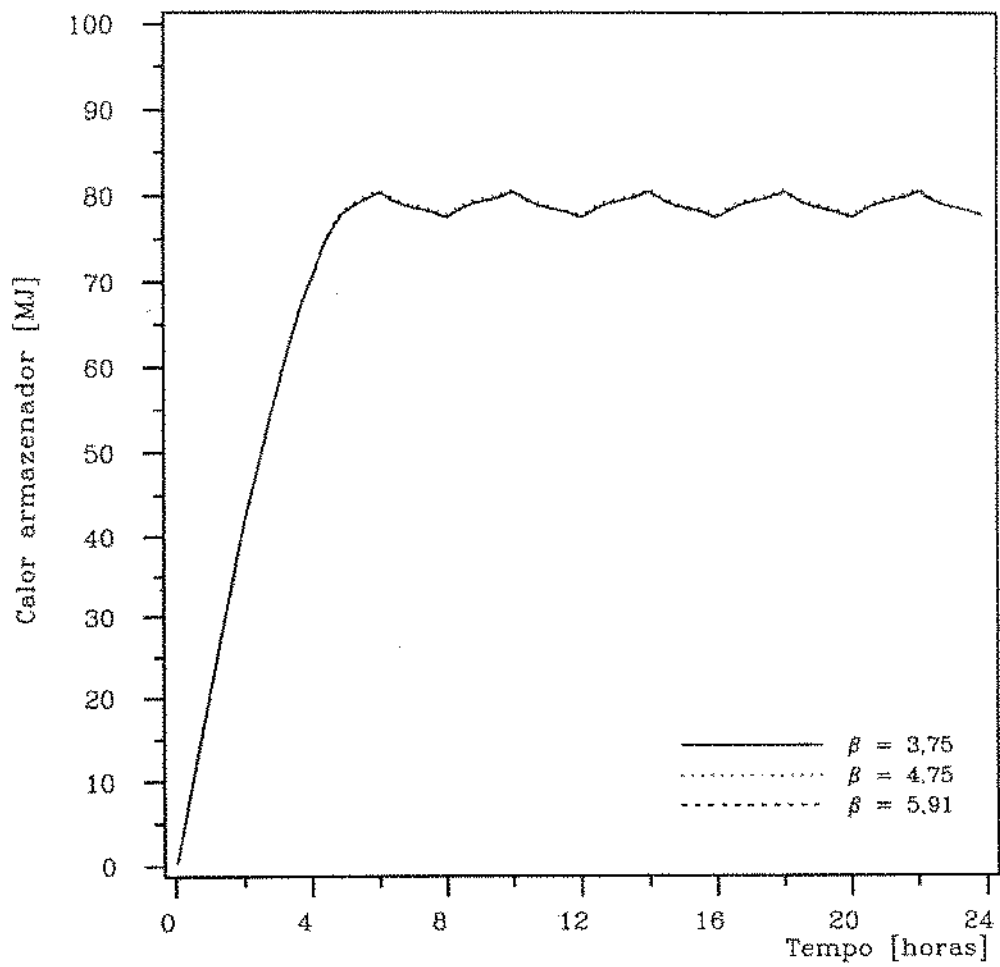


Figura 5.7: Comparação entre o calor armazenado para diversos β . Modelo: gradiente térmico no interior da partícula. Fluido de trabalho: água. Material: pedra.

5.1.3 Variação do fluxo mássico

A variação do fluxo mássico na entrada do armazenador ocasiona uma variação na energia transportada pelo fluido para o armazenador, e uma variação no número de Reynolds do escoamento. A variação do número de Reynolds ocasiona variação no número de Nusselt e consequentemente variação no coeficiente de película fluido/partícula e fluido/parede. As figuras (5.8) a (5.10) mostram a influência da variação de massa no calor armazenado e na temperatura de saída do fluido. Nessas figuras podemos observar que a inclinação da curva do calor armazenado e da temperatura de saída mudam sensivelmente quando o fluxo mássico é modificado. Quando a capacidade térmica do fluido é muito menor que a capacidade térmica de sólido ($\lambda \ll 1$), as mudanças são bem mais acentuadas, como pode ser visto nas figuras (5.11) a (5.13). Os valores de λ usados na simulação foram:

$$\frac{\text{Água}}{\text{Pedra}} = 1,12 \quad \frac{\text{Água}}{\text{Aço}} = 0,76$$

$$\frac{\text{Ar}}{\text{Pedra}} = 3 \times 10^{-4} \quad \frac{\text{Ar}}{\text{Aço}} = 2, \times 10^{-4}$$

As perdas pelas paredes do armazenador começam a ter grande importância quando a relação de capacidade térmica do fluido e do sólido é pequena.

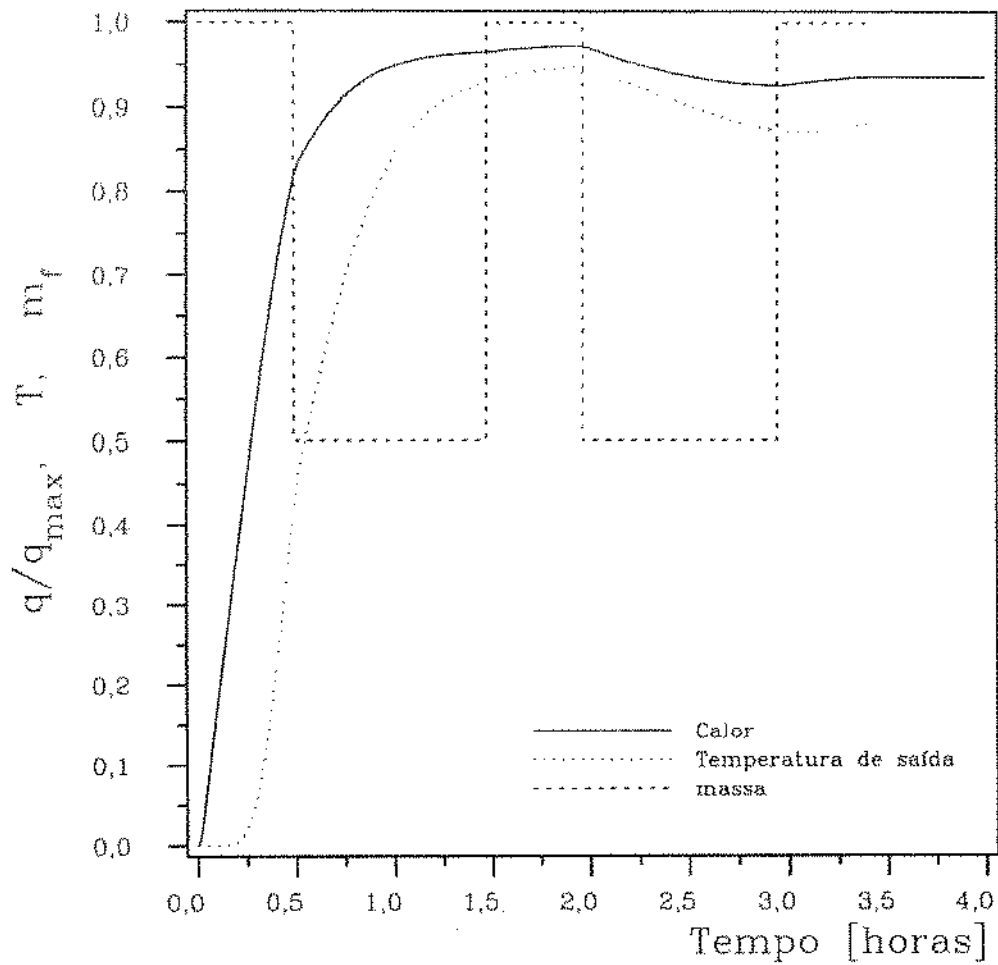


Figura 5.8: Variação do calor armazenado e da temperatura de saída do fluido, devido a variação do fluxo mássico na entrada do armazenador. Modelo: fase sólida contínua bidimensional. Fluido de trabalho: água, material: pedra.

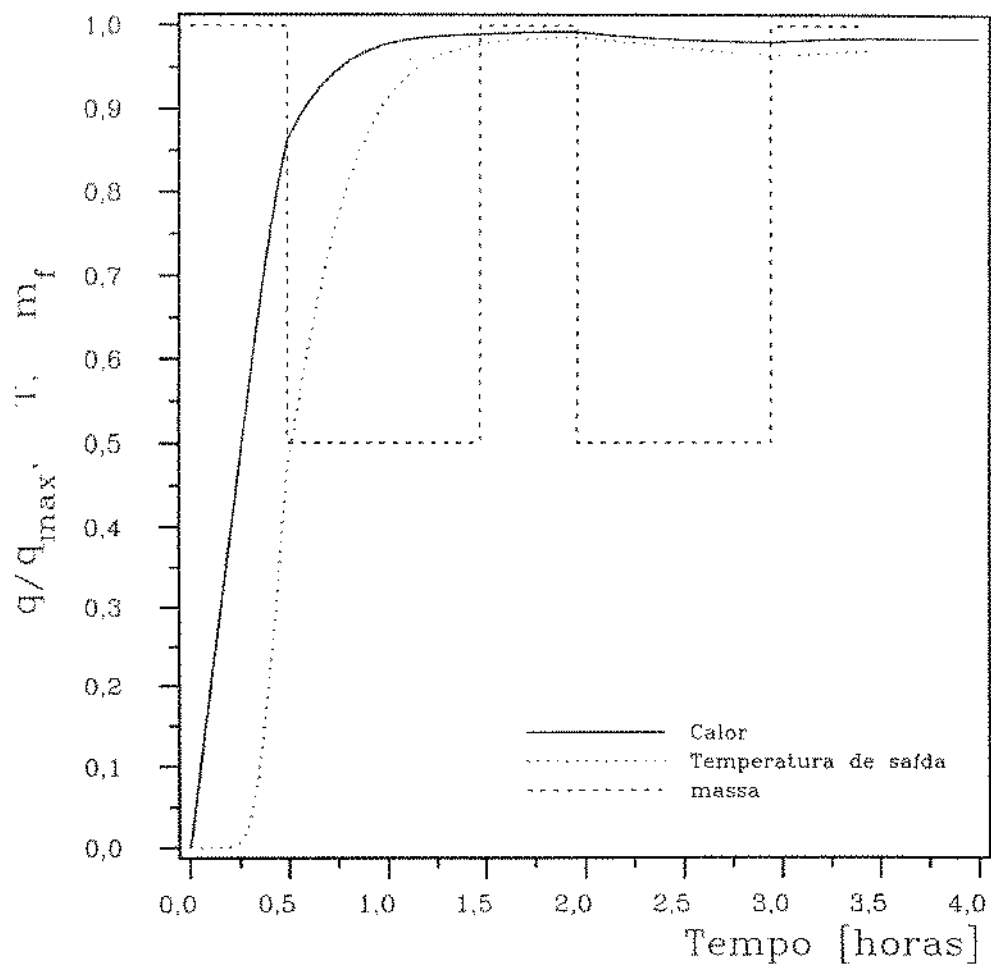


Figura 5.9: Variação do calor armazenado e da temperatura de saída do fluido, devido a variação do fluxo mássico na entrada do armazenador. Modelo: fase única unidimensional. Fluido de trabalho: água, material: pedra.

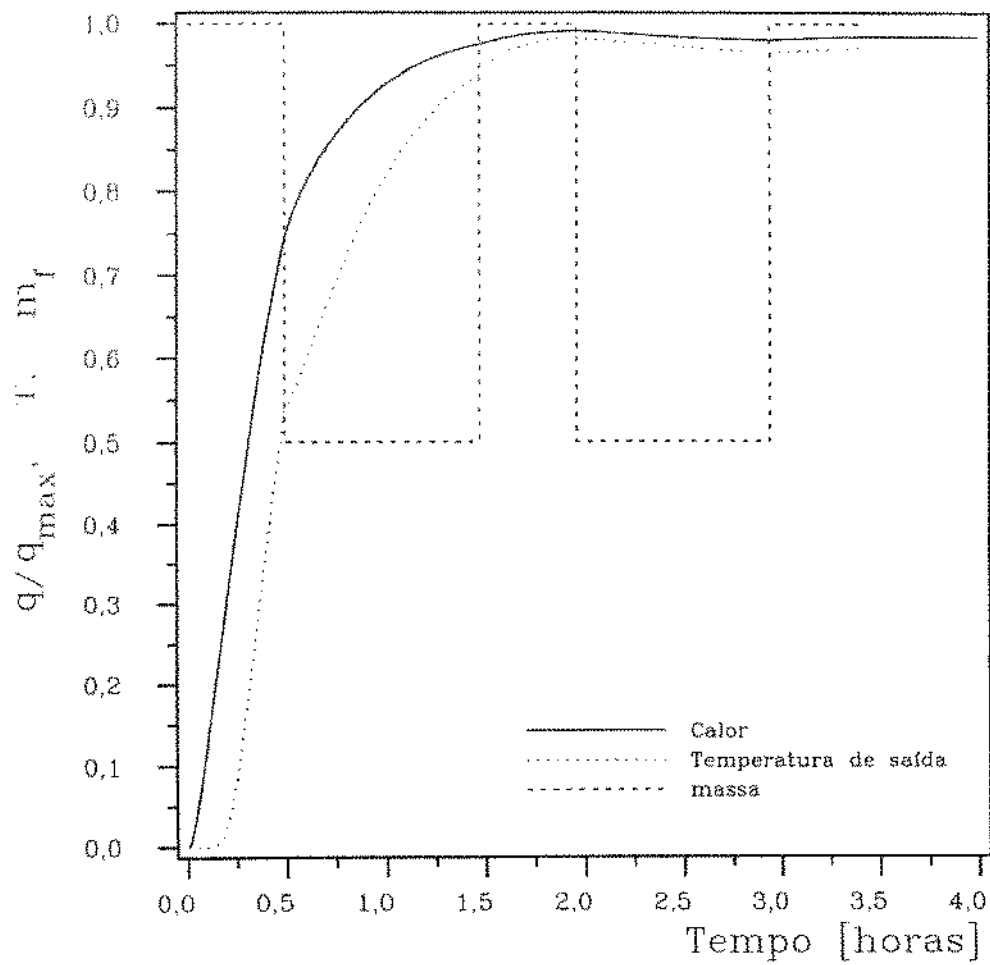


Figura 5.10: Variação do calor armazenado e da temperatura de saída do fluido, devido a variação do fluxo mássico na entrada do armazenador. Modelo: gradiente térmico no interior das partículas. Fluido de trabalho: água, material: pedra.

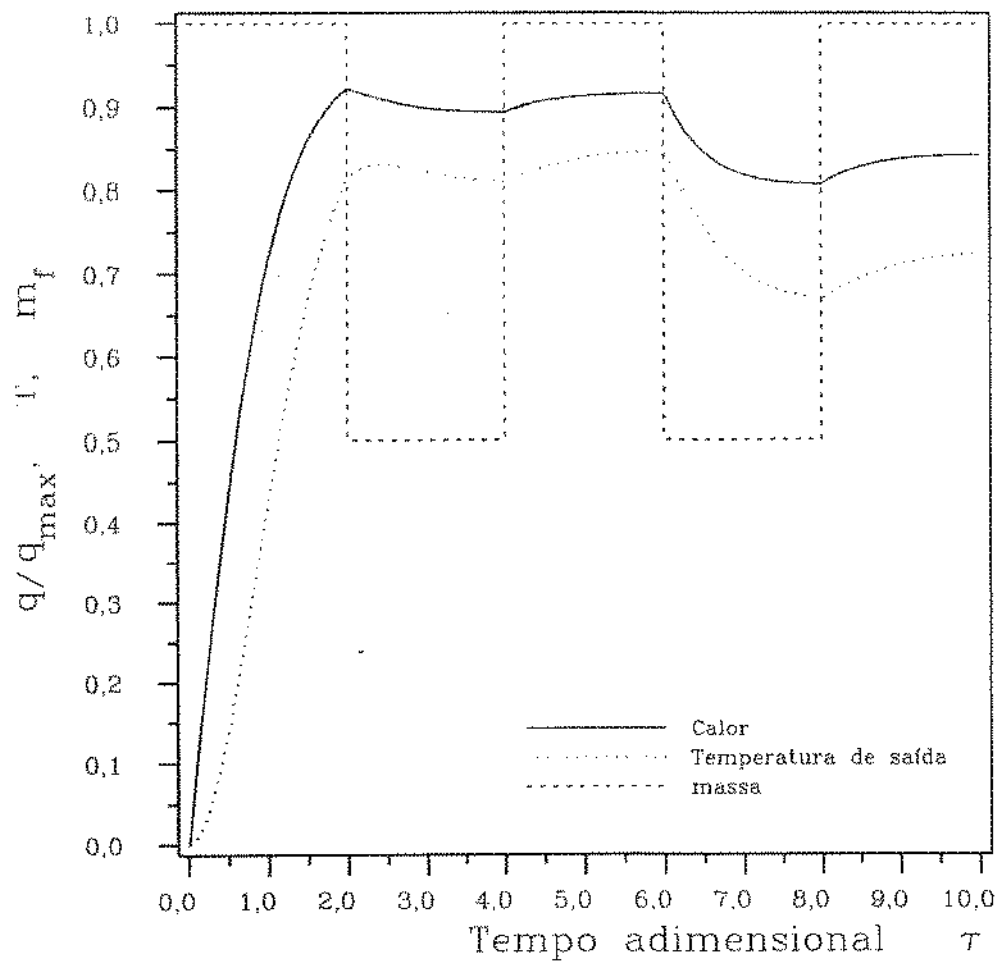


Figura 5.11: Variação do calor armazenado e da temperatura de saída do fluido, devido a variação do fluxo mássico na entrada do armazenador. Modelo: fase sólida contínua bidimensional. Fluido de trabalho: ar, material: pedra.

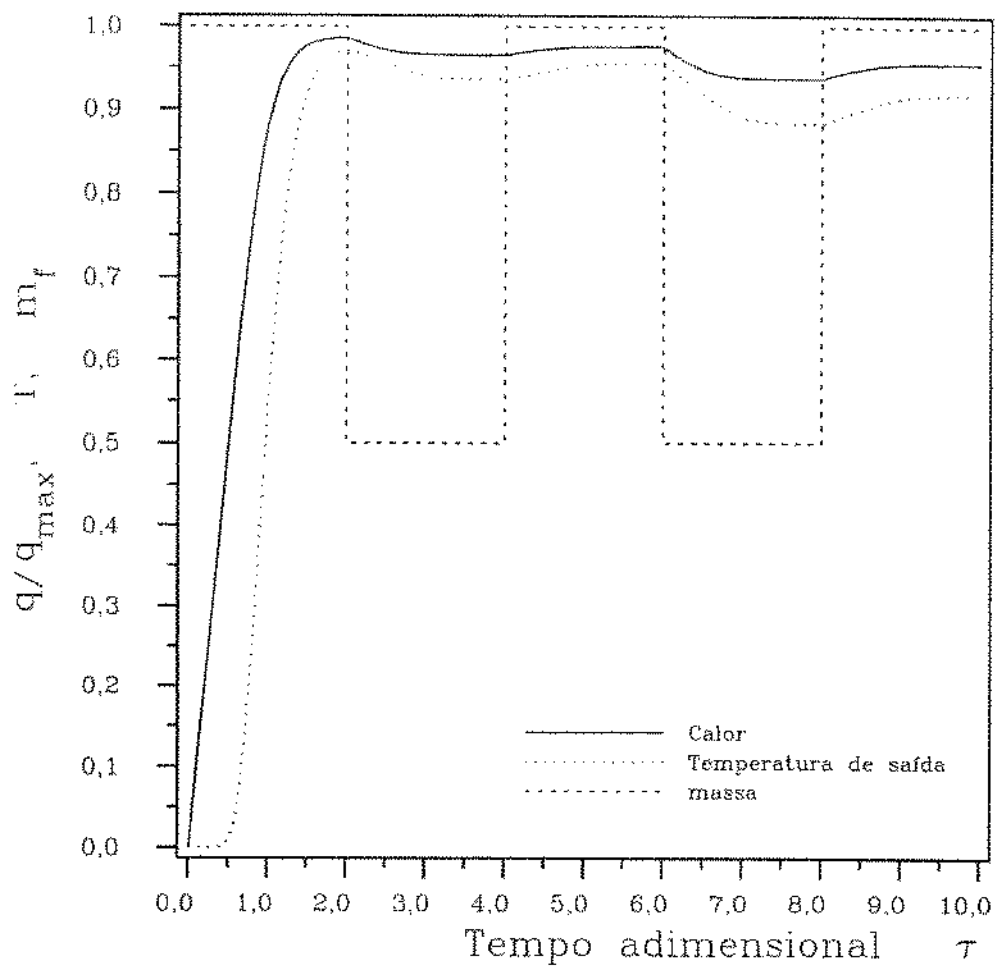


Figura 5.12: Variação do calor armazenado e da temperatura de saída do fluido, devido a variação do fluxo mássico na entrada do armazenador. Modelo: fase única unidimensional. Fluido de trabalho: ar, material: pedra.

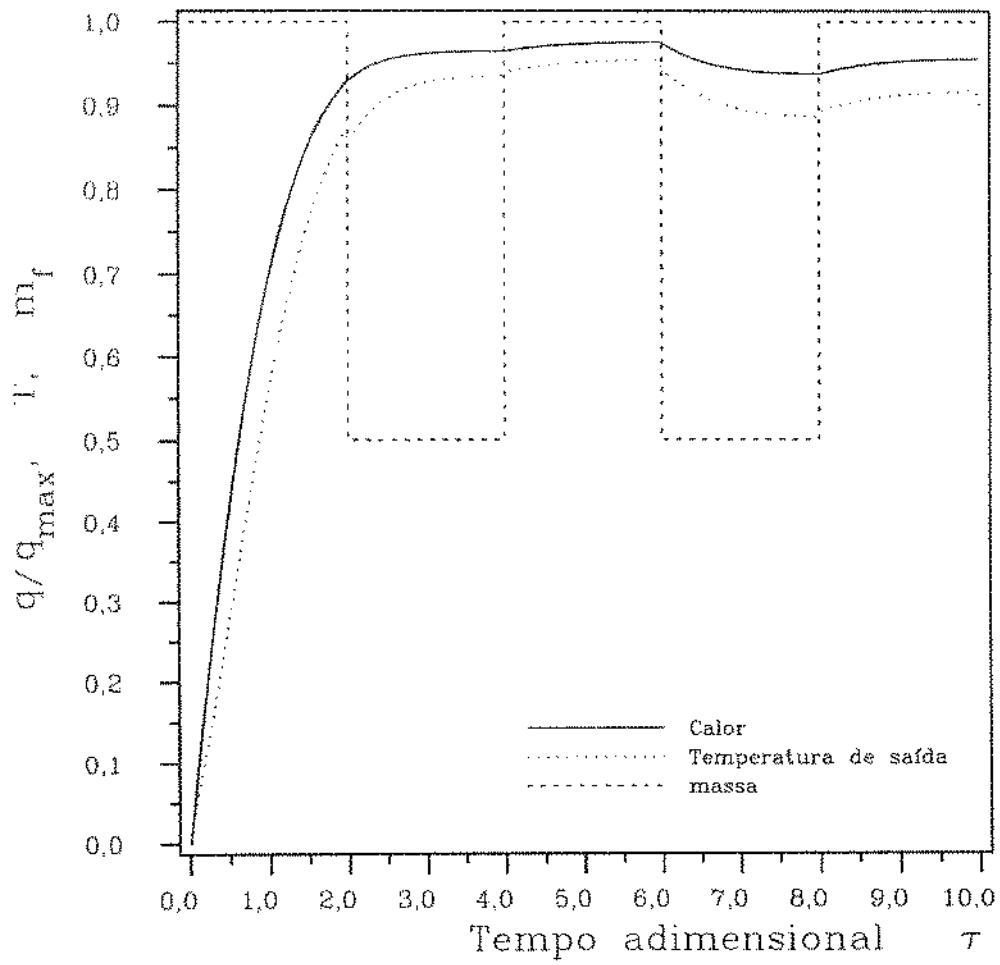


Figura 5.13: Variação do calor armazenado e da temperatura de saída do fluido, devido a variação do fluxo mássico na entrada do armazenador. Modelo: gradiente térmico no interior das partículas. Fluido de trabalho: ar, material: pedra.

5.1.4 Fluido de trabalho

O fluido de trabalho determina a quantidade de energia por unidade de massa de fluido que entra no armazenador. Fluidos que possuem um calor específico menor transportam menos energia, portanto, o tempo de carregamento do armazenador será maior. A figura (5.14) mostra a comparação entre um armazenador com leito de esferas de aço operando com ar e água, separadamente, com o mesmo fluxo mássico. A curva mostra que o tempo de carregamento quando o fluido de trabalho é ar é maior que quando ele opera com água.

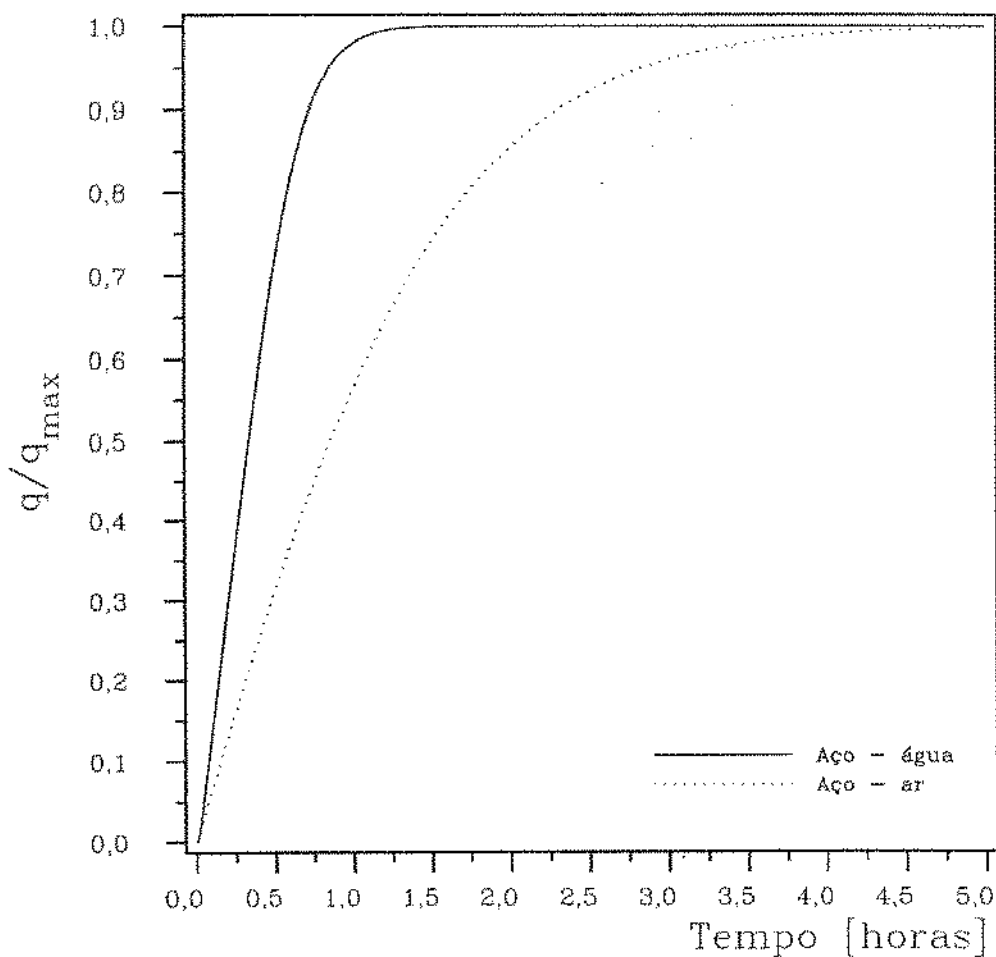


Figura 5.14: Comparação entre o calor armazenado para um armazenador operando com ar e água. Modelo: gradiente térmico no interior da partícula. Fluido de trabalho: ar/água. Material: aço.

5.1.5 Material de armazenamento

O material que compõe o leito do armazenador determina a quantidade de calor possível de ser armazenada por unidade de volume. Além disso a condutividade térmica do material de armazenamento determina o tempo de armazenamento, assumindo que o armazenador e o fluxo mássico são os mesmos. Para o armazenador com leito de pedras, o tempo de carregamento é maior e o calor armazenado é menor que a quando ele possui um leito composto por esferas de aço. Isso pode ser visto nas figura (5.15) e (5.16).

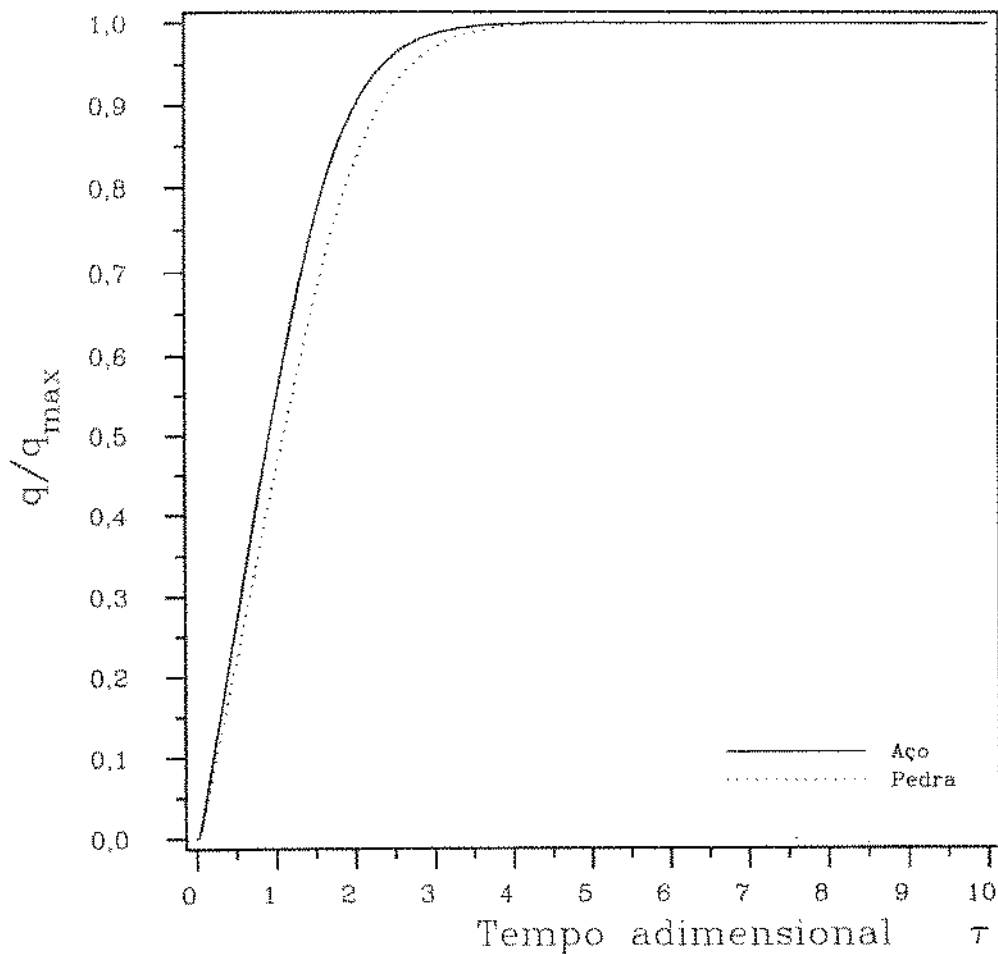


Figura 5.15: Influência do material de armazenamento no desempenho do armazenador. Modelo: fase sólida contínua bidimensional. Fluido de trabalho: água. Material: aço/pedra.

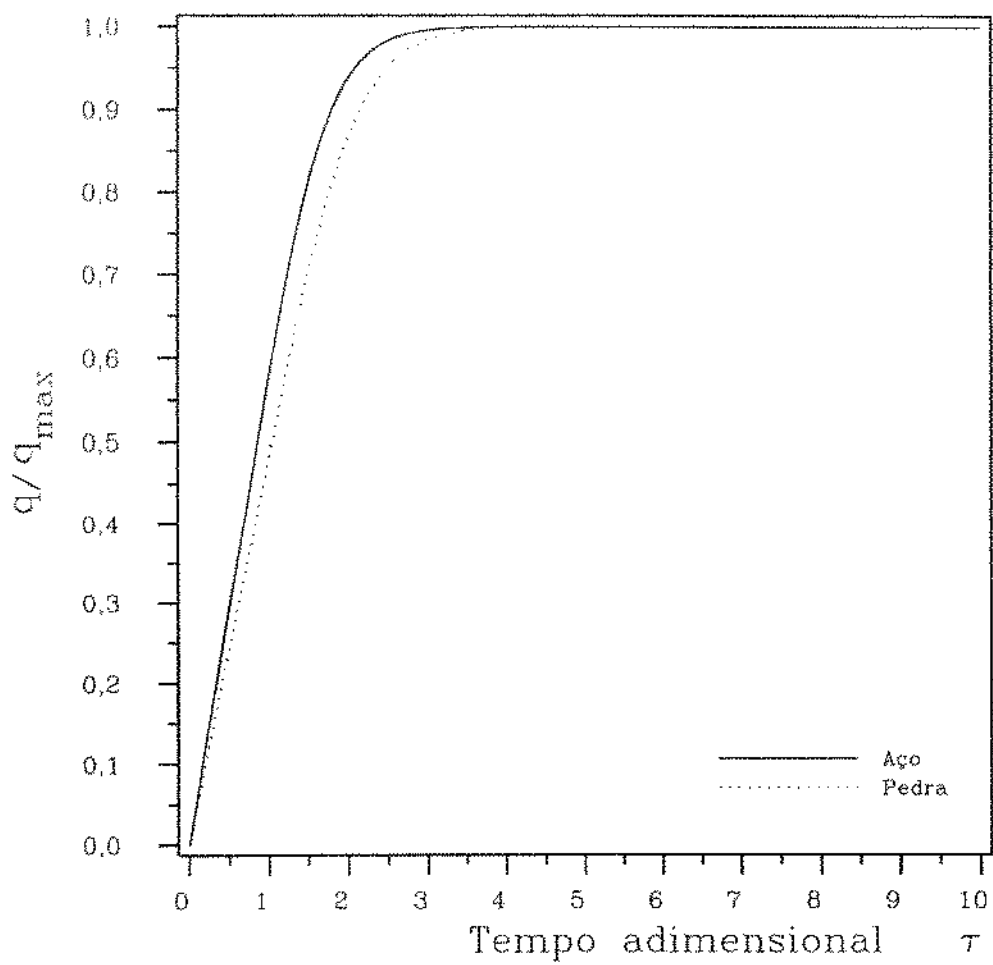


Figura 5.16: Influência do material de armazenamento no desempenho do armazenador. Modelo: fase única bidimensional. Fluido de trabalho: água. Material: aço/pedra.

5.1.6 Variação da temperatura de entrada

A variação da temperatura de saída do fluido devido a variação da temperatura do fluido na entrada do armazenador depende das propriedades físicas do material de armazenamento e do fluido de trabalho, bem como do diâmetro das partículas. A figura (5.17) mostra curvas de temperatura de saída do fluido para os diversos modelos estudados. Nota-se que a variação depende do modelo adotado. O modelo com gradiente térmico no interior das partículas fornece uma temperatura de saída com amplitude menor que os outros modelos, quando usamos pedra como material de armazenamento. Quando o diâmetro da partícula é menor, figura (5.18), o modelo com gradiente térmico no interior das partículas fornece uma temperatura de saída com amplitude bastante próxima àquelas fornecidas pelos outros modelos. O fluido de trabalho, figura (5.19), também influencia a temperatura de saída do fluido. Para uma mesma vazão mássica, o número de Reynolds baseado no diâmetro da partícula, é diferente para os dois fluidos utilizados, produzindo assim, um número de Nusselt diferente, o que altera a troca de calor entre fluido e partícula.

A figura (5.20) mostra a temperatura de saída fornecida pelos diversos modelos estudados usando esferas de aço como material de armazenamento. Comparando com a figura (5.17) que usa pedra como material de armazenamento, podemos observar que os perfis fornecidos pelos diversos modelos são bastante próximos, mostrando claramente a influência das propriedades físicas do material de armazenamento.

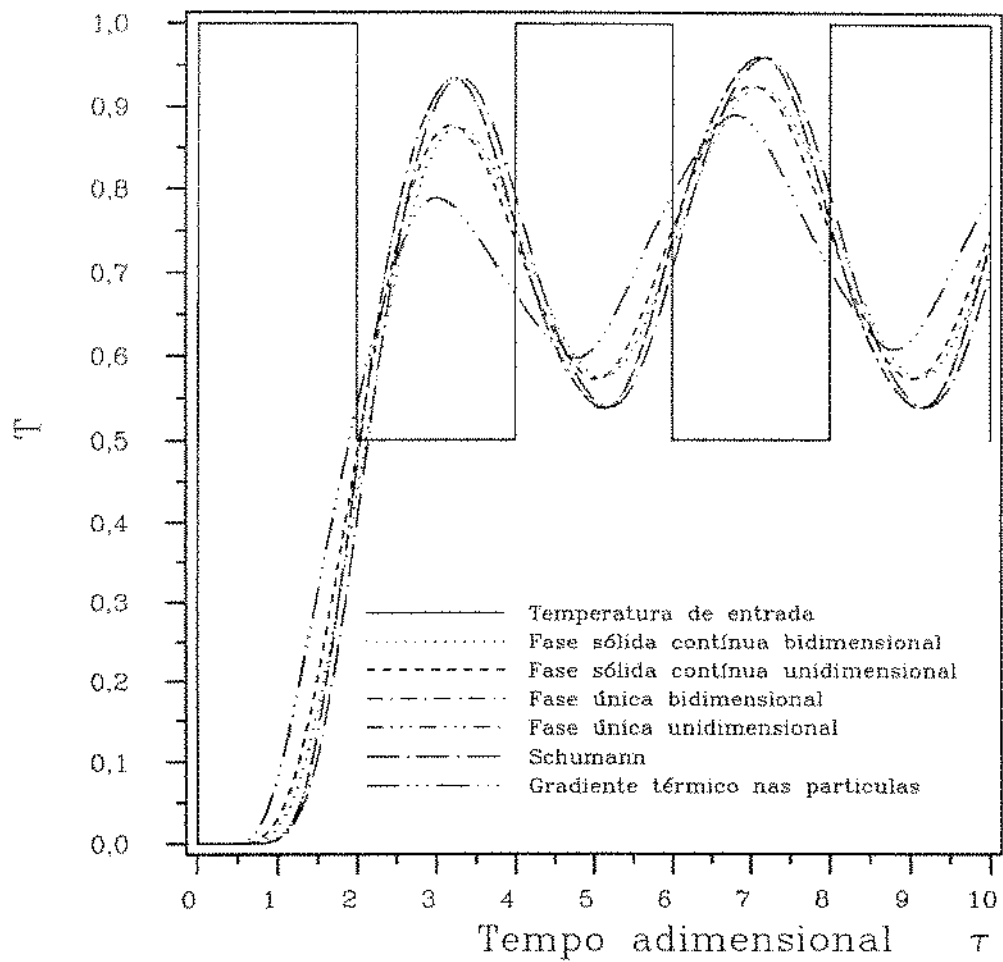


Figura 5.17: Efeito da variação da temperatura de entrada na temperatura de saída do fluido do armazenador. Modelo: todos. Fluido de trabalho: água. Material: pedra. $d_p = 50$ mm.

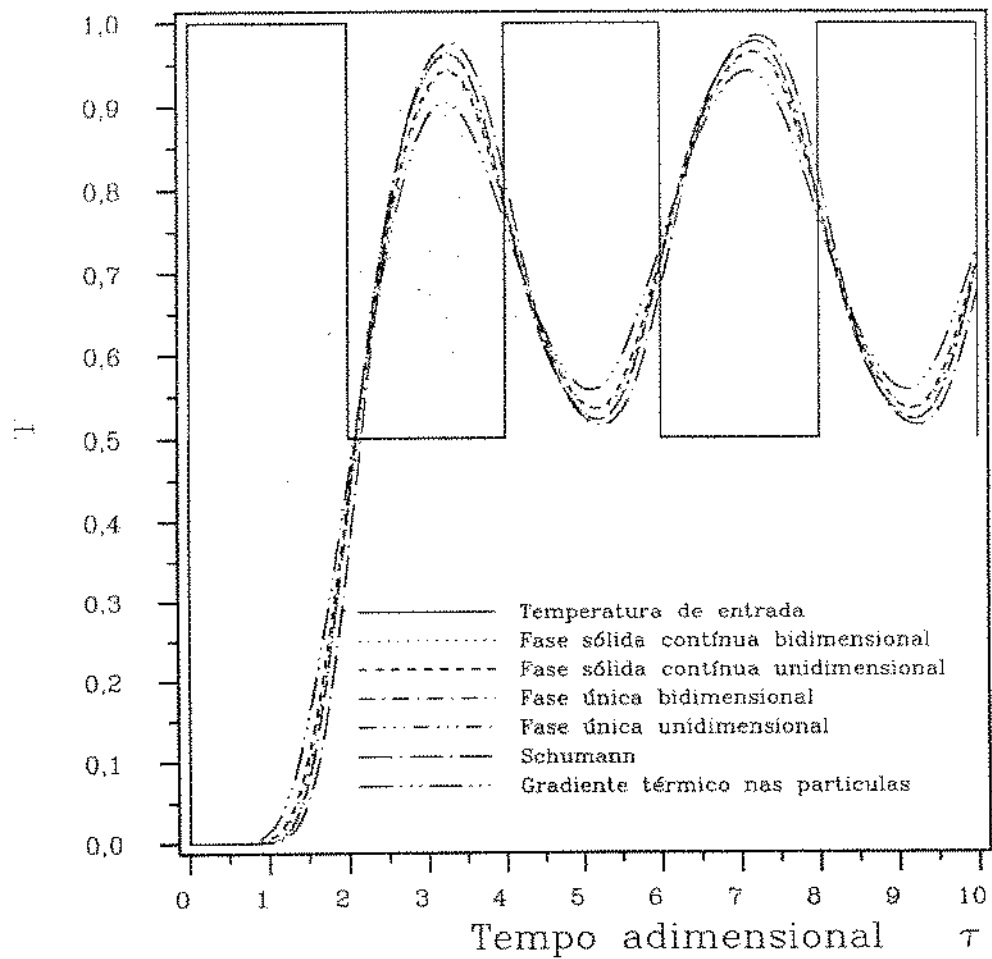


Figura 5.18: Efeito da variação da temperatura de entrada na temperatura de saída do fluido do armazenador. Modelo: todos. Fluido de trabalho: água. Material: pedra. $d_p = 25$ mm.

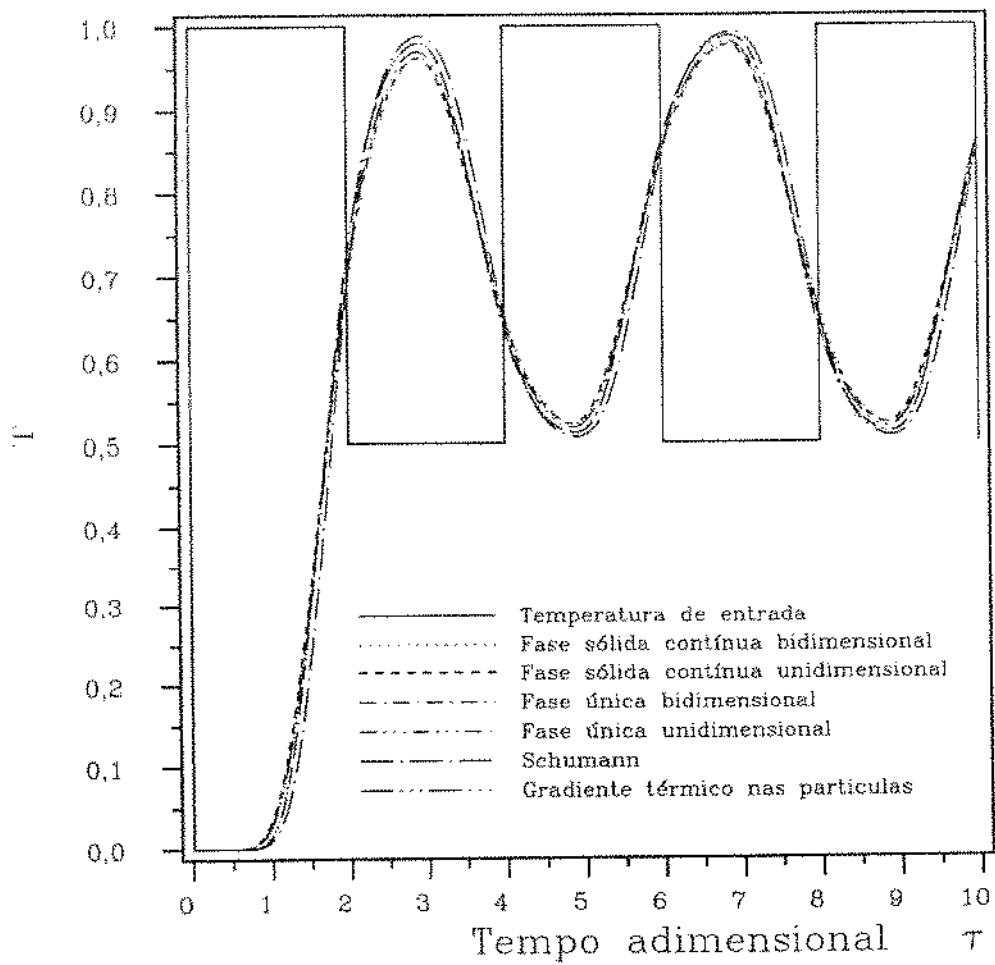


Figura 5.19: Efeito da variação da temperatura de entrada na temperatura de saída do fluido do armazenador. Modelo: todos. Fluido de trabalho: água. Material: aço. $d_p = 25$ mm.

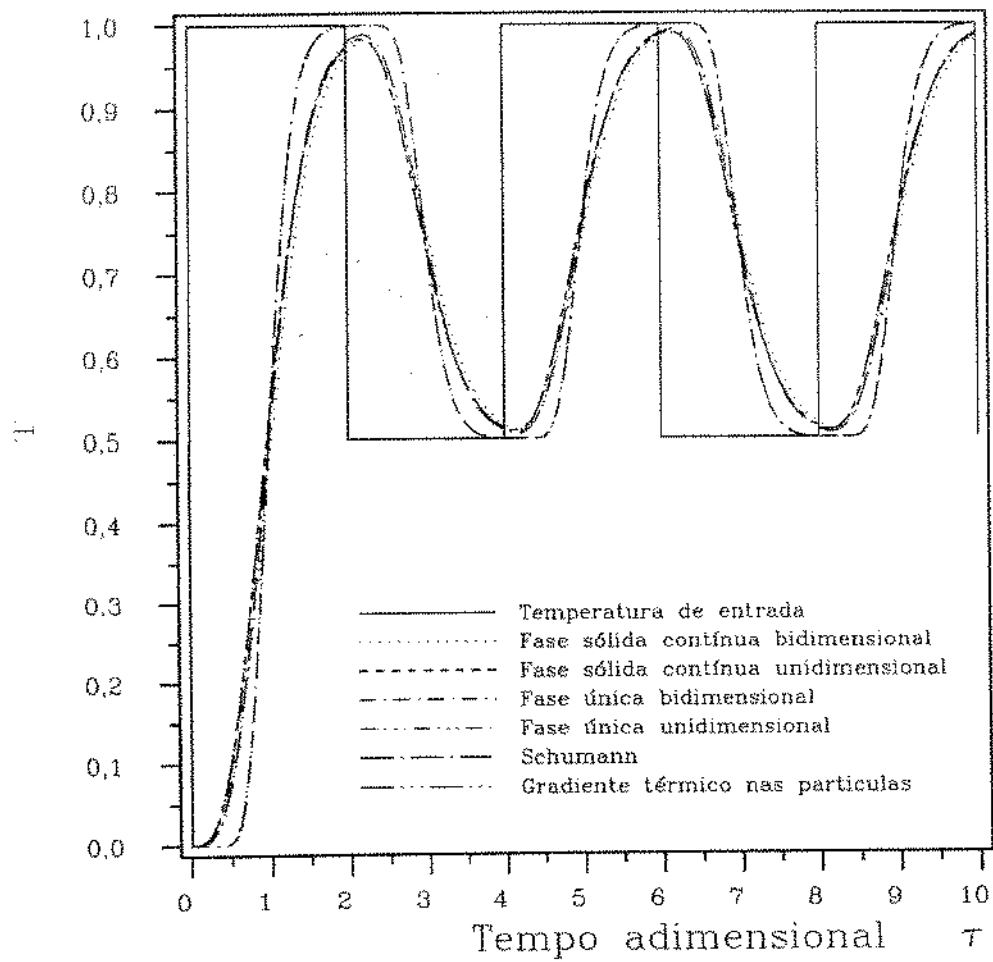


Figura 5.20: Efeito da variação da temperatura de entrada na temperatura de saída do fluido do armazenador. Modelo: todos. Fluido de trabalho: ar. Material: aço. $d_p = 25$ mm.

5.1.7 Perda de calor pelas paredes do armazenador

A perda de calor pelas paredes do armazenador provoca uma diminuição no calor armazenado. A perda de calor calculada, depende do modelo utilizado para simular o armazenador. Os modelos unidimensionais assumem que o calor perdido provoca uma diminuição da temperatura de toda a seção em consideração, enquanto que os modelos bidimensionais assumem a existência de um gradiente térmico radial no leito. As perdas calculadas por cada modelo produzem resultados ligeiramente diferentes como pode ser observado na figura (5.21), (5.22) e (5.23).

Podemos observar que o diâmetro da partícula não exerce influência na razão de calor armazenado. A figura (5.24) compara o calor perdido quando o material de armazenamento é aço, e quando é pedra, e o fluido de trabalho é água. Para um mesmo modelo não existe diferença na razão de calor armazenado. A figura (5.25) mostra que existe uma diferença entre as perdas de calor quando o fluido de trabalho é ar e quando é água. Para uma mesma vazão mássica, o número de Reynolds (Re_p) é maior para escoamentos com ar, que para escoamentos com água. Desta maneira o coeficiente de película parede/fluido será maior quando o armazenador opera com ar o que prova uma perda de calor pelas paredes maior. Além disso a energia térmica transportada pela água é muito maior que a transportada pelo ar, assim as perdas são, em parte atenuadas, pois a água com uma queda menor de temperatura que a sofrida pelo ar, compensa essas perdas.

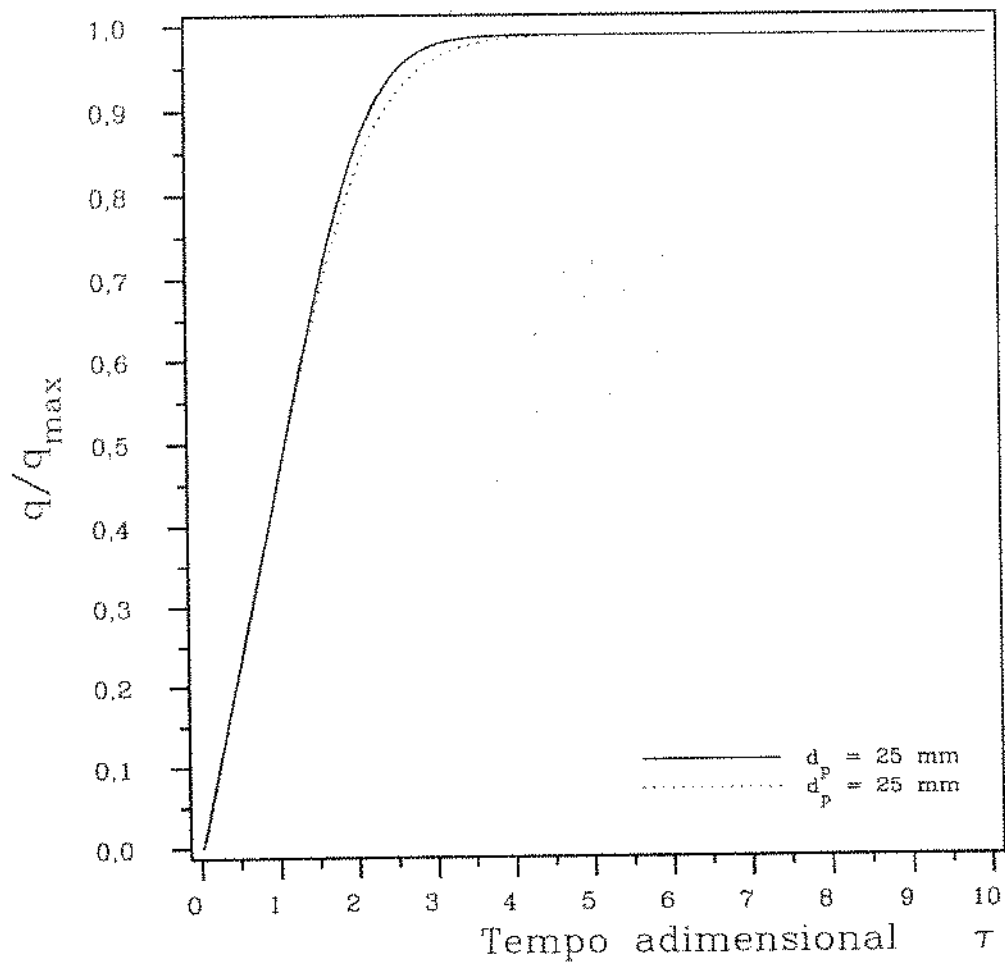


Figura 5.21: Efeito da perda de calor pelas paredes no calor armazenado. Modelo: fase sólida contínua bidimensional. Fluido de trabalho: água. Material: pedra. $d_p = 25$ e 50 mm . $U_w = 1,5825 \text{ W/m}^2 \text{ K}$

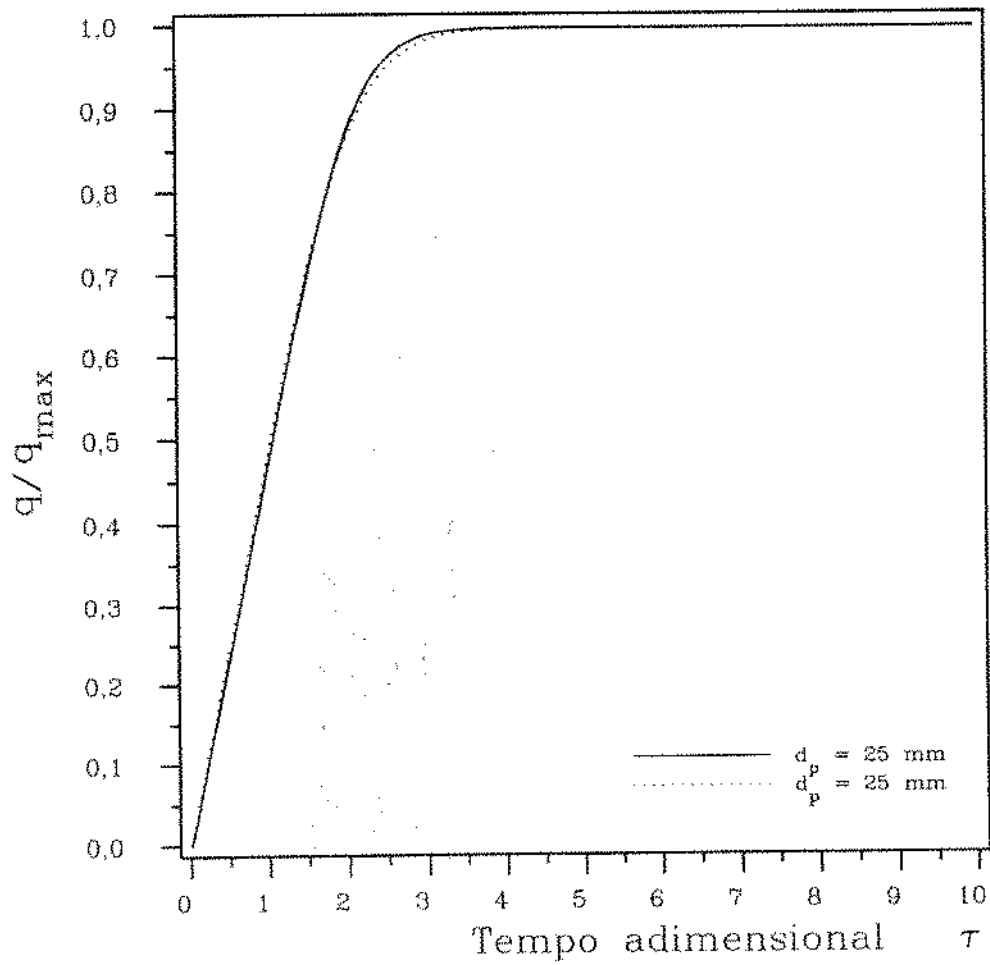


Figura 5.22: Efeito da perda de calor pelas paredes no calor armazenado. Modelo: fase única unidimensional. Fluido de trabalho: água. Material: pedra. $d_p = 25$ e 50 mm. $U_w = 1,5825 \text{ W/m}^2 \text{ K}$

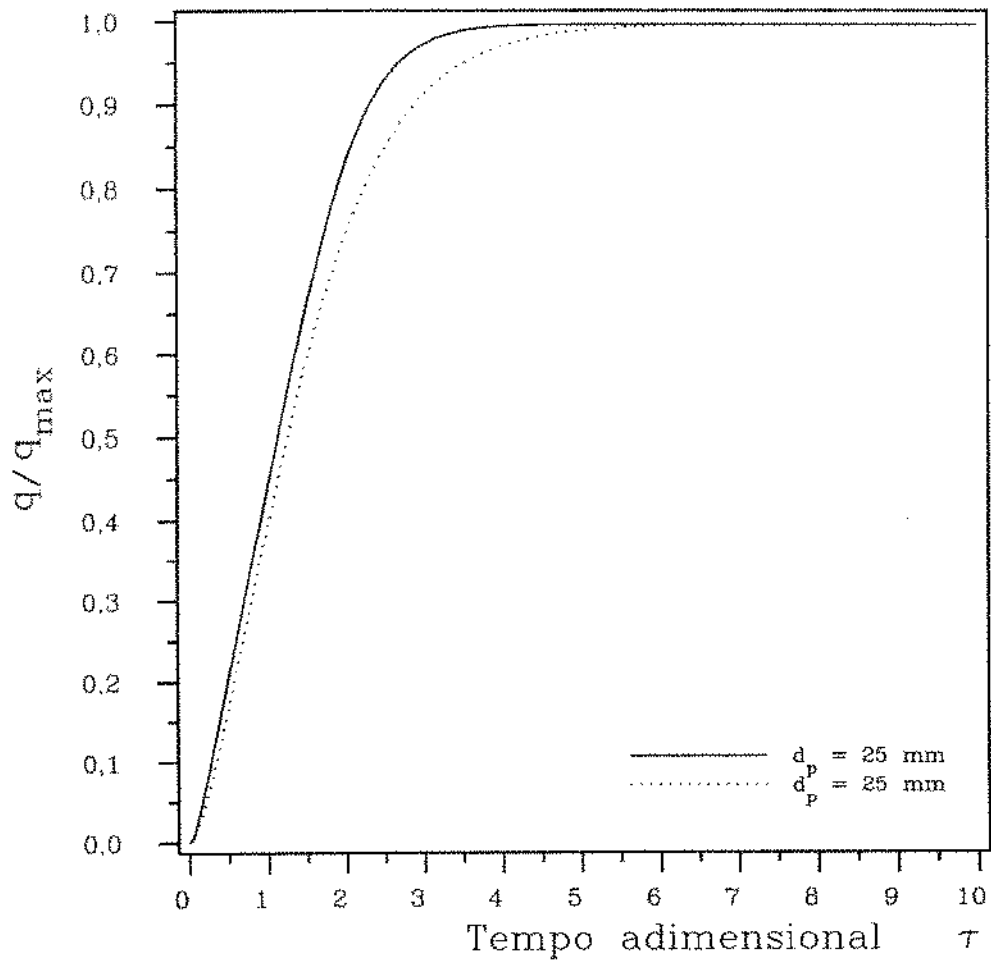


Figura 5.23: Efeito da perda de calor pelas paredes no calor armazenado. Modelo: gradiente térmico no interior das partículas. Fluido de trabalho: água. Material: pedra. $d_p = 25$ e 50 mm. $U_w = 1,5825 \text{ W/m}^2 \text{ K}$

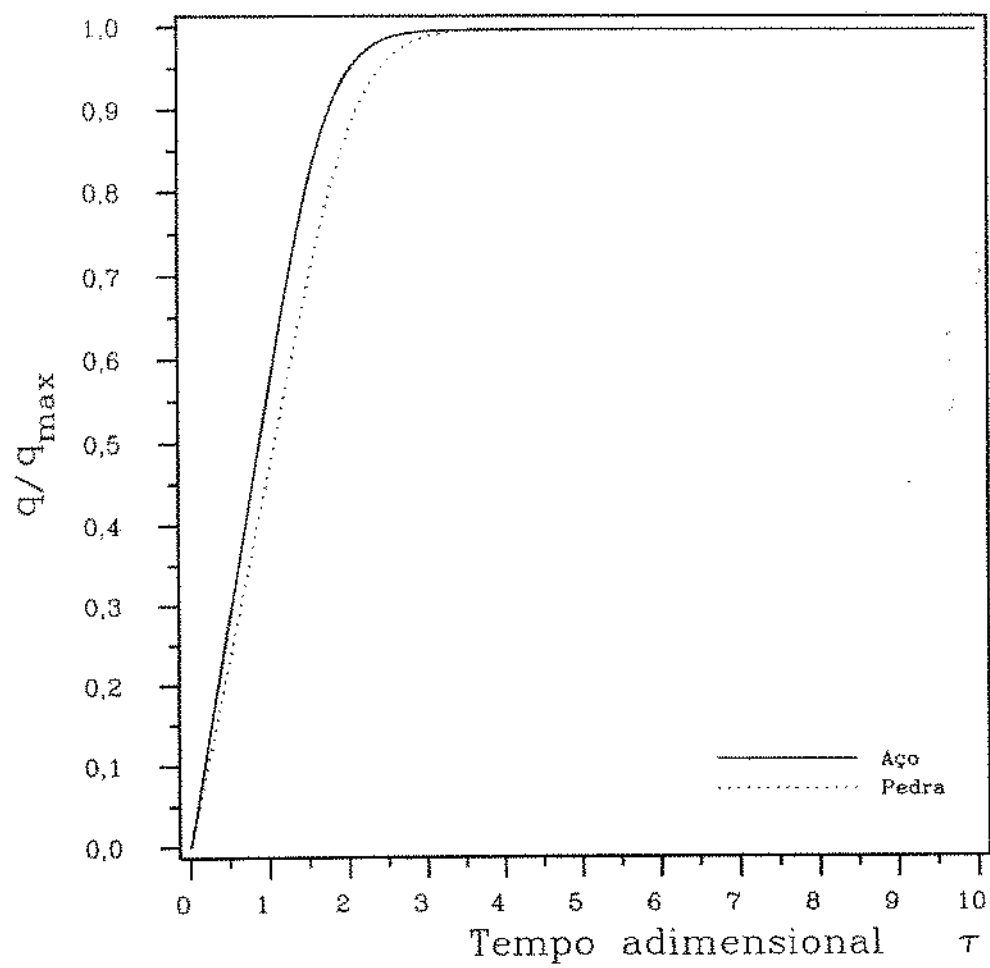


Figura 5.24: Efeito da perda de calor pelas paredes no calor armazenado. Modelo: fase única bidimensional. Fluido de trabalho: água. Material: aço/pedra. $d_p = 25$ mm. $U_w = 1,5825 \text{ W/m}^2 \text{ K}$

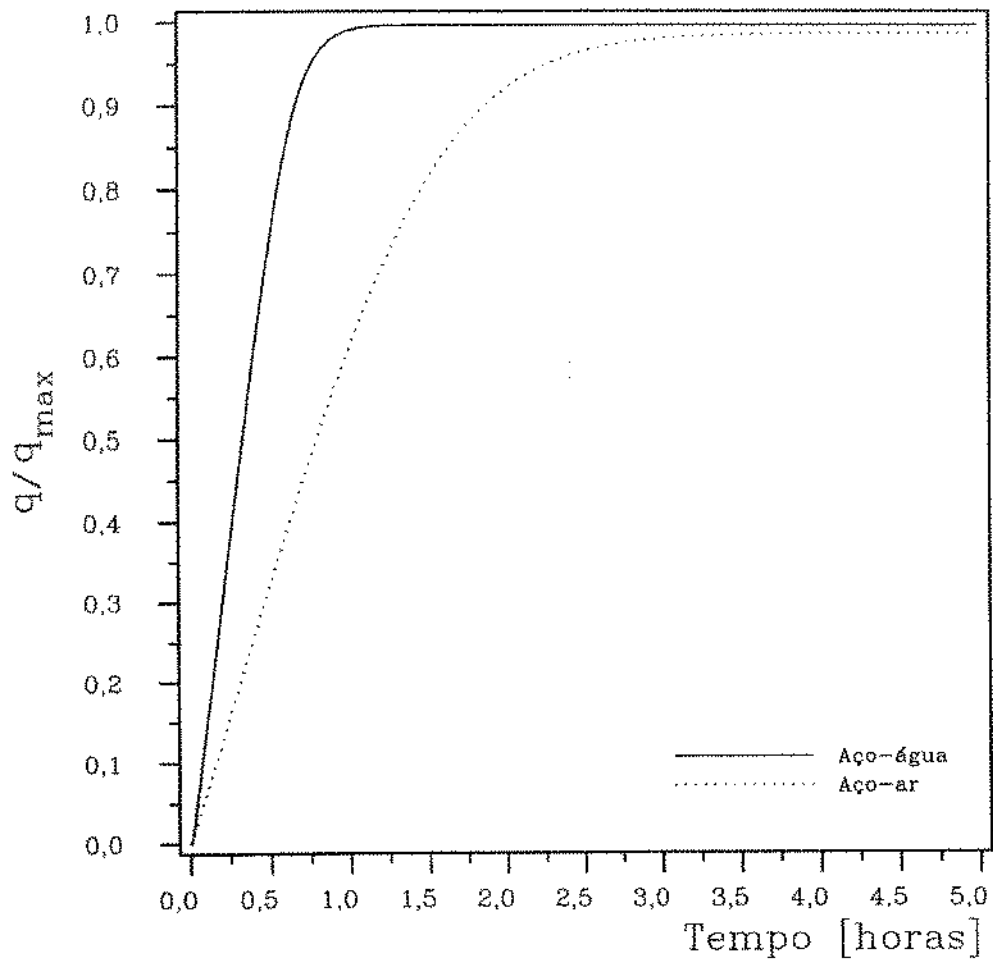


Figura 5.25: Efeito da perda de calor pelas paredes no calor armazenado. Modelo: gradiente térmico no interior das partículas. Fluido de trabalho: água/ar. Material: aço. $d_p = 25$ mm. $U_w = 1,5825$ W/m² K

5.1.8 Efeito da fração de vazios (ϵ)

Para um armazenador com mesmo volume e mesmo diâmetro de partículas, a fração de vazios determinará a quantidade de energia térmica que ele poderá armazenar, a área superficial de troca de calor partícula/fluido por unidade de volume e a perda de carga ao longo do leito. A fração de vazios pode ser variada, variando-se apenas a forma de empacotamento do leito, desta maneira podemos ter para um mesmo armazenador e mesmas partículas, uma gama de variação da fração de vazios, variando-se apenas a forma de empacotamento do leito.

Uma diminuição da fração de vazios produz um aumento da massa presente no leito, aumentando assim a capacidade de armazenamento térmico do leito, a área superficial de troca de calor e a perda de carga ao longo do leito. Essas variações podem ser vistas nas figuras (5.26) a (5.28).

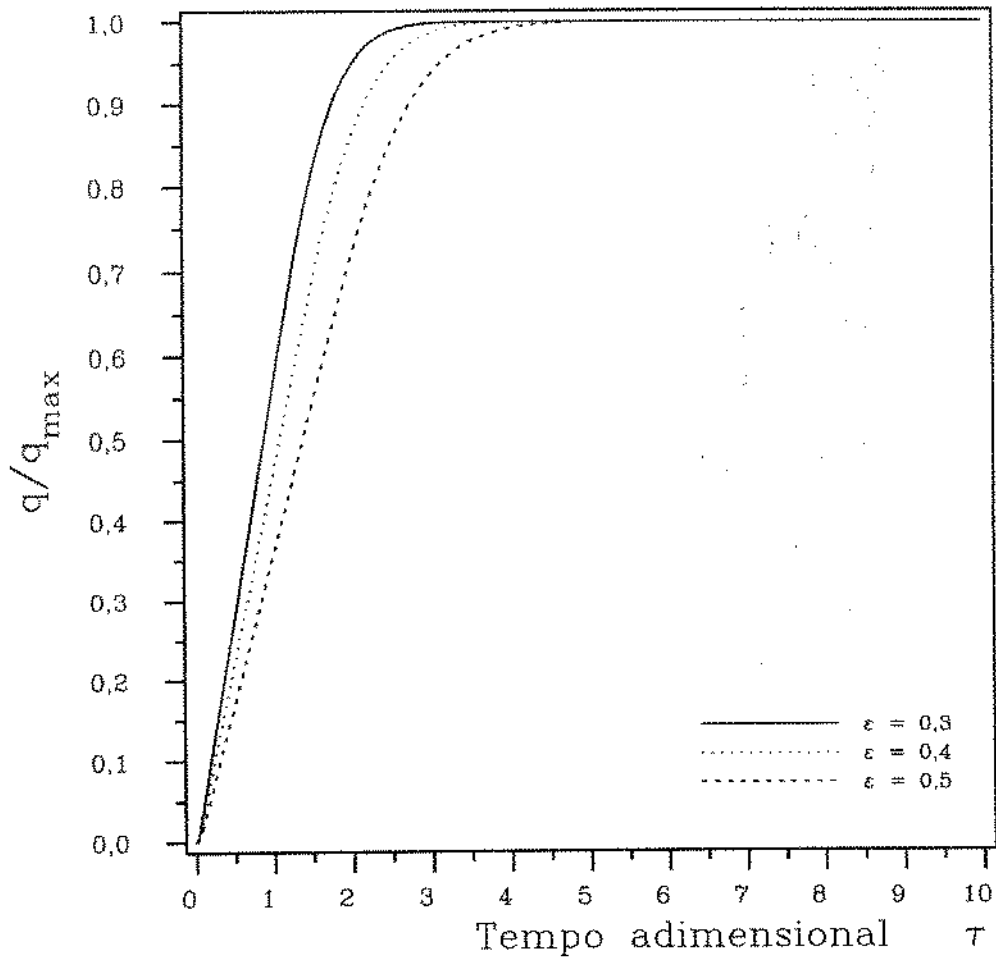


Figura 5.26: Efeito da variação da fração de vazios (ϵ) no calor armazenado. Modelo: fase sólida contínua unidimensional. Fluido de trabalho: água. Material: pedra. $d_p = 25$ mm.

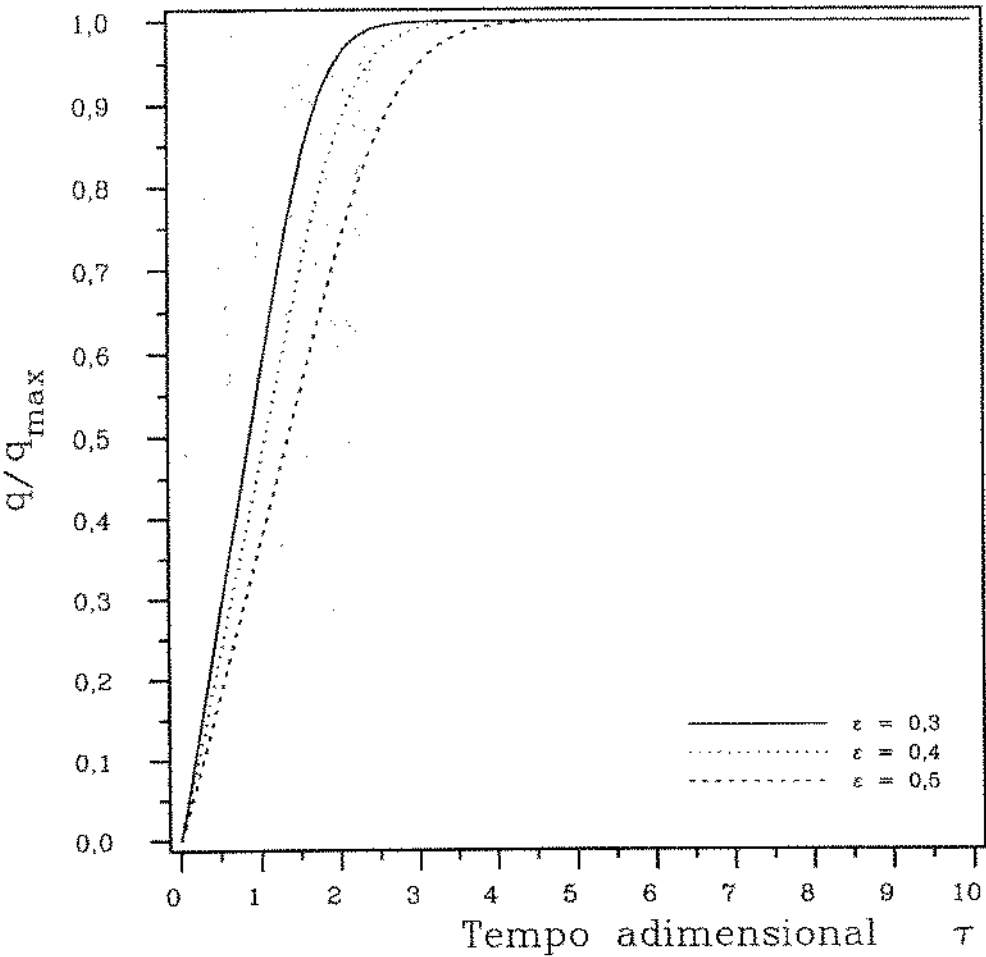


Figura 5.27: Efeito da variação da fração de vazios (ϵ) no calor armazenado. Modelo: fase única bidimensional. Fluido de trabalho: água. Material: pedra. $d_p = 25$ mm.

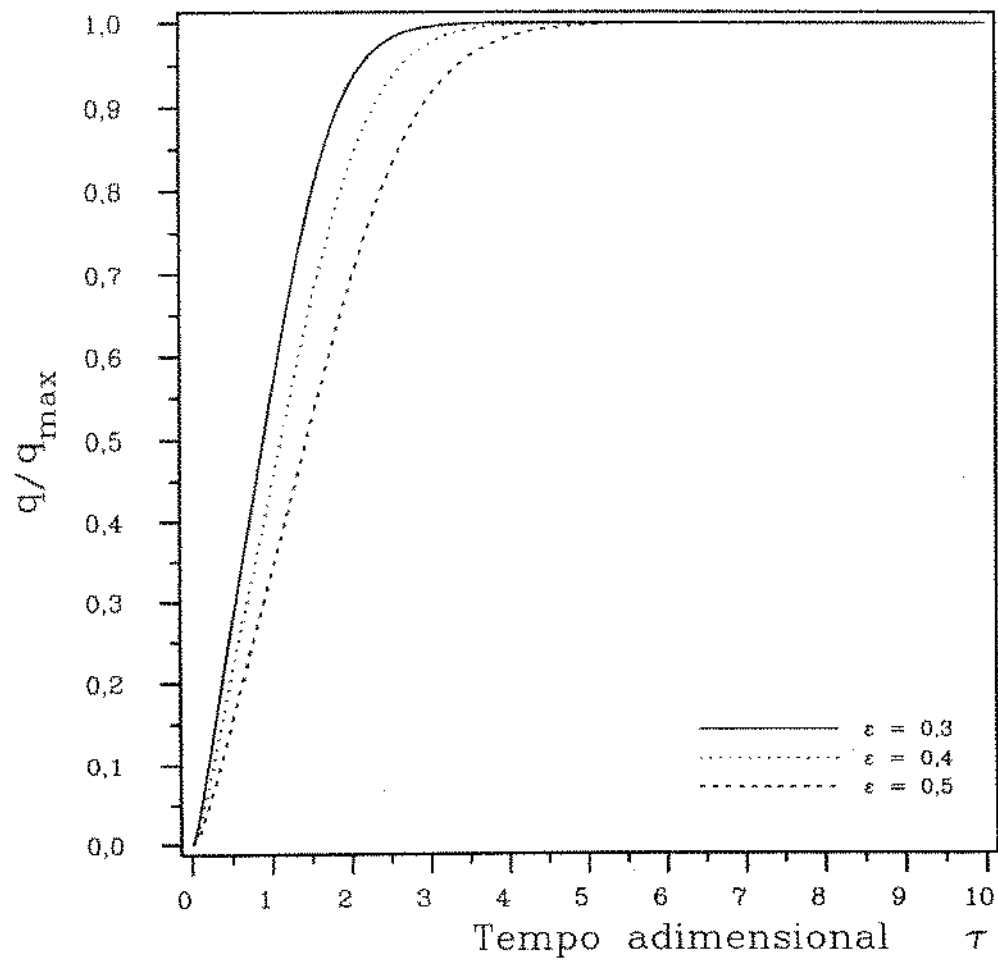


Figura 5.28: Efeito da variação da fração de vazios (ϵ) no calor armazenado. Modelo: gradiente térmico no interior das partículas. Fluido de trabalho: água. Material: pedra. $d_p = 25$ mm.

Capítulo 6

Projeto de Uma Unidade Armazenadora de Calor

6.1 Introdução

Existem vários dispositivos que podem ser utilizados para armazenamento de calor. As classificações desses dispositivos variam de autor para autor, dependendo da abordagem de cada um deles. Podemos dizer que existem dois grandes grupos de dispositivos de armazenamento térmico: os *dispositivos de armazenamento direto*, onde o calor é armazenado no próprio fluido de trabalho e os *dispositivos de armazenamento indireto*, nos quais o calor é transferido para um material de armazenamento por um fluido quente e é recuperado pela passagem de um fluido frio pelo material.

Os dispositivos de armazenamento direto estão restritos a sistemas que usam baixa temperatura, tais como sistemas de água quente residencial ou comercial, tanto nos que usam aquecedores elétricos ou a gás, como nos que usam sistemas de captação solar para aquecimento de água.

Os dispositivos de armazenamento indireto são normalmente usados em sistemas de grande porte podendo armazenar o calor tanto na forma de calor sensível, como na forma de calor latente. Entre os dispositivos de armazenamento indireto de calor podemos citar [31]:

1. **Regenerador térmico:** é um dispositivo de armazenamento de energia no qual o processo de armazenamento e recuperação de calor é feito de uma forma contínua e cíclica bem definida.

2. Trocador de calor armazenador: é um dispositivo no qual um ou mais fluido podem estar simultaneamente em contato como o material armazenador. Desta maneira, deve existir diferentes passagens para os diversos fluidos e as paredes que separam os fluidos podem ser usadas para armazenar o calor, ou para separar o material armazenador dos fluidos de trabalho. Desta maneira este dispositivo trabalha como um trocador de calor, tendo entre o fluido quente e o fluido frio o material de armazenamento de calor. Neste dispositivo os fluxos de fluido frio e fluido quente não precisam ser necessariamente cíclicos.
3. Unidade de armazenamento térmico: é um dispositivo no qual o processo de armazenamento e/ou descarregamento de calor é realizado de forma aleatória, podendo ser periódica ou não. A temperatura de entrada dos fluidos frio e quente, seus fluxos mássicos e a duração das etapas de armazenamento e descarregamento podem variar arbitrariamente no tempo. Além disso, o fluido frio e o fluido quente são misturados no interior no armazenador, não havendo, portanto vias distintas para cada fluido.

Neste trabalho será estudado uma unidade de armazenamento térmico que opera em regime transiente de carga e descarga. O projeto de um sistema de armazenamento de calor envolve uma série de parâmetros que devem ser analisados em conjunto, para se obter um sistema que opere em condições aceitáveis.

Estudos realizados pelo *National Research Council of the United States* [31] indica que certos parâmetros devem ser considerados durante a tomada de decisão para implantação de um sistema de armazenamento de energia. Esses parâmetros são:

1. Capacidade de armazenamento;
2. Razão de carregamento/d Descarregamento;
3. Vida útil do material de armazenamento;
4. Peso, volume e outros limites físicos;
5. Parâmetros críticos de segurança;
6. Condições ambientais;
7. Custos de instalação e manutenção.

6.2 Exemplo Numérico

Um armazenador de leito fixo deve ser projetado para armazenar a energia térmica produzida por uma fonte que produz água quente entre 70 e 85°C, com uma vazão mássica de 0,5 kg/s. O leito do armazenador é constituído de pedras com diâmetro equivalente igual a 40 mm. O processo que utilizará a energia armazenada deverá fazê-lo com temperatura mínima de 75°C. As propriedades do fluido e do sólido são apresentadas na tabela (6.1).

O histórico da variação da temperatura do fluido com o tempo é mostrado na figura (6.1).

Tabela 6.1: Propriedades do fluido e do sólido.

	fluido	sólido
material	água	pedras
massa específica (kg/m ³)	988,18	2560
calor específico (J/kg K)	4175	960
condutividade térmica (W/m K)	0,645	0,48
viscosidade absoluta (Pa s)	5,522×10 ⁻⁴	—
fração de vazios	—	0,4

O volume de sólido necessário para armazenar o calor entre os ciclos de temperatura pode ser calculado a partir da quantidade de energia que será necessário armazenar, assim:

$$q = \dot{m}_f C_f \Delta t \Delta T = 225,4 \times 10^6 \text{ J} \tag{6.1}$$

o volume de sólido será, então:

$$V_0 = \frac{q}{(1 - \epsilon) \rho_s C_s \Delta T} = 10,2 \text{ m}^3 \tag{6.2}$$

A perda de carga no leito pode ser calculada pela expressão (3.11):

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{G^2}{\rho_f d_p} \left[\left(\frac{(1 - \epsilon)}{\epsilon^3} \right) \left(1,75 + 150 \frac{(1 - \epsilon)}{Re_p} \right) \right] \tag{6.3}$$

onde a velocidade mássica superficial *G* pode ser calculada como:

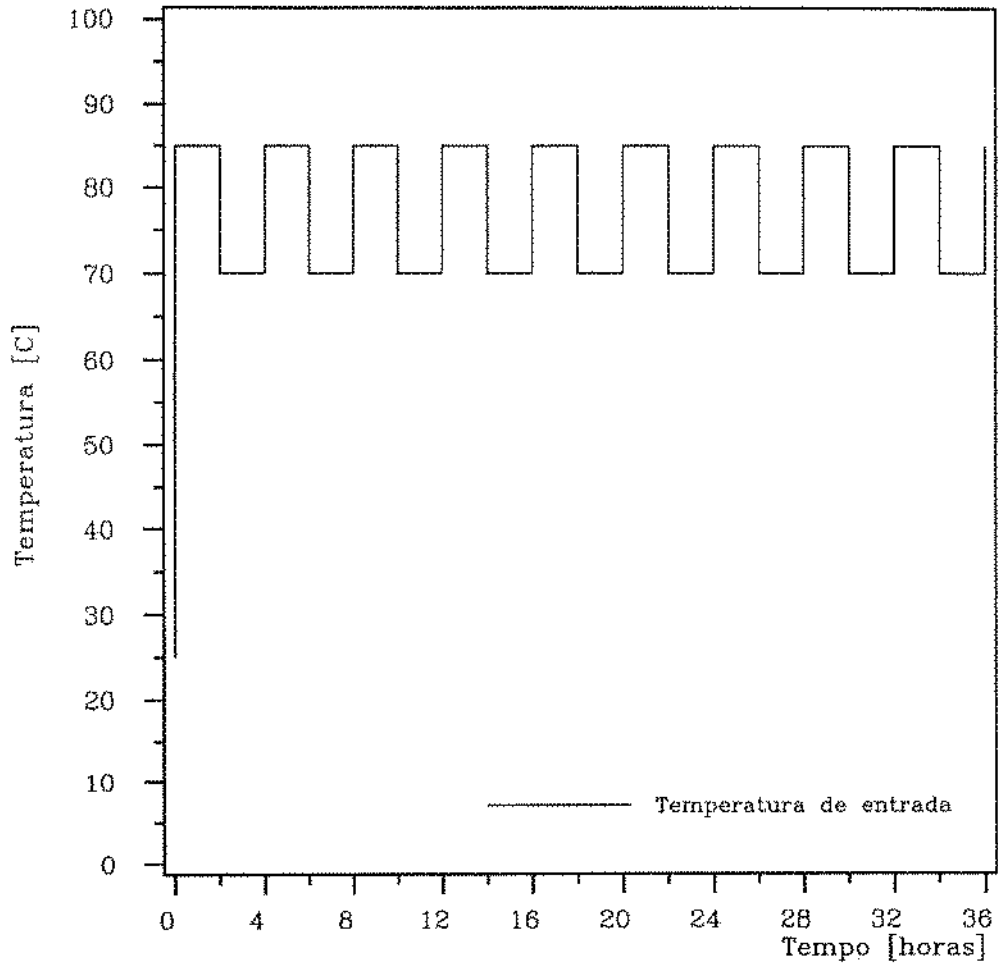


Figura 6.1: Histórico temporal da temperatura do fluido fornecido pela fonte.

$$G = \frac{\dot{m}_f}{A_0} \quad (6.4)$$

$$A_0 = \pi \bar{r}_0^2$$

e o número de Reynolds baseado no diâmetro da partícula será:

$$Re_p = \frac{d_p G}{\mu} = \frac{d_p \dot{m}_f}{A_0 \mu} \quad (6.5)$$

Substituindo as expressões (6.4) e (6.5) na expressão (6.3), obtemos:

$$\frac{\Delta P}{L} = \left(\frac{1,75(1 - \epsilon) \dot{m}_f^2}{\epsilon^3 \rho_f d_p} \right) \frac{1}{A_0^2} + \left(\frac{150(1 - \epsilon)^2 \mu \dot{m}_f}{d_p^2 \rho_f \epsilon^3} \right) \frac{1}{A_0} \tag{6.6}$$

A tabela (6.2) mostra a perda de carga para vários diâmetros de leito, mantendo constante o volume do leito ($V_0 = 10,2 \text{ m}^3$), além de outros parâmetros geométricos.

Tabela 6.2: Perda de carga no leito.

\bar{r}_0 (m)	A_0 (m ²)	L (m)	$\Delta P/L$ (Pa/m)	ΔP (Pa)	L/d_0
0,50	0,7854	12,99	$3,7098 \times 10^{-1}$	4,82	12,99
0,55	0,9503	10,73	$2,7233 \times 10^{-1}$	2,92	9,76
0,60	1,1310	9,02	$2,0694 \times 10^{-1}$	1,87	7,52
0,65	1,3273	7,68	$1,6181 \times 10^{-1}$	1,24	5,91
0,70	1,5394	6,63	$1,2958 \times 10^{-1}$	0,86	4,73
0,75	1,7671	5,77	$1,0590 \times 10^{-1}$	0,61	3,85
0,76	1,8146	5,62	$1,0193 \times 10^{-1}$	0,57	3,70
0,80	2,0106	5,07	$8,8056 \times 10^{-2}$	0,45	3,17
0,85	2,2698	4,49	$7,4315 \times 10^{-2}$	0,33	2,64
0,90	2,5447	4,01	$6,3531 \times 10^{-2}$	0,25	2,23
0,95	2,8353	3,60	$5,4927 \times 10^{-2}$	0,20	1,89
1,00	3,1416	3,25	$4,7958 \times 10^{-2}$	0,16	1,62

Para termos um coeficiente de película fluido/partícula razoável, vamos limitar o número de Reynolds baseado no diâmetro da partícula a 20, desta maneira:

$$Re_p = \frac{d_p \dot{m}_f}{A_0 \mu} > 20$$

o que fornece

$$A_0 < \frac{d_p \dot{m}_f}{Re_p \mu} \tag{6.7}$$

assim obtemos:

$$\bar{r}_0 < 0,76 \text{ m}$$

6.2.1 Discussão dos resultados obtidos através da simulação numérica do armazenador

Usando o modelo de Schumann foi simulado um armazenador com $L = 5,62$ m e $\bar{r}_0 = 0,76$ m, com fluxo mássico $\dot{m}_f = 0,5$ kg/s e perdas pela parede do armazenador. O número de Reynolds baseado no diâmetro das partículas foi $Re_p = 20$, o número de Prandtl $Pr = 3,57$, o que forneceu um número de Nusselt $Nu_p = 15,4907$ e um coeficiente global de troca de calor entre fluido e ambiente $U_w = 0,7967$ W/m² K. Os resultados obtidos pela simulação estão mostrados nas figuras (6.2), (6.3) e (6.4).

A figura (6.2) mostra a variação da temperatura de saída do fluido devido a variação da temperatura de entrada. Pode-se observar que após o armazenador estar carregado ($t \approx 5$ horas) a variação da temperatura de saída é bem mais suave e de amplitude menor que a variação da temperatura de entrada. Isto significa que a energia necessária para aquecer o fluido na saída do armazenador, até a temperatura de 75°C, será menor que a necessária para aquecer o fluido, até as mesmas condições, se não utilizássemos o armazenador de calor no processo. Sem considerar o período de carregamento do armazenador, a energia utilizada por ciclo para manter o fluido a uma temperatura mínima de 75°C, utilizando o armazenador será de 0,0714 MJ, enquanto que a energia necessário para manter o fluido nas mesmas condições sem utilizar o armazenador será de 0,1579 MJ. O uso do armazenador representa uma economia de 45% no consumo de energia.

Em termos de potência de aquecimento, a figura (6.4), nos mostra que se utilizarmos o armazenador a potência de aquecimento do fluido varia suavemente de zero a um valor máximo de 0,92 kW e decresce suavemente para zero novamente, enquanto que sem o armazenador necessitaremos de uma potência de 1,044 kW constante durante todo o processo de aquecimento, assumindo que o armazenador esteja operando em regime.

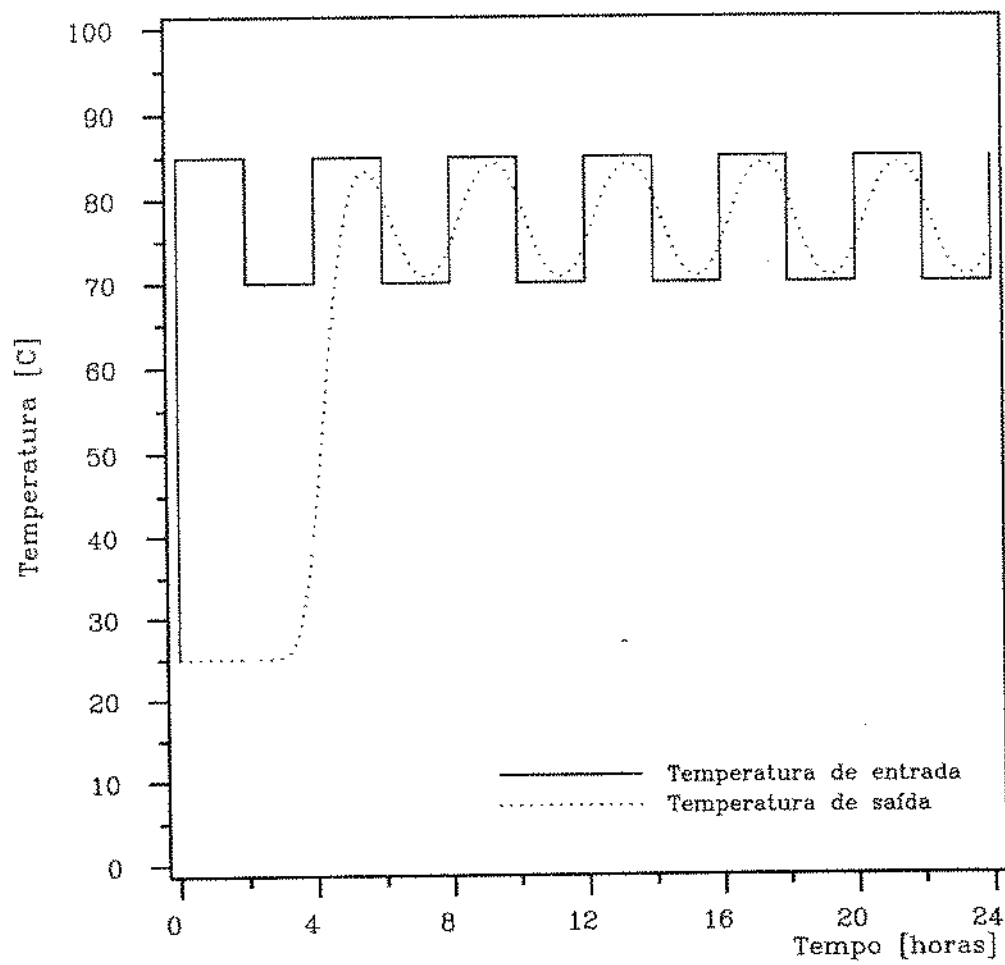


Figura 6.2: Variação da temperatura de saída do fluido em função da variação da temperatura de entrada. Modelo: Schumann.

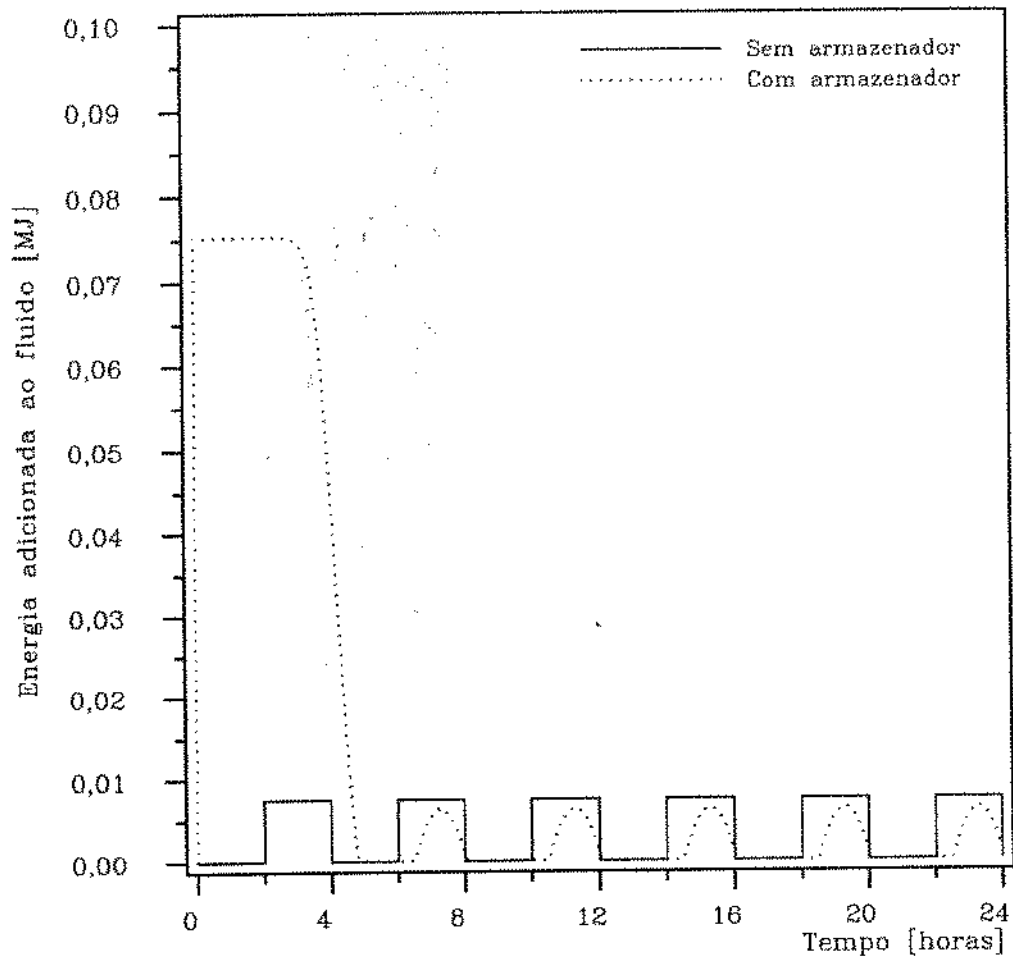


Figura 6.3: Comparação entre a energia necessária para manter o fluido a 75°C sem armazenador e com armazenador. Modelo: Schumann.

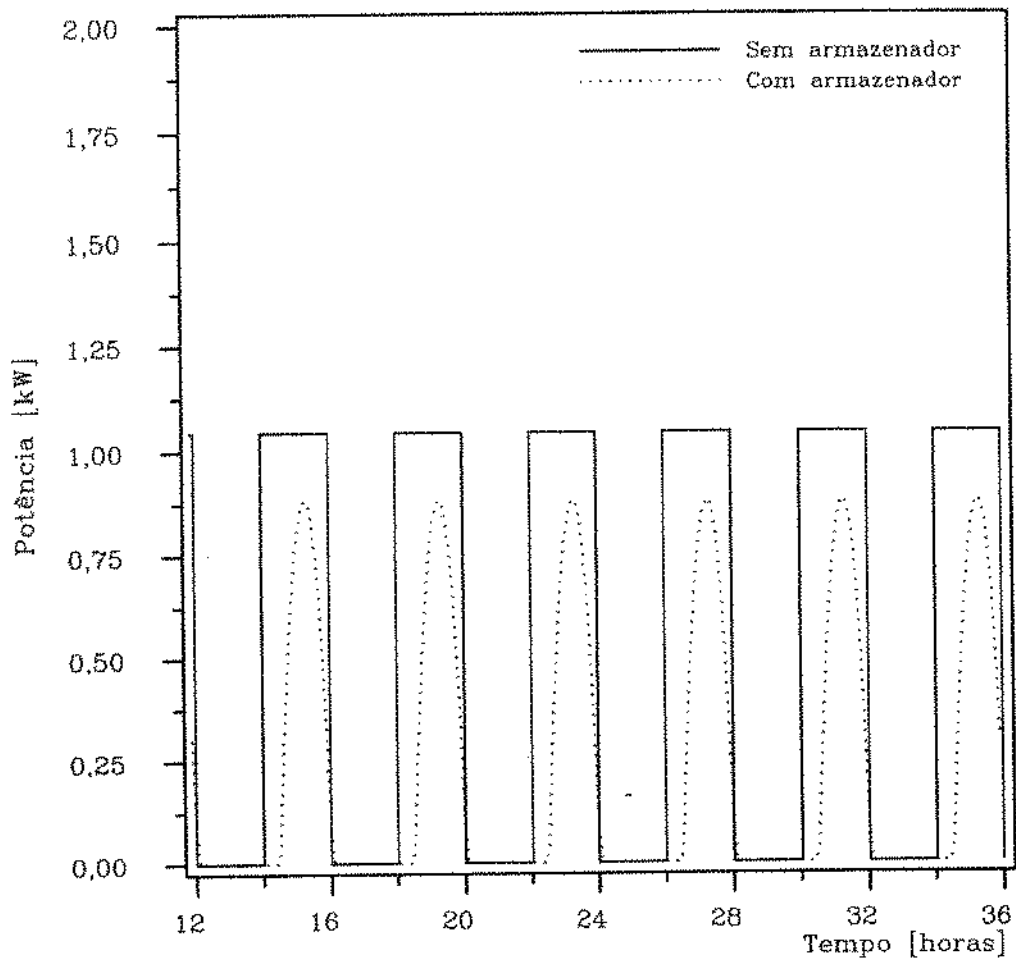


Figura 6.4: Comparação entre a potência necessária para manter o fluido a 75°C sem armazenador e com armazenador. Modelo: Schumann.

A simulação, desse mesmo armazenador, usando o modelo com gradiente térmico no interior das partículas foi realizado e os resultados obtidos estão mostrados nas figuras (6.5), (6.6) e (6.7).

Os resultados dessa simulação indicam que será necessário utilizar uma potência menor para o aquecimento do fluido que aquela indicada pela simulação através do modelo de Schumann. Isso se deve ao fato de se considerar o gradiente térmico no interior da partícula, uma vez que essa partícula possui diâmetro relativamente grande e baixa condutividade térmica. A energia gasta em cada ciclo, após o armazenador entrar em regime de operação é de 0,0439 MJ, e a potência de aquecimento máxima é 0,63 kW.

Foi simulado, também, um armazenador com o mesmo volume de partículas sólidas, porém com relação β (altura/diâmetro do armazenador) diferentes. Os resultados da simulação indicaram que a mudança na energia de aquecimento é pequena. A energia de aquecimento necessária por ciclo e a potência estão mostradas na tabela (6.3). As figuras (6.8) e (6.9) mostram a comparação entre as temperaturas de saída para as três relações β simuladas e a temperatura de entrada.

Tabela 6.3: Energia necessária para aquecimento.

β ($L/2\bar{r}_0$)	Modelo de Schumann		Modelo com gradiente térmico no interior da partícula	
	Energia gasta por ciclo (MJ)	potência máxima (kW)	Energia gasta por ciclo (MJ)	potência máxima (kW)
3,70	0,0714	0,9196	0,0439	0,6296
4,75	0,0711	0,9157	0,0469	0,6603
5,91	0,0712	0,9181	0,0499	0,6944

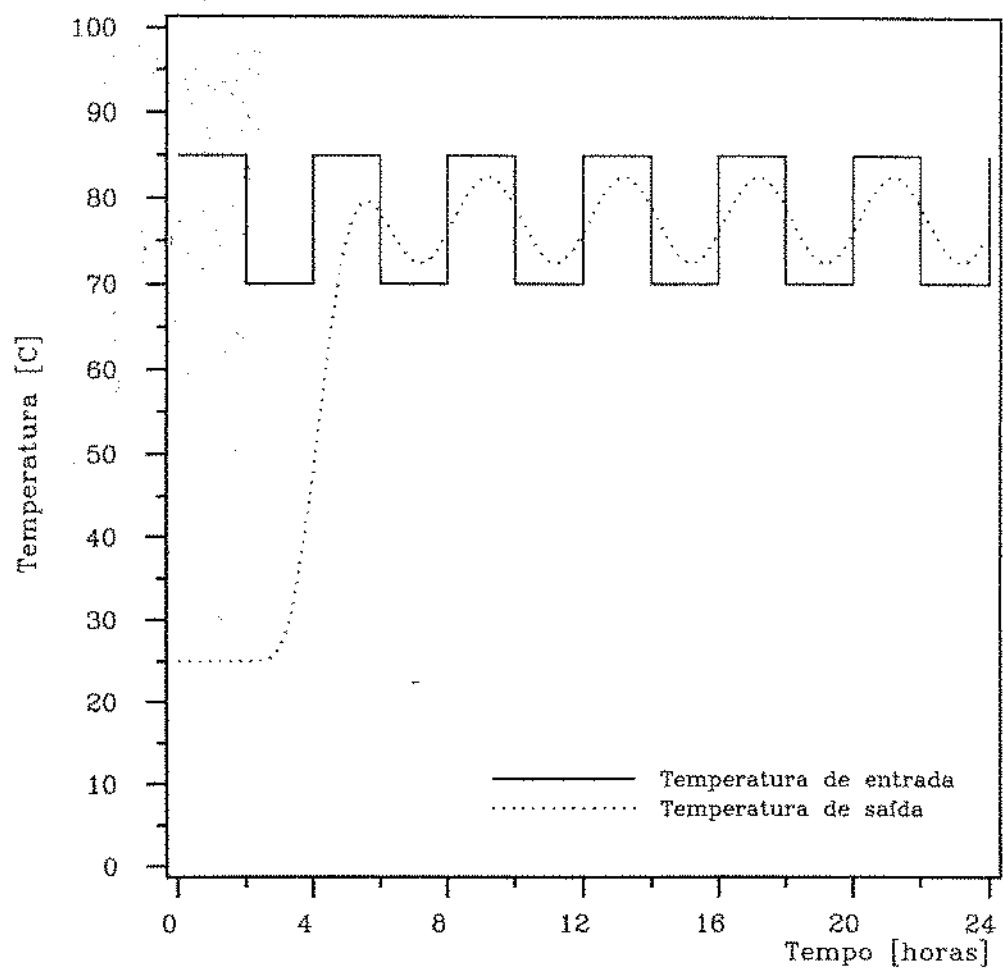


Figura 6.5: Variação da temperatura de saída do fluido em função da variação da temperatura de entrada. Modelo: gradiente térmico no interior das partículas.

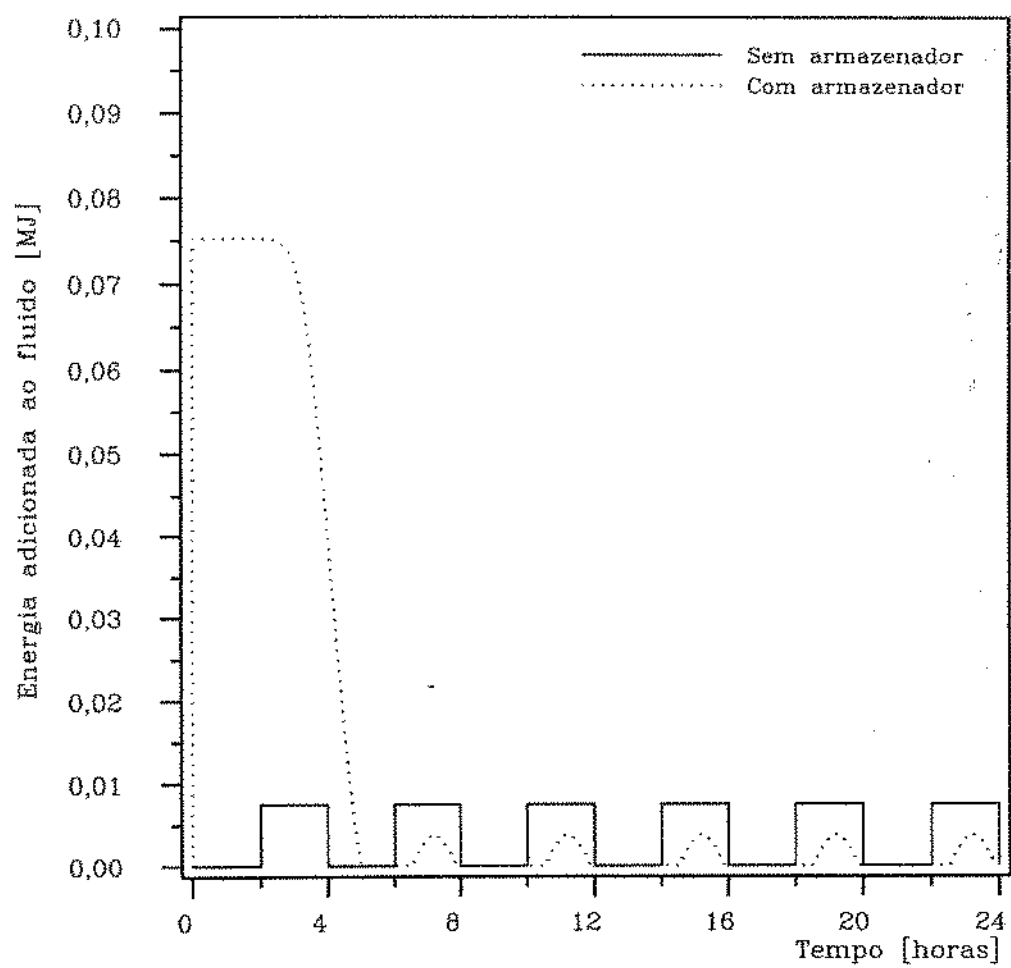


Figura 6.6: Comparação entre a energia necessária para manter o fluido a 75°C sem armazenador e com armazenador. Modelo: gradiente térmico no interior das partículas.

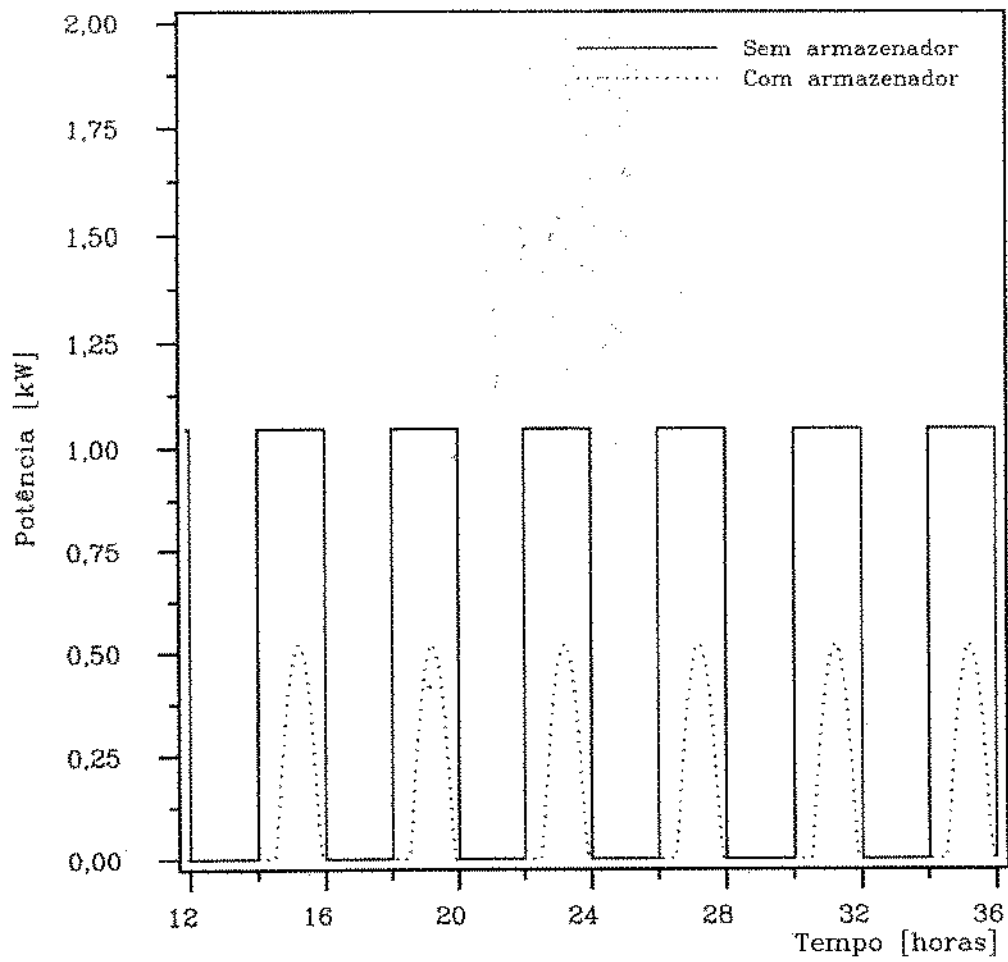


Figura 6.7: Comparação entre a potência necessária para manter o fluido a 75°C sem armazenador e com armazenador. Modelo: gradiente térmico no interior das partículas.

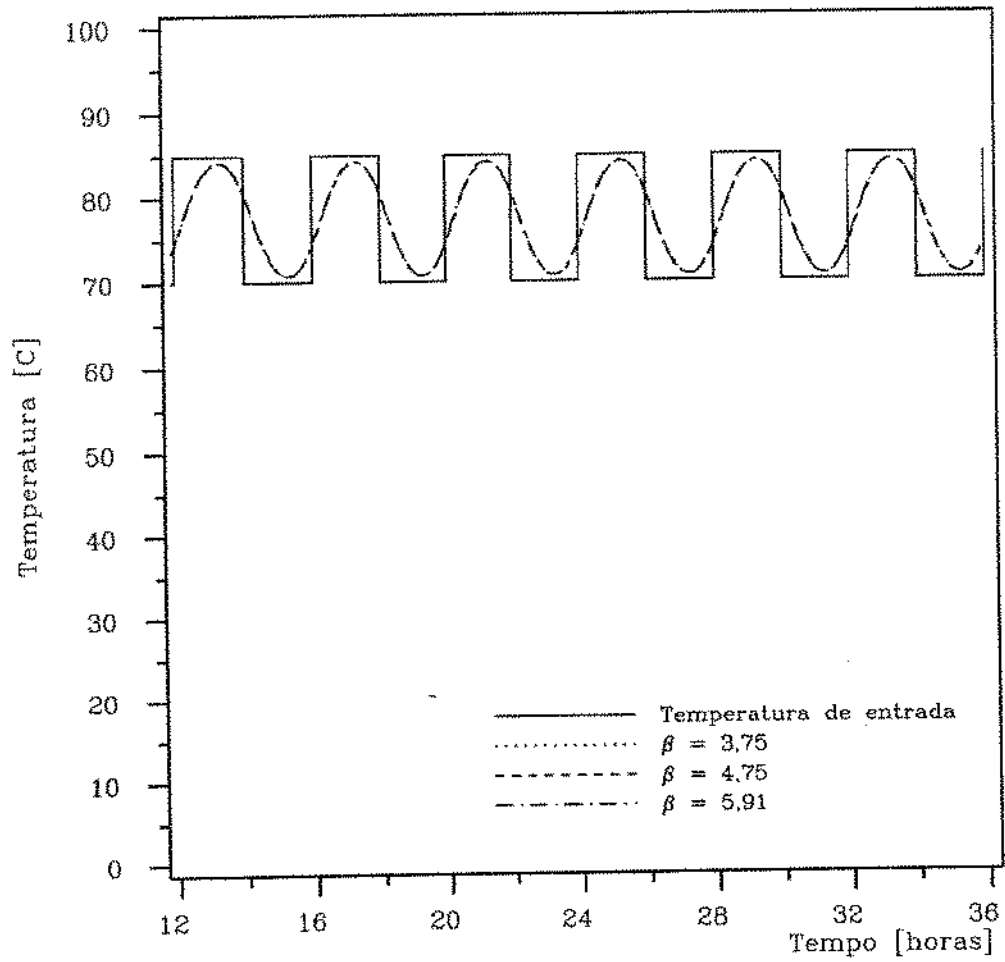


Figura 6.8: Comparação entre as temperaturas de saída do fluido, para diversas relações β . Modelo: Schuman.

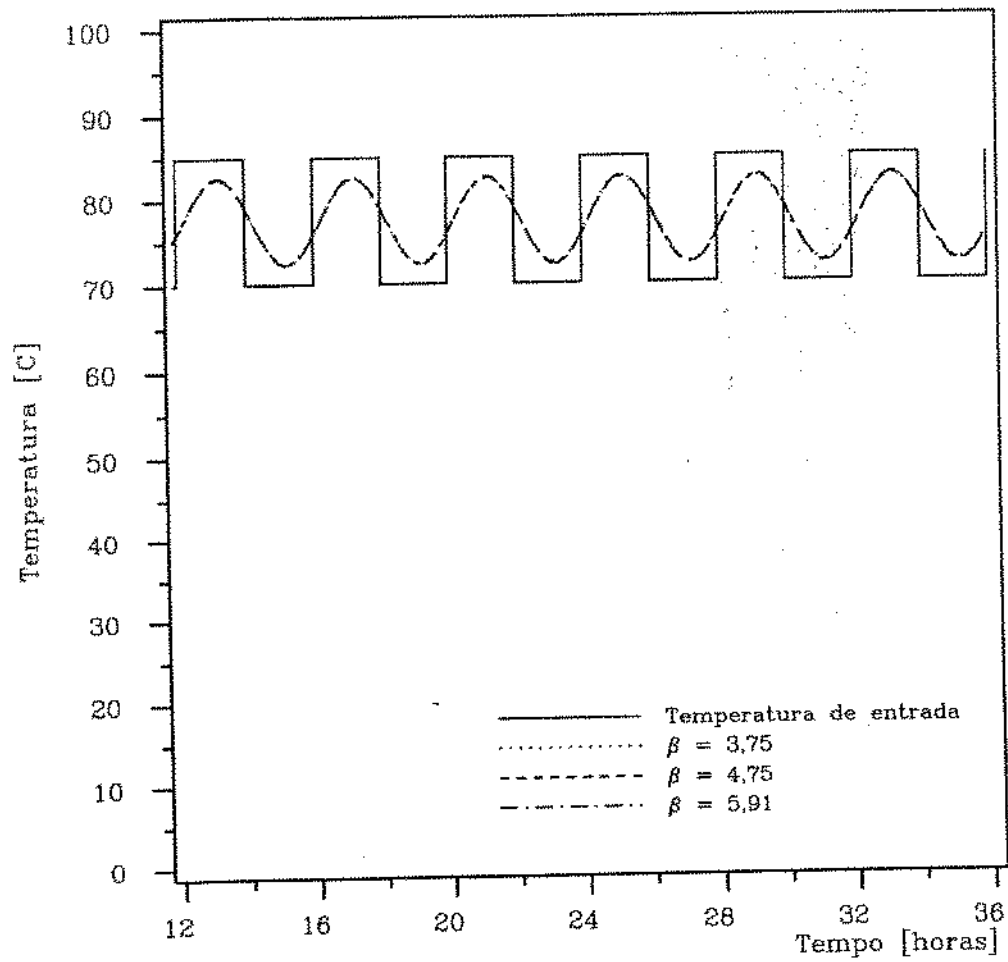


Figura 6.9: Comparação entre as temperaturas de saída do fluido, para diversas relações β . Modelo: gradiente térmico no interior das partículas.

Capítulo 7

Conclusão

Em função dos resultados obtidos em simulação podemos tirar algumas conclusões:

1. Os modelos de fase sólida contínua uni e bidimensionais produzem bons resultados para partículas de pequeno diâmetro e com condutividade térmica relativamente alta (partículas metálicas, por exemplo). Os modelos de fase única, apesar de ter um tempo de CPU muito baixo, não produzem bons resultados quando se tem variação na temperatura de entrada ou variação no fluxo mássico. O modelo que considera o gradiente térmico no interior das partículas é o que melhor reproduz as condições reais do leito, e deve ser utilizado sempre que se quiser maior precisão nos resultados;
2. Se o tempo computacional for um fator relevante na simulação, o modelo de fase única uni e bidimensional devem ser usados, pois necessitam de menor tempo de CPU;
3. Para partículas de grande diâmetro ($d_p > 25$ mm) com condutividade térmica molecular baixa, deve ser utilizado o modelo com gradiente térmico no interior das partículas para simulação;
4. As perdas pelas paredes do armazenador podem ser desprezadas, uma vez que com um isolamento adequado as perdas pelas paredes se reduzem a valores desprezíveis. Se a variação do fluxo mássico na entrada do armazenador for grande as perdas pelas paredes podem vir a ser significativas e, portanto, devem ser consideradas;
5. A razão β (altura/diâmetro do armazenador) tem influência desprezível na performance térmica do armazenador;

6. A variação da fração de vazios (ϵ) provoca mudanças no desempenho térmico do armazenador, uma vez que ela está diretamente ligada a capacidade térmica de armazenamento no sólido ($[1 - \epsilon] \rho_s C_s$);
7. A variação da temperatura de saída provocada pela variação da temperatura de entrada é melhor reproduzida quando usamos o modelo que considera o gradiente térmico no interior das partículas;

Bibliografia

Bibliografia Citada no Texto

- [1] Alanís, E., Saraiva, L. e Rovetta, L. - *Measurement of Rock Pile Heat Transfer Coefficients* - Solar Energy, **19**, pp. 571-572, 1977.
- [2] Baldwin, Jr, D. E., Beckman, R. S., Roth, R. R. e Kermode, R. I. - *Heat Transfer in Beds of Oriented Spheres* - Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development, **5**, nº 3, pp. 281-284, 1966.
- [3] Beasley, D.E. e Clark, J. A. - *Transient Response of a Packed Bed for Thermal Energy Storage* - International Journal of Heat and Mass Transfer, **27**, pp. 1659-1699, 1984.
- [4] Beek, J. - *Design of Packed Catalytic Reactors* - Advances in Chemical Engineering, **3**, pp. 203-271, 1962.
- [5] Clark, Jr. M. e Hansen, K. F. - *Numerical Methods of Reactor Analysis* - Academic Press - 1964.
- [6] Coutier, J.P. e Farber, E.A. - *Two Applications of a Numerical Approach of Heat Transfer Processes Within Rock Beds* - Solar Energy, **29**, pp. 451-462, 1982.
- [7] Cybulski, A., Van Dalen, M.J. Verkerk, J.W. e Van Den Berg, P.J. - *Gas-Particle Heat Transfer Coefficients in Packed Beds at Low Reynolds Numbers* - Chemical Engineering Science, **30**, pp. 1015-1018, 1975.
- [8] Dixon, A.G. e Cresswell, D.L. - *Effective Heat Transfer Parameters for Transient Packed-Bed Models* - AIChE Journal, **32**, nº 5, May 1986, pp. 809-819.
- [9] Furnas, C.G. - *Heat Transfer from a Gas Stream to a Bed of Broken Solids* - Industrial and Engineering Chemistry, **22**, pp. 26-31, 1930.

- [10] Furnas, C.G. - *Heat Transfer from a Gas Stream to a Bed of Broken Solids - II* - Industrial and Engineering Chemistry, 22, pp. 721-731, 1930.
- [11] Gabor, J. D. e Botterill, J. S. M. - *Heat Transfer in Fluidized and Packed Beds* - Handbook of Heat Transfer Applications, editado por Rohsenow, W. M., Hartnett, S. P. e Ganić, E. N. - 2ª edição - McGraw-Hill book Company.
- [12] Galloway, T. R. e Sage, B. H. - *A Model of the Mechanism of Transport in Packed, Distended, and Fluidized Beds* - Chemical Engineering Science, 25, pp. 495-516, 1970.
- [13] Gross, R.J., Hickox, C.E. e Hackett, C.E. - *Numerical Simulation of Dual-Media Thermal Energy Storage Systems* - Transactions of ASME - Journal of Solar Energy Engineering, 102, p287, 1980.
- [14] Gunn, D.J. - *Axial and Radial Dispersion in Fixed Beds* - Chemical Engineering Science, 42, pp. 363-373, 1987.
- [15] Gupta, S.N., Chaube, R.B. e Upadhyay, S.N. - *Fluid-Particle Heat Transfer in Fixed and Fluidized Beds* - Chemical Engineering Science, 29, pp. 839-843, 1974.
- [16] Handley, D. e Heggs, P.J. - *The Effect of Thermal Conductivity of the Packing Material on Transient Heat Transfer in a Fixed Bed* - International Journal of Heat and Mass Transfer, 12, pp. 549-570, 1969.
- [17] Hollands, K.G.T., Sullivan, H.F. e Shewen, E.C. - *Flow Uniformity in Rock Bed* - Solar Energy, 32, pp. 343-348, 1984.
- [18] Holman, J.P. - *Heat Transfer* - 5ª edição, McGraw-Hill, 1981.
- [19] Littman, H, Barile, R.G. e Pulsifer, A.H. - *Gas-Particle Heat Transfer Coefficients in Packed Beds at Low Reynolds Numbers* - Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals, 7, pp. 554-561, 1968.
- [20] Maaliou, O. e McCoy, B. J. - *Optimization of Thermal Energy Storage in Packed Columns* - Solar Energy, 34, nº 1, pp. 35-41, 1985.
- [21] Macdonald, I. F., El-Sayed, M. S., Mow, K. e Dullien, F. A. L. - *Flow through Porous Media - the Ergun Equation Revised* - Industrial and Engineering Chemistry Fundamental 13 pp. 199-208, 1979.

- [22] Machač, I. e Dolejš, V. - *Flow of Generalized Newtonian Liquids Through Fixed Beds of Nonspherical Particles* - Chemical Engineering Science, **36**, pp. 1679-1686, 1981.
- [23] Martin, H. - *Low Peclet Number Particle-to-Fluid Heat and Mass Transfer in Packed Beds* - Chemical Engineering Science, **33**, pp. 913, 1978.
- [24] Melanson, M.M. e Dixon, A.G. - *Solid Conduction in Low d_t/d_p Beds of Spheres, Pellets and Rings* - International Journal of Heat and Mass Transfer, **28**, pp. 383-394, 1985.
- [25] Ofuchi, K. e Kunii, D. - *Heat-Transfer Characteristics of Packed Beds with Stagnant Fluids* - International Journal of Heat and Mass Transfer, **8**, pp. 749-757, 1965.
- [26] Patankar, S. V. - *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow* - Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- [27] Persons, R.W., Duffie, J.A. e Mitchell, J.W. - *Comparison of Measured and Predicted Rock Bed Storage Performance* - Solar Energy, **24**, pp. 199-201, 1980.
- [28] Raiz, M. - *Transient Analysis of Packed-Bed Thermal Storage Systems* - Solar Energy, **21**, pp. 123-128, 1978.
- [29] Saez, A.E. e McCoy, B.J. - *Dynamic Response of a Packed Bed Thermal Storage System - A Model for Solar Air Heating* - Solar Energy, **29**, pp. 201-206, 1982.
- [30] Saez, A.E. e McCoy, B.J. - *Transient Analysis of Packed-Bed Thermal Storage Systems* - International Journal of Heat and Mass Transfer, **26**, n^o 1, pp. 49-54, 1983.
- [31] Schmidt, F. W. - *Thermal Energy Storage and Regeneration* - in Heat Exchangers - Theory and Practice, ed. Taborek, J., Hewitt, G. E. e Afgan, N. - Hemisphere Publishing Corporation - 1983.
- [32] Schumann, T.E.W. - *Heat Transfer Liquid Flowing a Porous Prism* - Journal of the Franklin Institute, **208**, july 1929, pp. 405-416.
- [33] Sowell, E.F. e Curry, R.L. - *A Convolution Model of Rock Bed Thermal Storage Units* - Solar Energy, **24**, pp. 441-449, 1980.
- [34] Vortmeyer, D. - *Axial Heat Dispersion in Packed Beds* - Chemical Engineering Science, **30**, pp. 999-1001, 1975.

- [35] Vortmeyer, D. e Adam, W. - *Steady-State Measurements and Analytical Correlations of Axial Effective Thermal Conductivities in Packed Beds at Low Gas Flow Rates* - International Journal of Heat and Mass Transfer, 27, nº 9, pp. 1465-1472, 1984.
- [36] Vortmeyer, D. e Schaefer, R.J. - *Equivalence of One- and Two-Phase Models for Heat Transfer Processes in Packed Beds: One Dimensional Theory* - Chemical Engineering Science, 29, pp. 485-491, 1974.
- [37] Wakao, N. e Funazkri, T. - *Effect of Fluid Dispersion Coefficients on Particle-to-Fluid Mass Transfer Coefficients in Packed Beds* - Chemical Engineering Science, 33, pp. 1375-1384, 1978.
- [38] Wakao, N. e Kaguei, S. - *Heat and Mass Transfer in Packed Beds* - Gordon and Breach Science Publishers, 1982.

Bibliografia Adicional

- [1] Burch, D.M., Allen, R.W. e Peavy, B.A. - *Transient Temperature Distributions within Porous Slabs Subjected to Sudden Transpiration Heating* - Transactions of ASME - Journal of Heat Transfer, **98**, pp. 221-225, 1976.
- [2] Cheng, P. e Hsu, C.T. - *Fully-Developed, Forced Convective Flow Through an Annular Packed-Sphere Bed with Wall Effects* - International Journal of Heat and Mass Transfer, **29**, pp. 1843-1853, 1986.
- [3] Clark, J. A. - *Thermal Energy Storage* - Handbook of Heat Transfer Applications, editado por Rohsenow, W. M., Hartnett, S. P. e Ganić, E. N. - 2ª edição - McGraw-Hill book Company.
- [4] Close, D.L., Peck, M.K. e Salt, H. - *Transient Response of a Packing Bed Energy Storage Employing a Convecting Gas Vapour Mixture* - Solar Energy, **39**, pp. 23-30, 1987.
- [5] Close, D.L. e Pryor, T.L. - *The Behaviour of Adsorbent Energy Storage Beds* - Solar Energy, **18**, pp. 287-292, 1976.
- [6] Crane, R.A. e Vachon, R.I. - *A Prediction of Bounds on the Effective Thermal Conductivity of Granular Materials* - International Journal of Heat and Mass Transfer, **20**, nº 7, pp. 711-723, 1977.
- [7] Cybulski, A., Van Dalen, M.J. Verkerk, J.W. e Van Den Berg, P.J. - *Effective Thermal Conductivity of Packed Beds of Silicon-Cooper Particles* - Chemical Engineering Science, **30**, pp. 1011-1013, 1975.
- [8] Dixon, A.G., DiCostanzo, M.A. e Soucy, B.A. - *Fluid-Phase Radial Transport in Packed-Beds of Low Tube-to-Particle Diameter Ratio* - International Journal of Heat and Mass Transfer, **27**, pp. 1701-1713, 1984.
- [9] Dixon, A.G. e Labua, L.A. - *Wall-to-Fluid Coefficients for Fixed Bed Heat and Mass Transfer* - International Journal of Heat and Mass Transfer, **28**, nº 4, pp. 879-881, 1985.
- [10] Dutkai, E. e Ruckenstein, E. - *New Experiments Concerning the Distribution of a Liquid in Packed Column* - Chemical Engineering Science, **25**, pp. 483-488, 1970.

- [11] Gunn, D.J. - *Transfer of Heat or Mass to Particles in Fixed and Fluidized Beds* - International Journal of Heat and Mass Transfer, **21** n° 4, pp. 467-476, 1978.
- [12] Gunn, D.J., Ahmed, M.M. e Sabri, M.N. - *Radial Heat Transfer to Fixed Beds of Particles* - Chemical Engineering Science, **42**, pp. 2163-2171, 1987.
- [13] Gunn, D.J. e Khalid, M. - *Thermal Dispersion and Wall Heat Transfer in Packed Beds* - Chemical Engineering Science, **30**, pp. 216-267, 1975.
- [14] Gunn, D.J. e Souza, J.F.C. *Heat Transfer and Axial Dispersion in Packed Beds* - Chemical Engineering Science, **29**, pp. 1363-1371, 1974.
- [15] Heggs, P.J. - *Experimental Techniques and Correlations for Heat Exchanger Surfaces: Packed Beds* - Heat Transfer in Low Reynolds Numbers - editado por Kakaç, S., Shah R. K. e Bergles, A. E. - Hemisphere Publishing Corporation, pp. 341-368, 1983
- [16] Heggs, P.J. - *Experimental Techniques and Correlations for Heat Exchanger Surfaces: Regenerators* - Heat Transfer in Low Reynolds Numbers - editado por Kakaç, S., Shah R. K. e Bergles, A. E. - Hemisphere Publishing Corporation, pp. 341-368, 1983
- [17] Hollands, K.G.T., Sullivan, H.F. e Shewen, E.C. - *Pressure Drops Across Rock Bed Thermal Storage Systems* - Solar Energy, **33**, pp. 221-225, 1984.
- [18] Hughes, P.J., Klein, S.A. e Close, D.J. - *Packed Bed Thermal Storage Models for Solar Air Heating and Cooling Systems* - Transactions of ASME - Journal of Heat Transfer, **98**, pp. 336-338, 1976.
- [19] Ismail, K.A.R. e Stuginski Jr., R. - *Comparative Study of Possible Models for Fixed Bed Storage Units* - 6th Miami International Symposium on Heat and Mass Transfer, 10-12 dezembro 1990, Miami, Florida-USA.
- [20] Jones, B. W. e Golshekan, M. - *Destratification and Other Properties of a Packed Bed Heat Storage* - International Journal of Heat and Mass Transfer, **32**, n° 2, pp. 351-359, 1989.
- [21] Kaguei, S., Shiozawa, B. e Wakao, N. - *Dispersion-Concentric Model for Packed Bed Heat Transfer* - Chemical Engineering Science, **32**, pp. 507-513, 1977.

- [22] Kamiuto, K. e Iwamoto, M. - *Inversion Method for Determining Effective Thermal Conductivities of Porous Materials* - Transactions of ASME - Journal of Heat Transfer, **109**, pp. 831-834, 1987.
- [23] Karabelas, A.J., Wegner, T.H. e Hanratty, T.J. - *Use of Asymptotic Relations to Correlate Mass Transfer Data in Packed Beds* - Chemical Engineering Science, **26**, pp. 1581-1589, 1971.
- [24] Levec, J. e Carbonell, R.G. - *Longitudinal and Lateral Thermal Dispersion in Packed Beds. Part I: Theory* - AIChE Journal, **31**, pp. 581-590, 1985.
- [25] Levec, J. e Carbonell, R.G. - *Longitudinal and Lateral Thermal Dispersion in Packed Beds. Part II: Comparison Between Theory and Experiment* - AIChE Journal, **31**, pp. 591-602, 1985.
- [26] Li, C. H. e Finlayson, B. A. - *Heat Transfer in Packed Beds - A reevaluation* - Chemical Engineering Science, **33**, pp. 1055-1066, 1977.
- [27] Lu, P.C. - *Solid-Fluid Response of Packed-Beds Regenerators by Crumps Numerical Inversion of Laplace Transforms* - Transactions of ASME - Journal of Solar Energy Engineering, **109**, pp. 121-126, 1987.
- [28] Masamune, S. e Smith, J.M. - *Thermal Conductivity of Beds of Spherical Particles* - Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals, **2**, pp. 136-143, 1963.
- [29] Miyauchi, T, Kataoka, H. e Kikuchi, T. - *Gas Film Coefficient of Mass Transfer in Low Peclet Number Region for Sphere Packed Bed* - Chemical Engineering Science, **31**, pp. 9-13, 1976.
- [30] Phillips, W.F. - *Effects of Stratification on The Performance of Solar Air Heating Systems* - Solar Energy, **26**, pp. 175-180, 1981.
- [31] Raiz, M. - *Analytical Solutions for Single- and Two-Phase Models of Packed-Bed Thermal Storage Systems* - Transactions of ASME - Journal of Heat Transfer, **99**, pp. 489-492, 1977.
- [32] Schnoebelen, K.S. e Abdel-Khalik, S.I. - *Local Nusselt Numbers for Flowing Packed Particle Beds in Circular Tubes With Constant Wall Heat Flux* - Transactions of ASME - Journal of Heat Transfer, **108**, pp. 466-469, 1986.

- [33] Spiga, G. e Spiga, M. - *A Rigorous Solution to a Heat Transfer Two Phase Model in Porous Media and Packed Bed* - International Journal of Heat and Mass Transfer, **24**, pp. 355-564, 1981.
- [34] Thompson, R.J. e Jacobs, H.R. - *Mass and Simultaneous Convective Heat Transfer for Flow in a Packed Bed of Spherical Particles* - AIChE Symposium Series - Heat Transfer Niagara Falls, **80**, n°236, pp. 240-248, 1984.
- [35] Turner, G.A. e Otten, L. - *Values of Thermal (and Other) Parameters in Packed Beds* - Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development, **12** pp. 417-424, 1973.
- [36] Turner, M.J. e Turner, G.A. - *Simultaneous Computation of Heat Transfer and Dispersion Coefficients and Thermal Conductivity Value in a Packed Bed of Spheres: II. Technique of Computing Numerical Values* - AIChE Journal, **17**, pp. 590-595, 1971.
- [37] Wakao, N. *Particle-to-Fluid Transfer Coefficients and Fluid Diffusivities at Low Flow Rate in Packed Beds* - Chemical Engineering Science, **31**, pp. 1115-1122, 1976.
- [38] Wakao, N., Kaguei, S. e Funazkri, T. - *Effect of Fluid Dispersion Coefficients on Particle-to-Fluid Heat Transfer Coefficients in Packed Beds - Correlation of Nusselt Number* - Chemical Engineering Science, **34**, pp. 325-336, 1979.
- [39] Wakao, N., Kaguei, S. e Nagai, H. - *Critique on Determination of Packed-Bed Particle-to-Fluid Heat Transfer Coefficients from Steady Radial Heat Transfer Measurements* - Chemical Engineering Science, **32**, pp. 1261-1265, 1977.
- [40] White, H.C. e Korpela, S.A. - *On the Calculation of the Temperature Distribution in a Packed Bed for Solar Energy Applications* - Solar Energy, **23**, pp. 141-144, 1979.