



Simulação por autômatos celulares do
transporte pneumático de adsorventes para
tratamento de gás ácido emitido na
combustão de biomassa

Karoline da Mota Coelho

Projeto Final de Curso

Orientador:

Prof(a). Heloisa Lajas Sanches, D.Sc.

Fevereiro de 2015

SIMULAÇÃO POR AUTÔMATOS CELULARES DO TRANSPORTE PNEUMÁTICO DE ADSORVENTES PARA TRATAMENTO DE GÁS ÁCIDO EMITIDO NA COMBUSTÃO DE BIOMASSA

Karoline da Mota Coelho

Projeto Final de Curso submetida ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro de Bioprocessos.

Aprovado por:

Maria Antonieta P. Gimenes Couto, D.Sc, EQ/UFRJ

Bernardo Dias Ribeiro, D.Sc, EQ/UFRJ

Rafael Pereira do Carmo, Quím. Industrial, EQ/UFRJ

Orientado por:

Prof(a). Heloisa Lajas Sanches, D.Sc.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil

Fevereiro de 2015

Coelho, Karoline da Mota.

Simulação por autômatos celulares do transporte pneumático de adsorventes para tratamento de gás ácido emitido na combustão de biomassa / Karoline da Mota Coelho.

Rio de Janeiro: UFRJ / EQ, 2015.

xv, 100p.; il.

(Projeto Final) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2015.

Orientador: Prof(a). Heloisa Lajas Sanches.

1. Lattice-gas. 2. Autômato celular. 3. Transporte pneumático. 4. Projeto Final

(Graduação – UFRJ / EQ). 5. Heloisa Lajas Sanches. I. Título.

Dedico esse trabalho aos minha mãe, Ana Cristina, que me deu a melhor educação possível e apoio incondicional.

“O modo mais eficaz de seres útil à tua pátria é educares o teu filho”.

Ramalho Ortigão

AGRADECIMENTOS

A Deus, por ter me concedido saúde e sabedoria para a elaboração deste trabalho e por iluminar o caminho trilhado.

Aos meus pais, Ana Cristina e Jaime, pelos anos de preocupação com o retorno da faculdade, pelas noites que me obrigaram a parar de estudar e descansar e pelas outras infinitas atitudes que me cobrem de amor.

Ao minha irmã Juliana pelas conversas sempre longas mas que nunca falharam em me relaxar e pelo apoio e amizade de apenas uma vida inteira.

Ao meu irmão Mateus por sempre reservar um bom filme para assistimos juntos depois das minhas provas e pelo apoio e amizade de apenas uma vida inteira.

A minha orientadora, Prof. Dra Heloisa Lajas Sanches, por sua valiosa orientação, confiança, incentivo constante e todas as suas experiências que ela compartilhou comigo, não só referentes à pesquisa, mas também sobre vários outros aspectos da vida.

Gostaria de agradecer aos professores da Escola de Química, especialmente a prof^a Dra. Suzana Borschiver e prof^a. Dra. Maria Antonieta Peixoto Gimenes Couto por incentivarem em meu ensino e pelas contantes oportunidade que me oferecem de enriquece-lo.

Minha gratidão especial aos amigos que nesses anos de faculdades me proporcionaram grandes trocas, contribuições e crescimento.

As Eqzetas que me proporcionaram os melhores estudos e as melhores distrações. Meninas, a faculdade não teria tido a menor graça sem vocês.

Também agradeço a Rodrigo Massom por seu apoio na reta final desse trabalho, por ter cedido o seu computador para rodar o programa desse trabalho, mas mais ainda pelo seu talento em me fazer sorrir.

A todos que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

Resumo do Projeto Final apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para conclusão do curso de Engenharia de Bioprocessos.

SIMULAÇÃO POR AUTÔMATOS CELULARES DO TRANSPORTE PNEUMÁTICO DE ADSORVENTES PARA TRATAMENTO DE GÁS ÁCIDO EMITIDO NA COMBUSTÃO DE BIOMASSA

Karoline da Mota Coelho

Fevereiro, 2015

Orientador: Prof(a). Heloisa Lajas Sanches, D.Sc

Nas últimas décadas, devido a um aumento da atenção ambiental e do rigor dos regulamentos relacionados à emissão de gases ácidos (especialmente, as emissões de HCl e SO₂) em plantas industriais deverão ser reduzidas para valores aceitáveis. Assim, há um interesse renovado em métodos de controle das emissões de gases industriais. A Injeção de Adsorvente Seco (*Dry sorbent injection-DSI*) é uma tecnologia alternativa, que é eficaz na remoção de SO₂ e de HCl, sem as desvantagens dos sistemas tradicionais. Os adsorventes DSI utilizados no mercado atual para o controle de gases ácidos são adsorventes à base de cálcio (cal hidratada) ou à base de sódio (trona, bicarbonato de sódio) que são materiais difíceis de transportar. O transporte pneumático é, desse modo, um método atraente para transmissão dessas partículas. No entanto, o projeto da rede de tubulação para transporte pneumático ainda é largamente baseada no empirismo. Visando a compreensão de uma forma mais integrada os mecanismos relacionados ao fenômeno de transporte de partículas em sistemas de transporte pneumático na direção horizontal, o presente trabalho tem por objetivo simular o transporte pneumático de bicarbonato de sódio, nas condições de operação descritas em um estudo de caso da literatura. Para a simulação, utilizou-se o método dos autômatos celulares, um método discreto caracterizado pela modelagem simples e baixo custo computacional. A simulação foi realizada utilizando-se um código escrito no software Matlab. Através do Matlab foi realizada também a visualização do padrão de escoamento do sistema particulado. Uma vez que os autômatos celulares simulam um sistema adimensional, foi necessária uma análise dimensional do sistema, de forma a obter os grupos adimensionais relevantes para o estudo do transporte pneumático e impor a similaridade entre o sistema simulado e o sistema real. Os resultados obtidos mostram, primeiramente, que a análise dimensional é uma ferramenta indispensável para a utilização dos autômatos celulares, pois através dela foi possível determinar o valor dos parâmetros a serem utilizados na simulação lattice-gas. Através da ferramenta “*Profile*” do Matlab foi possível identificar gargalos do código computacional e através de estratégias reduzir o tempo de simulação. Além disso, foi verificado um escoamento da suspensão em “golfadas”, de forma que a concentração de partículas apresentou variação com o tempo em uma mesma seção da tubulação.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	10
LISTA DE TABELAS	12
LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS	13
LISTA DE SIMBOLOS.....	14
1 INTRODUÇÃO	16
1.1 APRESENTAÇÃO E IMPORTÂNCIA DO ESTUDO	16
1.2 OBJETIVOS DO ESTUDO.....	20
1.3 ESTRUTURA DO ESTUDO	21
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	22
2.1 EMISSÃO DE GASES PELA COMBUSTÃO DE BIOMASSA.....	22
2.2 GESTÃO AMBIENTAL – LEGISLAÇÕES PARA EMISSÃO DE GASES.....	25
2.3 TECNOLOGIAS DE CONTROLE DE EMISSÃO – A INJEÇÃO DE ADSORVENTE A SECO.....	29
2.3.1 Adsorventes do DSI.....	32
2.4 TRANSPORTE PNEUMÁTICO.....	35
2.5 ESCOAMENTO DE SUSPENSÕES SÓLIDO GÁS NA DIREÇÃO HORIZONTAL.....	40
3 METODOLOGIA.....	44
3.1 AUTÔMATOS CELULARES	44
3.1.1 Componentes de um Autômato Celular.....	44
3.2 DESENVOLVIMENTO DO PROGRAMA COMPUTACIONAL.....	47
4 RESULTADOS	53
4.1 ANÁLISE DIMENSIONAL	53
4.1.1 Relevância.....	53
4.1.2 Sistema real: Estudo de caso	54
4.1.3 Associação dos parâmetros do lattice-gas aos parâmetros do sistema real	55
4.1.4 Grupos adimensionais relevantes.....	63
4.1.5 Procedimento para projeto da tubulação pneumática através dos nomogramas e do modelo <i>lattice-gas</i> aplicando a similaridade dos grupos π	65

4.2	ESTRATÉGIA PARA REDUZIR O TEMPO COMPUTACIONAL DE SIMULAÇÃO.....	75
4.3	TEMPO CARACTERÍSTICO.....	78
4.4	ANÁLISE DO PADRÃO DE ESCOAMENTO	79
5	CONCLUSÃO.....	84
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	86
	GLOSSÁRIO	92
	APÊNDICE 1	93
	APÊNDICE 2.....	96

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Perspectiva de Consumo Energético para um horizonte de tempo até 2050.	17
Figura 2 - Reação de Combustão da Biomassa.	22
Figura 3 - Componentes de um Sistema de Injeção a Seco	32
Figura 4 - Aplicabilidade dos adsorventes alcalino para controle de gases ácidos. ...	33
Figura 5 - Reação de remoção de gases ácidos utilizando adsorventes a base de sódio.	34
Figura 6 - Efeito da temperatura sobre a área superficial da partícula de bicarbonato de sódio.	34
Figura 7 - Sistema de Transporte Pneumático.	37
Figura 8 - Fluxo de ar na fase diluída na direção horizontal. (a) Velocidade do ar acima da velocidade mínima de transporte; (b) Velocidade do ar abaixo da velocidade mínima de transporte.	39
Figura 9 - Células de um autômato	45
Figura 10 - Representação do modelo unidimensional (1D), bidimensional (2D) e tridimensional (3D).	45
Figura 11 - Vários tipos de vizinhança. Células em cinzento representam as células de vizinhança das células em preto (raio corresponde ao raio da vizinhança).	46
Figura 12 - Rede triangular bidimensional (células hexagonais).	47
Figura 13 - Sistema de Coordenadas da área de simulação.	48
Figura 14 - Sistema de Coordenadas da área de simulação	49
Figura 15 - Codificação das direções e estados das partículas no “ <i>lattice</i> ”.	49
Figura 16 – Regras de colisão (a) entre partículas e (b) entre partículas e as paredes na simulação de sistemas particulados através de autômatos celulares. ...	50
Figura 17 – Esquema de cores para a visualização da concentração local de partículas.	51
Figura 18 – Diagrama de blocos que representa a simulação do escoamento de uma suspensão pelo <i>lattice-gas</i>	52
Figura 19 - Colisão entre duas esferas lisas, inelásticas 1 e 2 de diâmetro d_p	56

Figura 20 - Regra de colisão entre partículas.....	57
Figura 21 - Aplicação do modelo de colisão inelástica à regra de colisão entre duas partículas do <i>lattice</i> – <i>gas</i>	57
Figura 22 - Camada de partículas adjacente à uma parede rígida.....	60
Figura 23 - Regra de colisão partícula - parede.	60
Figura 24 – Parâmetro de distância no “lattice”	62
Figura 25 - Cálculo da velocidade terminal das partículas sólidas.	67
Figura 26 - Nomograma 1 para determinar parâmetros de projeto de uma linha de transmissão pneumática	73
Figura 27 - Nomograma 2 para determinar parâmetros de projeto de uma linha de transmissão pneumática.....	74
Figura 28 - Janela de Informações resultante da ferramenta “ <i>Profiler</i> ”	76
Figura 29 - Janela de Informações resultante da ferramenta <i>Profiler</i> executada sobre o programa <i>simul2</i> atual.....	77
Figura 30 - Janela de Informações resultante da ferramenta <i>Profiler</i> executado sobre o programa <i>visualiza</i>	77
Figura 31 - Visualização da simulação do transporte horizontal de partículas e sua evolução em passos de tempo selecionados, na seção da tubulação compreendida entre $n_y = 10200$ e $n_y = 11000$	83

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Análise de diferentes tipos de biomassa (% em massa, base seca).....	24
Tabela 2 - Limites de emissão <i>Boiler</i> MACT para caldeiras de Biomassa	28
Tabela 3 – Comparação entre tecnologias de controle de gases ácidos.	30
Tabela 4 - Desempenho do Bicarbonato de sódio para remoção de HCl e SO ₂ do gás exausto de um incinerador de resíduos sólidos.....	54
Tabela 5 - Propriedades da Trona e do Bicarbonato de sódio comercializados pela Solvay Chemicals.....	55
Tabela 6 – Processo iterativo para cálculo da velocidade terminal	68
Tabela 7 - Velocidade do ar necessária para transporta sólidos de várias densidades.....	69
Tabela 8 - Parâmetros para a simulação do transporte pneumático	79

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AC	Autômatos Celulares
CONAMA	Conselho Nacional do Meio Ambiente
DOE	U.S. Department of Energy
DSI	Dry sorbent injection
EIA	Energy Information Administration
EPA	United States Environmental Protection Agency
EPE	Empresa de Pesquisa Energética
HAP	Hazardous Air Pollutant
IEA	International Energy Agency
MACT	Maximum Achievable Control Technology
MME	Ministério de Minas e Energia
NSR	Normalized Stoichiometric Ratio
PCS	Poder Calorífico Superior
SBC	Bicarbonato de Sódio
SSC	Sequicarbonato de Sódio
UGE	Unidades de Geração de Energia
VCL	Valor Calorífico Líquido

LISTA DE SIMBOLOS

C_D	Coeficiente de arraste
φ	Coeficiente de especularidade
e_p	Coeficiente de restituição
Δs_{LG}	Comprimento da aresta da rede do lattice-gas
l	Comprimento da linha de injeção
C_s	Concentração de sólidos da suspensão em massa por volume
R	Constante universal dos gases
ρ_A	Densidade do ar
ρ_s	Densidade do sólido
d_p	Diâmetro da partícula
$d_{p_{LG}}$	Diâmetro da partícula no lattice-gas
D_{LG}	Diâmetro da rede do lattice-gas
D	Diâmetro da tubulação
n_{part}	Número de partículas no lattice-gas
Re	Número de Reynolds
n_x	Números de vértices na direção x da rede do lattice-gas
n_y	Números de vértices na direção y da rede do lattice-gas
<i>passo</i>	Parâmetro do programa computacional que estipula a quantidade de loops que serão executados na simulação
P	Pressão da tubulação
p	Probabilidade, no lattices –gas, de uma partícula ficar parada após o choque com outra partícula
p_{grav}	Probabilidade, no lattices –gas, de uma partícula isolada começar a cair
p_{wall}	Probabilidade, no lattices –gas, de uma partícula que colide obliquamente sofrer uma deflexão para cima em sua trajetória
\emptyset	Razão de sólidos
\emptyset_V	Razão volumétrica de sólidos
$\emptyset_{V_{LG}}$	Razão volumétrica de sólidos no lattice-gas
T	Temperatura da tubulação
Δt_{LG}	Tempo em que uma partícula percorre o comprimento da aresta da rede do lattice-gas
Δt	Tempo real
Q	Vazão da suspensão sólido-ar
\dot{m}_a	Vazão mássica de ar
\dot{m}_s	Vazão mássica de sólidos
Q_A	Vazão volumétrica de ar
Q_S	Vazão volumétrica de sólidos

U	Velocidade da suspensão sólido-ar
v_t	Velocidade terminal
$v_{t_{LG}}$	Velocidade terminal da partícula no lattice-gas
μ_A	Viscosidade do ar
V_A	Volume ocupado pelo ar dentro da tubulação
V_S	Volume ocupado pelo sólido dentro da tubulação

1 INTRODUÇÃO

1.1 APRESENTAÇÃO E IMPORTÂNCIA DO ESTUDO

Há pouco mais de 100 anos a biomassa começou a perder sua liderança histórica para a energia do carvão, e depois, com o crescimento contínuo do uso do petróleo e do gás natural, a utilização da biomassa foi reduzida praticamente às residências particulares em regiões agrícolas. Porém hoje, em maior ou menor intensidade, a maioria dos países, sejam eles desenvolvidos ou não, estão promovendo ações para que as energias alternativas renováveis tenham participação significativa em suas matrizes energéticas.(CORTEZ, 2008)

A expectativa com a diminuição das reservas de petróleo e a elevação dos custos para sua obtenção, aliada à crescente preocupação com a preservação ambiental vêm exigindo soluções tecnológicas imediatas para as necessidades de consumo. Este movimento em direção oposta à exploração das fontes fósseis de matéria-prima rompe um paradigma global, mantido por décadas, que foi base para o desenvolvimento de toda uma cadeia industrial.

De acordo com CORTEZ et al. (2008), dentre as tecnologias das fontes energéticas alternativas renováveis, já suficientemente maduras para serem empregadas comercialmente, somente a biomassa, utilizada em processos modernos com elevada eficiência tecnológica, possui a flexibilidade de suprimento energético tanto para a produção de energia elétrica quanto para o setor de transportes.

A Agência Internacional de Energia calcula que a biomassa e um conjunto de outras fontes de energia renováveis constituirão quase três quartos do consumo de energia primária em 2050 (IEA, 2012). Essa projeção pode ser vista na Figura 1.

MINISTÉRIO DE MINAS E ENERGIA et al. (2007) define o termo biomassa como a matéria vegetal gerada pela fotossíntese e seus diversos produtos e subprodutos derivados, tais como as florestas, as culturas e os resíduos agrícolas, os dejetos animais e a matéria orgânica que é contida nos rejeitos industrial e urbano.

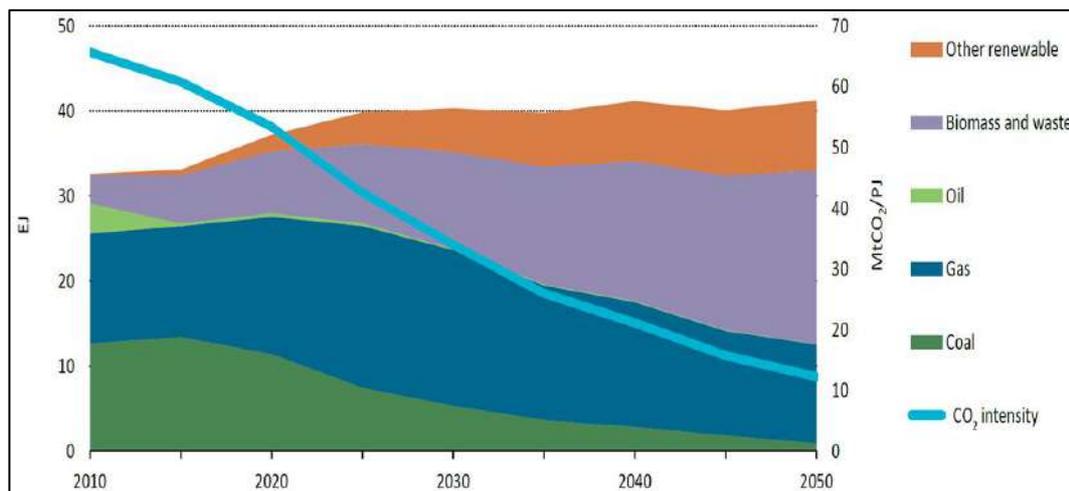


Figura 1 - Perspectiva de Consumo Energético para um horizonte de tempo até 2050. (IEA, 2012)

Uma miríade de tecnologias de conversão energética da biomassa está disponível, e resultam em uma também ampla variedade de produtos energéticos, nos três estados físicos (sólido, líquido e gasoso), para geração de calor, energia elétrica e combustível para o transporte. As três principais rotas tecnológicas de conversão da biomassa energética disponíveis são:

- Conversão termoquímica: que inclui a combustão direta, a gaseificação e a pirólise;
- Conversão bioquímica: que inclui a digestão anaeróbica, a fermentação/destilação e a hidrólise;
- Conversão físico-química: que inclui a compressão, extração e esterificação.

Para a abordagem deste trabalho, adota-se “energia de biomassa” como o processo de conversão termoquímica que utiliza uma matéria-prima, ou seja, a biomassa, quer na forma de produtos de origem animal ou vegetal (como exemplo, óleos vegetais ou gorduras animais) ou ainda rejeitos de origem orgânica, como, por exemplo, bagaço e palha de cana, para gerar calor e energia.

Uma variedade grande de tecnologias capazes de converter a biomassa em energia está disponível através da via termoquímica, e sua diferenciação está associada à quantidade de oxigênio que é fornecido ao processo, tendo como referência o valor do coeficiente estequiométrico, resultando nas vias de combustão direta, pirólise e gaseificação. (Ministério de Minas e Energia et al., 2007)

A energia de biomassa vem sendo promovida como um substituto acessível, local, e renovável para os combustíveis fósseis. Divulgada como "limpa" e "verde", a eletricidade gerada em usinas de biomassa é elegível pela maior parte da política de renováveis como sendo equivalente à energia provinda de fontes eólica e solar, e um número crescente de incentivos financeiros existem para a instalação de caldeiras de biomassa.

Nos Estados Unidos (EUA) o número de instalações de energia de biomassa, tanto grandes como pequenas, expandiu enormemente em todo o país em resposta a incentivos. A EIA (*Energy Information Administration*) informa que desde 2008 há aproximadamente 300 usinas de biomassa produzindo um número estimado de 7,173 megawatts (MW) no país. As instalações mais antigas nos Estados Unidos estão em funcionamento desde 1930. A maioria dos queimadores (*burners*) de biomassa são caldeiras (*boilers*) industriais. Cerca de metade usa madeira como seu principal combustível, mais especificamente o licor de madeira da indústria de papel e celulose, e a maioria utiliza a madeira não processada como combustível secundário. Esta infraestrutura gerou cerca de 37 milhões de megawatts-hora (MWh) em 2010, ou aproximadamente 0,9% da eletricidade gerada nos Estados Unidos naquele ano. E outros tipos de biomassa, definido pela EIA como consistindo sobretudo da parte biogênica dos resíduos urbanos, foi responsável por 0,46% da geração de eletricidade dos EUA em 2010. (BOOTH, 2012).

O surto de desenvolvimento da bioenergia que ocorre em torno dos Estados Unidos e internacionalmente é principalmente impulsionado pelo tratamento da biomassa como combustível "renovável" e os subsídios que acompanham essa designação. No entanto, ao contrário de outras tecnologias de energia renovável, a queima da biomassa produz grandes quantidades de emissões de gases de poluição do ar, incluindo partículas e gases ácidos.

Nos últimos anos, as agências reguladoras de todo o mundo estão definindo normas mais restritivas de emissões de ar. Dois gases ácidos, o ácido clorídrico (HCl) e o dióxido de enxofre (SO₂), estão sob escrutínio intenso para redução de suas emissões. Nesse contexto, há um interesse renovado em métodos de controle das emissões de gases industriais.

A maioria dos sistemas de purificação tradicionais satisfazem às normas, mas normalmente tem altos custos de capital, têm requisitos espaciais significativos para o equipamento, e são difíceis de manter. A Injeção de Adsorvente Seco (*Dry sorbent*

injection - DSI) é uma tecnologia alternativa, que tem sido eficaz na remoção de SO₂ e de HCl, sem as desvantagens dos sistemas tradicionais. (SOLVAY CHEMICALS, 2005.)

A DSI é um processo utilizado para controlar os gases ácidos por injeção de um adsorvente em pó para dentro da corrente de gases de combustão. Os materiais adsorventes são geralmente reagentes à base de cálcio ou à base de sódio.

Os adsorventes alcalinos a base de sódio têm reputação de serem materiais difíceis de transportar. (MILLS, 2004) Essa dificuldade se deve à sua alta reatividade, sensibilidade a umidade do ar e ao seu pH elevado; em soluções concentradas podem irritar os olhos, vias respiratórias e pele. Nesse contexto, o transporte pneumático é um método atrativo para transferência, pois os materiais são trazidos até o ponto de fornecimento por meio de uma tubulação totalmente fechada.

Durante a pesquisa bibliográfica realizada, foram encontrados poucos documentos publicados que contivessem uma descrição detalhada do projeto de uma linha de transmissão pneumática e esses poucos ainda são largamente baseados no empirismo. Dessa forma, o estudo dos sistemas sólido-fluido é essencial nessa área de pesquisa, pois a simulação de tais sistemas particulados é uma ferramenta útil para o projeto de equipamentos industriais como um sistema de transporte pneumático.

A simulação clássica de misturas sólido-fluido baseia-se na solução das equações de conservação, que, em geral, são equações diferenciais parciais (COULSON et al., 2002; DIEHL, 2008). A solução destas equações não é trivial: são necessários métodos específicos para discretização das equações e para solução numérica das equações discretizadas, como os métodos de fluidodinâmica computacional. Os métodos de dinâmica molecular também vêm sendo utilizados para representar o comportamento de sistemas particulados. Em tais simulações, resolvem-se as equações de conservação de momento para cada uma das partículas do sistema. As simulações de sistemas particulados através destas classes de métodos vêm obtendo bons resultados, mas o tempo e o esforço computacional necessários para a simulação de sistemas com muitas partículas ainda podem torná-las proibitivas.

Por estes motivos, parece interessante a simulação de sistemas particulados através de Autômatos Celulares (AC). Os AC são arranjos de células, as quais

podem assumir um número finito de estados, que são atualizados em passos discretos de tempo, através de regras determinísticas ou estocásticas (WOLFRAM, 2002; WOLF-GLADROW, 2005). Os AC podem descrever comportamentos complexos a partir da repetição, por milhares de vezes, de regras muito simples. A natureza discreta dos AC torna-os potencialmente úteis para a simulação em computadores.

Operar um Sistema de Transporte Pneumático de maneira estável representa uma grande economia de consumo de energia para a empresa, o que evidentemente possibilita uma melhor redistribuição de seu capital em outros segmentos levando-a a oferecer ao consumidor final, direta ou indiretamente, produtos de qualidade a uma melhor relação de custo-benefício. GOMES (2006) concluiu que um dos parâmetros de maior importância no alcance dessa estabilidade operacional certamente é a otimização da velocidade de transporte de modo que se possam transportar materiais particulados a uma mínima velocidade possível. Determinar uma forma rápida de se testar diferentes velocidades e definir arranjos que não tenham depósito de partículas é uma das metas que esse trabalho pretende alcançar, a partir da simulação de um sistema pneumático de injeção a seco de adsorvente a base de sódio através de autômatos celulares.

Para garantir que o modelo desenvolvido seja corretamente aplicável a sistemas reais propõe-se uma análise dimensional do sistema *lattice-gas* e o sistema real, que será nesse trabalho representado por um estudo de caso da empresa Solvay. (KONG et al., 2010 - <http://www.solvair.us/EN/resourcematierial>)

1.2 OBJETIVOS DO ESTUDO

O objetivo geral deste estudo consiste em propor e fornecer de forma detalhada uma nova metodologia para o projeto de uma linha de transmissão pneumática, por meio de um programa gerado no MATLAB segundo a metodologia *lattice-gas* dos autômatos celulares.

Com este trabalho, pretende-se:

- Verificar o padrão de escoamento visualmente (se há, por exemplo, regiões com acúmulo de sólidos);
- Verificar graficamente perfis de concentração dentro da tubulação utilizada para o transporte pneumático.

1.3 ESTRUTURA DO ESTUDO

A fim de atingir os objetivos estabelecidos, este estudo encontra-se organizado em 5 capítulos.

No primeiro capítulo apresenta-se os objetivos e motivações centrais do trabalho e a organização da mesmo.

No segundo capítulo são abordados os principais conceitos necessários à compreensão do trabalho e os estudos desenvolvidos por outros pesquisadores na área de transporte pneumático de sólidos na direção horizontal.

No terceiro capítulo são detalhados os procedimentos metodológicos aplicados no presente trabalho para construção da aplicação computacional adotada.

No quarto capítulo são demonstrados os procedimentos da análise dimensional para validar o programa computacional desenvolvido nesse trabalho e os principais resultados obtidos com a utilização do programa e responde-se aos objetivos do trabalho.

No quinto capítulo deste trabalho são apresentadas as conclusões e as limitações da presente tese, assim como são sugeridas propostas para a continuidade deste estudo.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O objetivo deste capítulo é apresentar os principais conceitos necessários à compreensão do trabalho e detalhar os estudos desenvolvidos por outros pesquisadores sobre o escoamento de suspensões sólido-gás na direção horizontal. De modo a estar a par com os desenvolvimentos mais recentes nesse campo e fazer um trabalho de pesquisa mais relevante e focalizado.

2.1 EMISSÃO DE GASES PELA COMBUSTÃO DE BIOMASSA

A combustão de biomassa envolve uma série de reações químicas em que principalmente o carbono é oxidado a dióxido de carbono e hidrogênio é oxidado a água. No entanto, existem muitos elementos que entram em combustão. A composição elementar da biomassa inclui principalmente carbono (C), hidrogênio (H), nitrogênio (N), enxofre (S), cloro (Cl) e oxigênio (O). Em menor proporção, outros elementos estão presentes na biomassa como potássio (K), sódio (Na), magnésio (Mg), cálcio (Ca), fósforo (P) e alguns metais pesados: como arsênio (As), cádmio (Cd), cromo (Cr), cobre (Cu), mercúrio (Hg), níquel (Ni), chumbo (Pb) e zinco (Zn). A Figura 2 ilustra a fórmula empírica da combustão da biomassa. (SAIDURA et al., 2011)

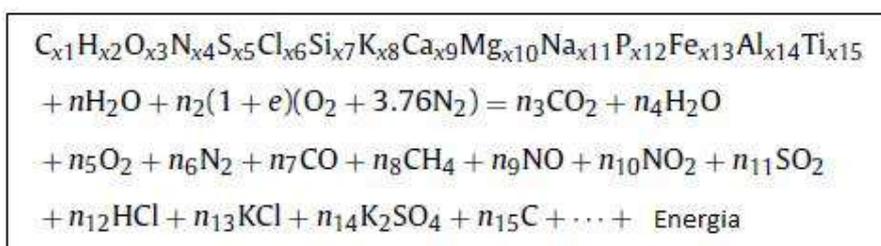


Figura 2 - Reação de Combustão da Biomassa. (Adaptado de SAIDURA et al., 2011)

SAIDURA et al. (2011) destaca que a inclusão de 15 elementos na fórmula empírica para o combustível é incompleta. Há muitos mais, especialmente no que diz respeito aos componentes inorgânicos que são muito importantes para a questão da combustão de biomassa e problemas associados, tais como incrustações e cinzas. O segundo termo reagente expressa a umidade no combustível. Se demasiada umidade está presente, o combustível não irá reagir espontaneamente.

O terceiro termo representa ar e é representado pela mistura binária simples de oxigênio e nitrogênio na proporção em volume de 21-79%. O lado do produto da reação é complexo. Os produtos principais são os que aparecem em primeiro lugar, mas há outros produtos que são produzidos durante a combustão, tais como CO, hidrocarbonetos (HC), óxidos de nitrogênio e de enxofre, bem como as espécies inorgânicas, tais como os cloretos alcalinos, sulfatos, carbonatos e silicatos. Os trabalhos de JENKINS et al. (1998) e DEMIRBAS (2005) também abordam essas diferentes características de combustão da biomassa.

A composição do gás de combustão ou gás exausto está relacionada com a composição do combustível e a quantidade de ar introduzido no ciclo de combustão. Composição química e propriedades físicas são muito diferentes entre biomassas, especialmente entre as matérias-primas agrícolas e lenhosas. Em geral, as biomassas lignocelulósicas agrícolas têm níveis mais elevados de N e Cl que biomassas lenhosas. A composição química final de várias biomassas é mostrada na Tabela 1.

Cada composto químico que compõe um combustível de biomassa terá um efeito no processo de combustão: carbono (C) afeta proporcionalmente poder calorífico superior (PCS); hidrogênio (H) afeta PCS e o valor calorífico líquido (VCL); oxigênio (O) afeta PCS e fornece parte da oxigênio para a reação de combustão; cloro (Cl) produz emissões de ácido clorídrico (HCl), cloro gasoso (Cl₂), formação de depósitos e corrosão, baixa a temperatura de fusão da cinza, e influencia a formação de cloretos alcalinos, dibenzo-p-dioxinas policloradas (PCDD) e dibenzofuranos policlorados (PCDF); nitrogênio (N) produz emissões de óxido de nitrogênio (NO_x); flúor (F) produz fluoreto de hidrogênio (HF) e corrosão; potássio (K) leva à corrosão (trocadores de calor, superaquecedores), diminui a temperatura de fusão da cinza, contribui para a formação de um aerossol e produz cinzas que podem ser utilizados para fertilização (nutrientes de plantas); sódio (Na) contribui para a corrosão, diminui a temperatura de fusão da cinza e leva à formação de um aerossol e metais pesados provocam emissões elevadas e formação de aerossóis (VAN LOO et al., 2008).

Componentes de emissão podem ser agrupados em duas categorias gerais, de acordo com o tipo de reação: componentes de uma combustão completa e componentes de uma combustão incompleta. Um processo de combustão completa ocorre quando todos os componentes da biomassa reagem com oxigênio suficiente

a partir do ar. Esta reação produz CO₂, NO_x, SO_x (especialmente na forma de SO e SO₂), HCl, metais pesados e material particulado. Uma combustão incompleta dos combustíveis resulta de falta de O₂ disponível, uma mistura insuficiente de ar e combustível na câmara de combustão, baixa temperatura de combustão ou um curto tempo de residência. Os componentes emitidos para a atmosfera como consequência da combustão incompleta incluem CO, compostos orgânicos voláteis, hidrocarbonetos aromáticos policíclicos, material particulado, PCDD, e pequenas quantidades de amônia (NH₃).

Tabela 1 - Análise de diferentes tipos de biomassa (% em massa, base seca)

(Adaptado de VILLENEUVE et al., 2012)

Biomassa	Porcentagem em massa de elementos importantes (% da matéria seca)					
	C	H	O	N	S	Cl
Madeira ^a	49–52	5.7–6.1	41.8–43.2	0.09–0.4	0.01–0.1	0.01–0.1
Salgueiro ^b	47.7–50.2	5.7–5.9	42.2–46.2	0.1–0.43	0.03–0.04	0.01
Palha de trigo	44.3	5.3	42.9	0.57	0.14	0.5
Palha de cevada ^c	46.8	5.31–5.5	40.1–41.9	0.41–0.76	0.06–0.12	0.41–0.98
Palha de centeio	47.6	5.9	42.4	0.42	0.09	0.23
Palha de milho ^d	44.6–47.1	5.4–6.0	39.6–44.4	0.41–0.74	0.05	0.05–1.48
Miscanthus ^e	47.9–48.5	5.4–5.5	41–41.8	0.54–0.56	0.05–0.11	0.18–0.21
Panicum ^e	41.2–42.4	5.0	48.7–51.1	0.31–1.34	0.04–0.11	0.01–0.47
Switchgras ^e	47.8	5.8	35.1	1.17	0.1	–
Gramma	45.1–46.3	4.9–5.2	34.8–36.8	2.01–3.37	0.15–0.2	1.09–0.75
Fibra de Sorgo	42.8	–	47.8	0.84	0.1	0.37

a Os valores incluem madeira macia, aglomerados de madeira e madeira não tratada.
b Os valores incluem chips de salgueiro e salgueiro não tratada.
c Os valores incluem palha de cevada de primavera, inverno e verão.
d Os valores incluem caule e planta inteira
e Tipo de Gramínia

A taxa de emissão e a composição dos gases de combustão também são influenciadas pelas propriedades físicas do combustível (tais como teor de umidade, densidade, porosidade, tamanho e área de superfície ativa), o tipo de equipamento de combustão (incluindo os aspectos operacionais e técnicos) e as medidas de redução de emissões. Em um processo de combustão, todas estas variáveis interagem e produzem uma grande variedade de níveis de emissão e de substâncias. (VILLENEUVE et al. 2012)

2.2 GESTÃO AMBIENTAL – LEGISLAÇÕES PARA EMISSÃO DE GASES

Um atributo desejável da energia renovável é que ela emita menos gases de efeito estufa do que a energia de combustíveis fósseis, e, até recentemente, a suposição de que a energia da biomassa era equivalente à energia eólica ou à solar raramente foi questionada. As emissões de CO₂ das usinas de bioenergia eram geralmente ignoradas. RENDEIRO (2008) destaca que segundo o Protocolo de Kyoto, por exemplo, as emissões de gases provenientes de biomassa não são contabilizadas como contribuição aos gases de efeito estufa, já que o carbono emitido foi fixado em uma planta durante o processo de fotossíntese, e sendo assim, poderá voltar a ser fixado novamente.

A Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (*United States Environmental Protection Agency*, EPA ou, às vezes, USEPA em inglês) gerou preocupação no setor de biomassa ao determinar quais fontes estariam sujeitas à autorização da emissão de gases de efeito estufa, e classificou a energia de biomassa como “não isenta”. A norma da EPA determina que os poluidores sejam obrigados a prestar contas de suas emissões de gases de efeito estufa na *Clean Air Act* e permite que a agência regule formalmente as emissões dos gases do efeito estufa. Assim, emissões a partir de biomassa ou de fontes biogênicas são tratadas da mesma forma que outras fontes de gases de efeito estufa.

A seção 112 da *Clean Air Act* exige ainda que a EPA estabeleça padrões nacionais de emissão para diferentes categorias de fontes de poluentes atmosféricos perigosos (*hazardous air pollutants* - HAP) (WOLF, 2011). Assim ficou legalmente determinado que a EPA regulasse a emissão de HAP por fontes industriais.

Para cumprir esta meta, a EPA concluiu em 20 de dezembro de 2012 os padrões MACT - *Maximum Achievable Control Technology* (Tecnologia de Controle de Máximo Alcance). (DOE, 2013) As normas MACT utilizam as emissões de HAP de melhor desempenho, máxima possível, de fontes industriais para definir o " piso MACT", ou seja, o novo padrão mínimo que uma indústria deve pelo menos satisfazer, a fim de estar dentro da conformidade. A expressão "Tecnologia de Controle" não se limita apenas à tecnologia, mas também abrange os processos, métodos, sistemas e técnicas que são utilizados em instalações para reduzir suas emissões de HAP. Sob as normas MACT, a tecnologia e práticas de trabalho em instalações que produzem as mais baixas emissões de HAP são usadas para definir os padrões para o resto da indústria. Os dados do modelo mais eficiente da indústria de *boilers/caldeiras* foi utilizado para determinar os regulamentos *Boiler MACT* para todas as outras *boilers/caldeiras* industriais novas e existentes. Desta forma, a EPA garante que as empresas que colocam o tempo, dinheiro e esforço em suas tecnologias de controle não estão em desvantagem quando comparados com aquelas que não o fazem. Além disso, baseando-se nas regras *Boiler MACT* sobre a tecnologia já comprovada, os padrões MACT dessa indústria são tidos como realisticamente alcançáveis. (CHAMBERLAIN, A., 2014)

A regra de *Boilers* industriais MACT aplica-se às caldeiras industriais, comerciais e institucionais e aquecedores de processo que estão localizados em instalações consideradas importantes fontes de emissões de HAP. Isso inclui todas as instalações cujas operações emitem coletivamente mais de 10 mil toneladas por ano de um único HAP ou 25 mil toneladas por ano de qualquer combinação de HAPs. A regra exige que cada caldeira, baseada em sua subcategoria, atenda aos limites de emissão e/ou padrões de práticas de trabalho e demonstrem conformidade tanto numa base anual quanto contínua (WOLF, 2011).

Essencialmente, todas as caldeiras movidas a queima de combustível sólido, líquido e gás, com uma capacidade de entrada de calor superior a 10 MMBtu/hora deve atender aos limites de emissão e limites operacionais para os seguintes HAPs: Mercúrio (Hg), Ácido clorídrico (HCl) , incluindo SO₂ como uma alternativa a HCl; Material particulado; Monóxido de carbono (CO). (THIEL, 2012). Os limites de emissão são baseados no estado da caldeira (existente ou novo), tipo de combustível e tipo de caldeira. As subcategorias dos sólidos combustíveis é possivelmente o mais impactante grupo. Os limites de emissão para caldeiras a

combustível sólido existentes são apresentados na Tabela 2. Limites de emissão para novas caldeiras são ainda mais rigorosos.

DOE (2013) afirmou na regra final do MACT que as empresas existentes terão três anos, a partir da emissão da norma, para implementar as novas exigências, e, se necessário, poderão solicitar mais um ano. Isto significa que as fontes existentes terão no máximo até o dia 31 de janeiro de 2017.

No Brasil, o Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA), através da Resoluções n. 436 de 22 de dezembro de 2011 e n. 382 de 26 de dezembro de 2006, estabelece limites máximos de emissão de poluentes atmosféricos para fontes fixas instaladas ou com pedido de licença de instalação anterior a 02 de janeiro de 2007 (Resolução n. 436/2011) e também para fontes instaladas após essa data (Resolução n. 382/2006). Para que as empresas se instalem ou permaneçam operando é necessário conhecer os poluentes gerados e a forma de controle de emissão dos gases para diminuir o impacto. Isto é, qualquer empresa que possua uma caldeira e forno a óleo, a madeira ou a gás, deve possuir um sistema de controle de poluentes e ser devidamente monitorada. Assim também ocorre com as indústrias de combustão externa de biomassa de cana-de-açúcar, de derivados da madeira, de celulose, de refino do petróleo, de produção de cimento e fábricas de vidros e fertilizantes. Estas devem observar o tipo de poluente e os padrões estabelecidos para controle da poluição do ar previstos nos anexos I a XIII da Resolução n. 436/2011 e n. 382/2006. (CONAMA, 2006 e 2011)

O aumento do rigor da legislação e dos regulamentos de fixação têm impulsionado pesquisas e esforços do projeto no mercado de caldeiras industriais para melhorar suas tecnologias de mitigação de emissões e para reduzir os poluentes dos gases de combustão para cada vez menores níveis de concentração. WU et al. (2004) relatam que foram propostas mais de 250 técnicas de dessulfurização de gás de combustão (*Fuel Gas Desulfurization - FGD*) desenvolvidas a nível mundial. As unidades de combustão de geração de energia (UGE) precisam encontrar soluções que atendam os padrões de mitigação, assim como melhorar a relação custo-benefício e o funcionamento de suas plantas.

Dois gases ácidos, o ácido clorídrico (HCl) e o dióxido de enxofre (SO₂), estão sob escrutínio intenso para redução de suas emissões. (SOLVAY CHEMICALS, 2005).

Tabela 2 - Limites de emissão *Boiler* MACT para caldeiras de Biomassa

(Adaptado de BELL, 2013)

Caldeiras/Boilers	HCl lb/MMBtu	Hg lb/TBtu	PM lb/MMBtu	CO (ppm @ 3% O₂)
Fornalha úmida/ Grelha Inclinada / Outros	0,0022 _{a, b}	8.0 E-07 _a 5.7 E-06 _b	0.030 (2.6 E-05) _a	620 _a
			0.037 (2.4 E-04) _b	1500 _b
Estufa - Fornalha seca/ Grelha Inclinada / Outros			0.030 (4.0 E-03) _a	460 _a
			0.32 (4.0 E-03) _b	460 _b
Leito Fluidizado			0.00098(8.3 E- 05) _a	230 _a
			0.11 (1.2 E-03) _b	470 _b
Queimador de Suspensão			0.030 (6.5 E-03) _a	2400 _a
			0.051 (6.5 E-03) _b	2400 _b
Fornos holandeses / Queimadores Pilha			0.0032 (3.9 E-05) _a	330 _a
			0.28 (2.0 E-03) _b	770 _b
Pilhas de Combustível			0.020 (2.9 E-05) _a	910 _a
			0.020 (5.8 E-03) _b	1100 _b
Grelha Híbrida de Suspensão			0.026 (4.4 E-04) _a	1100 _a
			0.44 (4.5 E-04) _b	2800 _b
a – limite de emissão para caldeiras novas				
b – limite de emissão para caldeiras já existentes				

A redução das emissões de HCl é importante, uma vez que suas emissões são atualmente regulamentadas devido ao seu poder corrosivo e por contribuir para a chuva ácida. Além disso, o HCl, diretamente ou indiretamente, através da produção de cloro (Cl₂ pela reação Deacon), pode contribuir para a formação subsequente de hidrocarbonetos clorados não queimados, como dibenzo-dioxinas e dibenzo-furanos, no efluente do forno. O cloro pode reagir com metais, como potássio e sódio, formando os vapores e aerossóis, em seguida, durante os processos de arrefecimento. Isto também leva a depósitos sobre as paredes do forno. (WILLIAMS et al., 2012)

As emissões de SO_x (a soma das concentrações de dióxido de enxofre (SO₂) e trióxido de enxofre (SO₃)) são conhecidas por seus efeitos prejudiciais sobre a

saúde humana e ao meio ambiente, como a chuva ácida e a destruição do ozônio. Quando o óxido de enxofre (SO_x) se combina com a umidade dos gases de combustão, ácido sulfúrico na fase vapor é formado. A presença de ácido sulfúrico no gás de combustão ao escapar para a atmosfera forma uma pluma visível e aumenta também as emissões de partículas a partir da chaminé. O ácido sulfúrico também corrói dutos e provoca prejuízos de equipamentos a jusante.

2.3 TECNOLOGIAS DE CONTROLE DE EMISSÃO – A INJEÇÃO DE ADSORVENTE A SECO

Nas últimas décadas, devido a um aumento da atenção ambiental e do rigor dos regulamentos relacionados à emissão de gases ácidos (especialmente as emissões de HCl e SO₂), as emissões destes gases em plantas industriais deverão ser reduzidas para valores aceitáveis.

A maioria dos sistemas de purificação tradicionais, ou seja, *scrubbers* e *spray dryers*, satisfazem as normas, no entanto apresentam a desvantagens de possuir preços altos, dos equipamentos exigirem mais espaço, e serem difíceis de manter. A Injeção de Adsorvente Seco (*Dry sorbent injection* - DSI) é uma tecnologia alternativa, que tem se mostrado eficaz na remoção de SO₂ e de HCl, sem as desvantagens dos sistemas tradicionais. (SOLVAY CHEMICALS, 2005)

A DSI é um processo utilizado para controlar os gases ácidos por injeção de um adsorvente em pó para dentro da corrente de gases de combustão. A tecnologia DSI foi avaliada como uma tecnologia potencial de controle de gás ácido já nos anos 1980. No entanto, em geral, a eficiência de captura não era alta o suficiente para atender às remoções necessárias às caldeiras a carvão na primeira fase de controle de SO₂ da emenda à Clean Air Act de 1990. (SCHANTZ et al., 2013). Entretanto, os avanços na eficácia dos adsorventes, combinados a novas iniciativas de regulamentação, fazem com que o DSI desempenhe um papel importante nas utilidades e estratégias de conformidade da indústria atualmente.

Há algumas razões para que a Injeção de Adsorvente Seco seja considerada para utilização em Unidades de Geração de Energia (UGE). A DSI pode ser uma solução de custo de capital, operação e manutenção baixo. Para THIEL (2012), a Injeção de Adsorvente Seco tem seu desempenho comprovado quanto à eficácia para a remoção de gases ácidos. Ela permite às UGEs complementarem seus

sistemas de mitigação atuais de forma acessível, pois é facilmente integrada ao sistema de controle de qualidade do ar existente. Sendo assim, a DSI pode ser uma solução provisória até que as soluções mais complexas sejam avaliadas e instaladas. Além disso, os sistemas de Injeção de Adsorvente Seco podem ser rapidamente instalados e postos em funcionamento (Tabela 3).

Tabela 3 – Comparação entre tecnologias de controle de gases ácidos.
(Adaptado de MACEDONIA, 2012)

Tecnologia de Controle	GW	Projeto + construção	Interrupção
DSI	44	9-12 meses	Nenhuma
Dry FGD	20	24-36 meses	
Atualização de <i>Scrubber</i> existente	63	12-36 meses	4-8 semanas

Há modelos diferentes de sistemas de lavagem (*scrubbing*) a seco de correntes de gases ácidos. Sistemas de lavagem a seco podem ser classificados como de injeção a seco de adsorvente (DSI) ou como de secagem por pulverização (*spray dryers*). Eles são constituídos por duas seções ou dispositivos principais: (1) um dispositivo para introduzir o material sorvente do gás ácido na corrente de gás, e (2) um dispositivo de controle de partículas para remover produtos de reação, o excesso de material sorvente particulado e de quaisquer outros poluentes no gás exausto. Como os sistemas de purificação a seco apenas removem gases, um dispositivo separado é necessário para remover partículas. Os dispositivos de controle de partículas geralmente são filtros de manga ou precipitadores eletrostáticos. (JOSEPH et al., 1998)

Nos sistemas de lavagem a seco, o gás ácido é removido através dos mecanismos de adsorção e absorção. Em sistemas de injeção a seco, onde a adsorção é o mecanismo de remoção preliminar, as moléculas de gases poluentes aderem à área da superfície das partículas alcalinas. Assim, a reação entre o gás ácido e a substância alcalina acontece na superfície dessas partículas alcalinas. Os materiais alcalinos são geralmente reagentes a base de cálcio ou à base de sódio, que tem a forma de um pó fino. Estas partículas finas têm grandes áreas específicas, para auxiliar na adsorção dos gases ácidos. Em sistemas de secagem por pulverização, a absorção é o mecanismo predominante de coleta.

O contato íntimo entre o adsorvente alcalino e gases ácidos é importante para a remoção eficaz de gases. No entanto, misturar um sólido seco e uma corrente de gás é difícil; por conseguinte, deve-se injetar adsorvente acima da quantidade estequiométrica. Com a injeção a seco, o pó de adsorvente sólido é disperso em qualquer área da fornalha, do duto de exaustão, ou em uma câmara de reação. O ponto de injeção depende do tipo de adsorvente e do tempo de reação necessário. Por exemplo, alguns adsorventes devem ser injetados a temperaturas elevadas, para sofrer uma reação de decomposição antes que eles removam os gases ácidos. A dispersão é geralmente realizada através da injeção do adsorvente por meio de um dispositivo de Venturi em contracorrente ao escoamento de gás, para criar turbulência. Como resultado, existirá adsorvente que não reagiu capturado no filtro de manga ou precipitador eletrostático. Em alguns casos, uma parte deste fluxo de resíduos é reciclada de volta para o ponto de injeção. (JOSEPH et al., 1998; SOLVAY CHEMICALS, 2005).

Um parâmetro importante na operação de um sistema de lavagem a seco é a quantidade de alimentação de material alcalino no sistema. A razão estequiométrica normalizada (*normalized stoichiometric ratio* - NSR) é usada para descrever a relação de mols do elemento adsorvente ativo para moles de gases ácidos presentes no duto. O NSR deve ser calculado com base no total de gases ácidos ($\text{SO}_2 + \text{HCl} + \text{HF} + \text{SO}_3$) porque todos reagirão com adsorvente. Em alguns casos, pode ser definido também o NSR de adsorvente a cada um dos gases ácidos. É importante certificar-se que a base para o NSR é conhecida. Alguns fornecedores de adsorvente relatam o uso de adsorventes através de uma relação de massa (por exemplo, lb adsorvente/lb. gás ácido). Em ambos os casos, a vazão de gases ácidos deve ser calculada para estimar o uso de adsorvente. A acidez dos gases efluentes segue esta ordem: $\text{SO}_3 > \text{HCl} > \text{SO}_2$ (SENIOR, 2013). Quando DSI é usada para remover SO_3 ou HCl a partir do gás de combustão, algum SO_2 também pode ser removido. Isso deve ser levado em conta no cálculo da vazão de adsorvente necessária.

A Figura 3 mostra um esquema de um sistema típico de injeção a seco. Ele consiste de um tanque de armazenamento de adsorvente seco, um alimentador para medir a quantidade necessária de adsorvente, um soprador, uma linha de transferência, e um dispositivo de injeção, tal como um tubo de Venturi. O material adsorvente seco é soprado através de uma linha pneumática para a área de injeção

onde a transferência através da linha pneumática proporciona a fluidização do material adsorvente. A injeção para dentro do duto é geralmente feita em contracorrente ao fluxo de gás para criar turbulência adicional e promover a mistura. A injeção de adsorvente seco pode ser realizada a alta temperatura (750-1100 °C) diretamente na câmara de combustão, ou moderada (200-315 °C) e temperaturas baixas (150 °C) no chamado duto de injeção. Uma câmara de expansão/reação pode ser incluída para aumentar o tempo de permanência dos gases ácidos para reagir com o adsorvente. A reciclagem de uma porção das partículas recolhidas de adsorvente não reagido pode aumentar a eficácia global dos sistemas de purificação a seco. (JOSEPH et al., 1998)

Embora a implementação da planta de DSI seja fácil, os processos reais envolvidos na injeção a seco são complexos. Além disso, a fim de atingir os limites cada vez mais rigorosos de emissão estabelecidos pela legislação, novos adsorventes com eficiência de remoção mais elevadas estão sendo propostos.

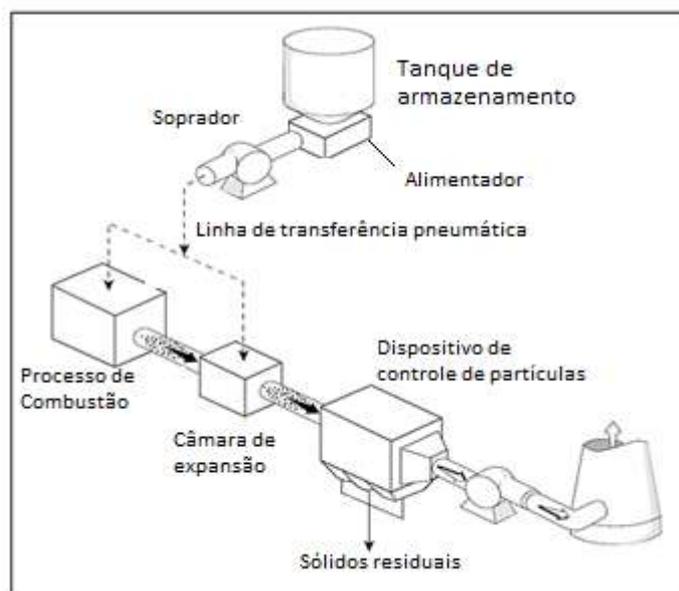


Figura 3 - Componentes de um Sistema de Injeção a Seco (Adaptado de JOSEPH et al., 1998)

2.3.1 Adsorventes do DSI

Os adsorventes DSI primários utilizados no mercado atual para o controle de gases ácidos são à base de cálcio (cal hidratada) ou à base de sódio (trona,

bicarbonato de sódio). As aplicações destes e outros adsorventes são mostrados na Figura 4.

Adsorvente para controle de:	SO ₂	HCl	SO ₃
Calcário			*
Mg(OH) ₂			*
MgO			*
Cal hidratada – Ca(OH) ₂		*	*
Trona	*	*	*
Bicarbonato de Sódio	*	*	*

Figura 4 - Aplicabilidade dos adsorventes alcalino para controle de gases ácidos. (Adaptado de SENIOR, 2013)

A cal hidratada (Ca(OH)₂), é usada para remover o SO₃ e/ou HCl a partir de gás de combustão. A remoção eficiente requer uma área de superfície elevada (maior do que 20 m² / g) e um tamanho de partícula pequeno (2-5 micrômetros).

Os dois adsorventes à base de sódio mais populares são trona (sesquicarbonato de sódio – SSC; Na₂CO₃.NaHCO₃.2H₂O) e o bicarbonato de sódio (SBC; NaHCO₃) são usados para remoção de SO₃ e/ou HCl e/ou SO₂. Trona é uma mistura que ocorre naturalmente de bicarbonato de sódio e carbonato de sódio. Ela é um produto abrasivo devido ao seu teor de sílica, um fator que deve ser considerado durante o processo de concepção do sistema de injeção pneumática. Para reduzir o desgaste no sentido de mudança nos joelhos, por exemplo, curvas T podem ser usadas. A trona tipicamente tem um tamanho médio de partícula entre 30 e 35 µm, enquanto que o bicarbonato de sódio é mais grosso. O bicarbonato de sódio é um produto químico não abrasivo, tipicamente processado para um tamanho de partícula de 400 micrôn. Na maioria dos casos, o bicarbonato de sódio é moído para aumentar a sua eficácia. Como um produto químico processado, ele tem um custo de compra mais elevado do que a trona, um fator frequentemente atenuado por características reativas superiores do bicarbonato de sódio.

Uma vantagem de ambos adsorventes, trona e bicarbonato de sódio, é a eficiência de redução de emissões melhorados através do efeito "pipoca". Isso significa que ambos os produtos são submetidos a calcinação rápida de bicarbonato de sódio em carbonato de sódio quando aquecido acima de 275 °F (300°F-700°F) (SOLVAY CHEMICALS, 2005). A decomposição cria uma grande e reativa superfície, trazendo carbonato de sódio antes não reativo à superfície da partícula para a neutralização de HCl e SO₂. Os subprodutos de reações são o cloreto de

sódio e sulfato de sódio, respectivamente, recolhidos como cinzas de combustível pulverizadas. A Figura 5 mostra a reação de calcinação desses adsorventes.

Isto significa que é muito vantajoso injetar adsorventes a base de sódio a uma região de temperatura mais elevada do escoamento de gás (mais perto da caldeira), para desencadear o efeito pipoca. Isso aumenta a área de superfície da partícula e também o tempo de residência da partícula na tubulação de gás, melhorando a redução de SO₂, HCl, e outros poluentes. Através da Figura 6 podemos visualizar o efeito da temperatura sobre a superfície do sólido de bicarbonato de sódio.

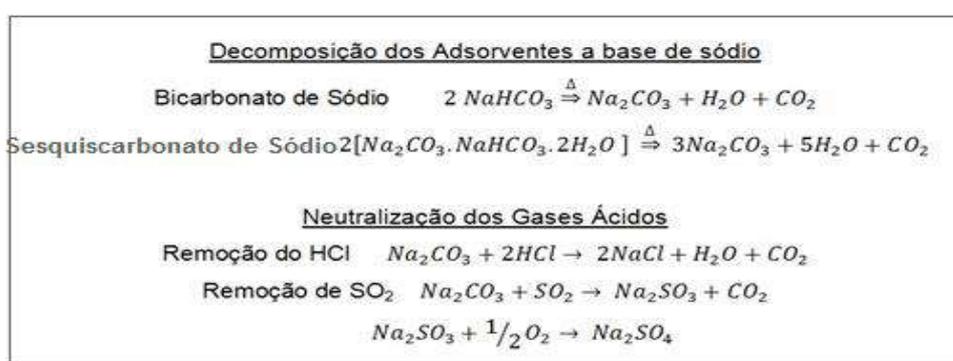


Figura 5 - Reação de remoção de gases ácidos utilizando adsorventes a base de sódio. (Adaptado de SOLVAY CHEMICALS, 2005)

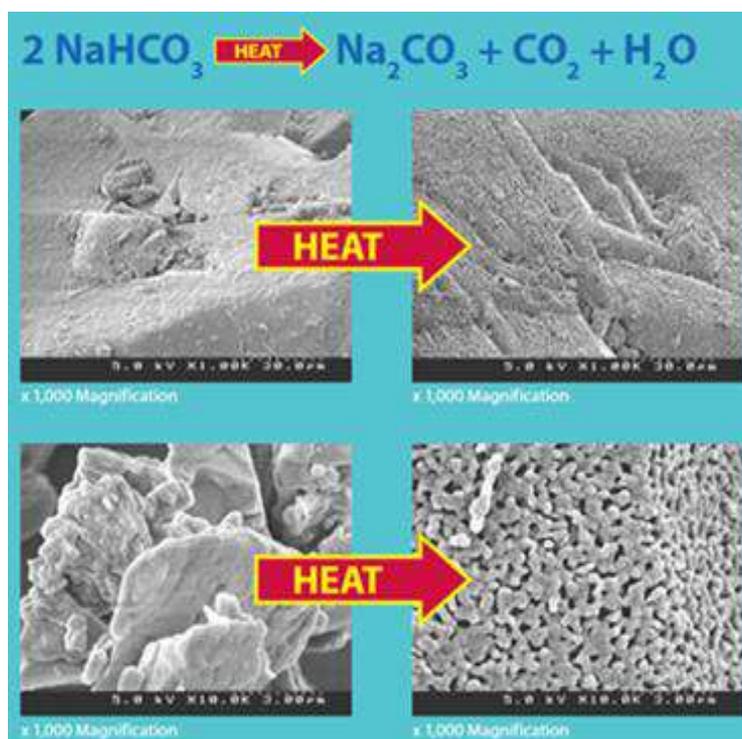


Figura 6 - Efeito da temperatura sobre a área superficial da partícula de bicarbonato de sódio. (TATA CHEMICALS EUROPE, 2012)

2.4 TRANSPORTE PNEUMÁTICO

O transporte pneumático é um método atrativo pois os materiais são trazidos até o ponto de fornecimento por meio de uma tubulação totalmente fechada onde corre um escoamento de ar gerado por uma bomba de vácuo. O sistema pode operar completamente sem partes móveis. Isto significa que os materiais potencialmente perigosos podem ser transmitidos de forma bastante segura. Existe um risco mínimo de geração de poeira, nenhum pó escapa para a atmosfera e assim estes sistemas geralmente atendem as demandas das legislações de Saúde e Segurança.

As vantagens do transporte pneumático são:

- Eficiência
- Segurança
- Higiene
- Excelente relação custo-benefício
- Flexibilidade
- Automatização
- Operação sem a geração de pó
- Baixa contaminação

Uma ampla variedade de materiais é tratada na forma de pó e granular, e um grande número de indústrias têm processos que envolvem a sua transferência e armazenagem. Algumas das indústrias em que mais é necessário o transporte desses materiais incluem a indústria de mineração, química, farmacêutica, alimentícia, fabricação de tintas, e o refino e processamento de metais.

Em geral, o transporte pneumático é adequado para o transporte de partículas na faixa de tamanho de 20 μm a 50 μm (WALAS, 1990). Partículas mais finas causam problemas decorrentes da sua tendência de se agrupar e aderir às paredes da tubulação e equipamentos auxiliares. Partículas grandes podem necessitar de velocidades muito altas, a fim de se manterem em suspensão ou serem levadas a partir da parte inferior do tubo em sistemas horizontais. As linhas de transporte pneumático podem ser horizontais, verticais ou inclinadas e podem incorporar curvas, válvulas e outros equipamentos, os quais podem exercer uma considerável

influência sobre o comportamento de toda a instalação. Considerando que é possível fazer previsões razoáveis de gradientes de pressão em tubos retos longos, os efeitos de tais acessórios podem ser determinados de forma confiável somente a partir dos resultados dos estudos práticos em condições próximas das que serão sentidas na instalação final.

A operação bem-sucedida de um transportador pneumático pode depender muito mais da necessidade de se alcançar uma operação confiável, removendo os riscos de bloqueio e de danos por erosão, do que da criação de condições que aperfeiçoem o desempenho do escoamento nas seções retas do tubo. É importante manter as alterações na direção do fluxo tão graduais quanto possível, utilizar materiais adequados de construção (revestimento de poliuretano é frequentemente utilizado) e utilizar as velocidades suficientemente altas para manter as partículas em movimento, mas não tão altas que causem erosão. Sempre que possível, é desejável a realização de testes em escala piloto com uma amostra dos sólidos.

Os sistemas de transporte pneumático são basicamente muito simples e são adequados para o transporte de materiais em pó e granulados de processos industriais. Os requisitos do sistema são uma fonte de gás comprimido, geralmente ar, um dispositivo de alimentação, uma linha de transporte e um receptor de terminação para descarregar o material transportado e o gás portador (Figura 7). (HARDT et al., 2003)

As plantas de transporte pneumático ocupam pouco espaço e as tubulações podem facilmente ser direcionada adjacente à paredes, telhados ou mesmo o subsolo para evitar equipamentos ou estruturas existentes. As linhas de transporte fornecem muita flexibilidade, pois podem ser executadas na horizontal, na vertical para cima e para baixo ou com curvas, e qualquer combinação de orientações pode ser acomodada num único ensaio. Somado a isso, as vazões dos materiais podem ser controladas facilmente e monitorados para verificar continuamente as vazões de entrada e saída, e a maioria dos sistemas podem funcionar de maneira completamente automática.

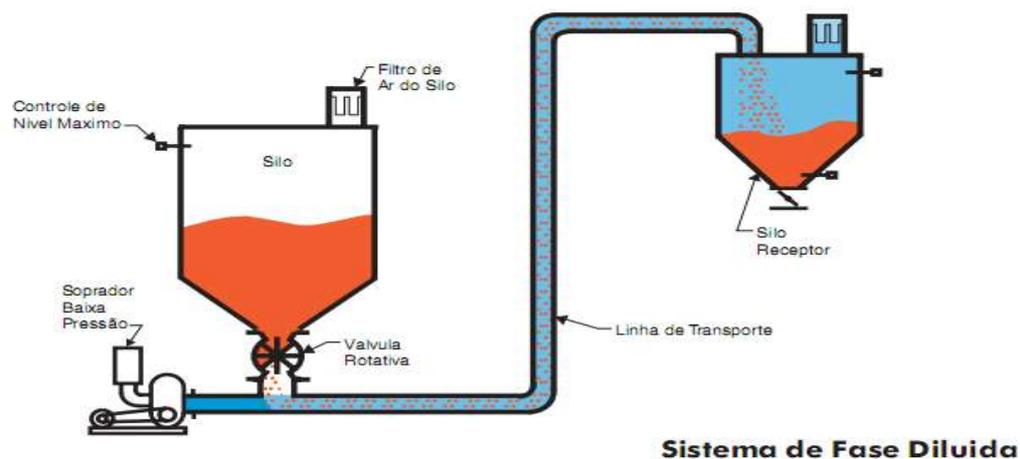


Figura 7 - Sistema de Transporte Pneumático. (HARDT et al., 2003)

Existem dois modos básicos de transporte que são empregados. O primeiro, e mais comum, é chamado de fase diluída ou transporte de fase magra o qual é caracterizado por velocidades de gás altas (maior que 20 m/s), baixas concentrações de sólidos (menos que 1% em volume) e baixas quedas de pressão por unidade de comprimento de linha de transporte (tipicamente menos de 5 mbar/m). O transporte pneumático de fase diluída é limitado a pequena extensão, transporte contínuo de sólidos a taxas de menos de 10 toneladas/hora e é o único sistema capaz de operar sob pressão negativa. Sob condições de fluxo diluído as partículas sólidas se comportam como individuais, completamente suspensas no gás, e as forças de interação fluido-partícula dominam. A segunda, fluxo de fase densa, é aquele em que o escoamento se assemelha a um leito móvel em que a fração de volume de sólidos é elevada, as partículas não estão completamente suspensas e há muita interação entre as partículas. Devido a velocidade ser muito mais baixa do que no transporte em fase diluída, este apresenta menos atrito das partículas e menos desgaste do tubo. O uso do gás é reduzido, mas o risco de bloqueio é grave em condutas horizontais. (MILLS, 2004)

Infelizmente, o limite entre o fluxo de fase diluída e o fluxo de fase densa não é muito claro, e não há ainda nenhuma definição universalmente aceita de transporte de fase densa e fase diluída. KONRAD (1986) lista quatro meios alternativos de distinguir os fluxos de fase densa e de fase diluída:

- a) com base na razão vazão mássica de sólidos/ vazão mássica de ar
- b) com base na concentração de sólidos

c) o fluxo de fase densa existe onde os sólidos preenchem completamente a seção transversal do tubo em algum ponto.

d) O fluxo de fase densa existe quando, para fluxo horizontal, a velocidade do gás é insuficiente para suportar todas as partículas em suspensão.

Em todos estes casos, diferentes autores reivindicam valores diferentes e aplicam interpretações diferentes.

HUBER (1998) destaca que as amplas vantagens de aplicação levaram a uma extensa pesquisa sobre o transporte pneumático de sólidos através dos diferentes elementos da tubulação. No entanto, o projeto da rede de tubulação para transporte pneumático ainda é largamente baseado no empirismo.

Um sistema de transporte pneumático pode ser concebido utilizando modelos matemáticos, dados de teste disponíveis, ou uma combinação dos dois. Se modelos matemáticos são utilizados, algum grau de confiança precisa ser estabelecido quanto à sua adequação para uma aplicação particular, tal como transportar um determinado material em condições bem definidas, antes que eles sejam utilizados. Dados de teste são amplamente utilizados na concepção do sistema. Estes dados podem ter sido obtidos a partir de uma instalação de ensaio ou de experiência em uma planta real.

Cálculos numéricos poderiam apoiar a concepção e construção de sistemas eficientes de transporte (pneumáticos ou outros processos em tecnologia de partículas), que, em grande parte atendem às necessidades específicas. Existem equações disponíveis para se utilizar no dimensionamento de equipamentos para transporte pneumático (FOUST et al., 1982; KLIZING et al., 1997). No entanto, a ampla variação das propriedades dos sólidos e as tendências de os sólidos se aglomerarem e aderirem às superfícies da parede, fazem com que o emprego destas equações seja problemático (exceto quando se trata de sólidos que escorrem livremente, com dimensões quase uniformes e elevada esfericidade). Esta é uma das principais razões para os métodos numéricos utilizados na simulação do transporte horizontal pneumático terem sido realizados apenas com a introdução de hipóteses fortemente simplificadoras.

PERRY et al. (1999), utiliza um conjunto útil de nomogramas para execução do projeto preliminar do sistema de transporte pneumático. Com estes gráficos, aproximações conservadoras de tamanho da tubulação e potência para determinada densidade mássica de produto, o comprimento equivalente de transportador, e a

capacidade necessária podem ser obtidos. Porque transportadores pneumáticos e seus componentes estão sujeitos a melhorias contínuas por uma indústria fornecedora em rápida mudança, os fabricantes devem ser convidados a apresentar projetos alternativos ao resultante do uso dos nomogramas. Alguns grandes utilizadores de transportadores pneumáticos utilizam programas proprietários de computador para calcular os parâmetros do sistema.

No projeto de um sistema de transporte pneumático devem-se considerar alguns parâmetros que são de grande importância para que o sistema funcione eficientemente. A velocidade mínima de transporte é um dos mais importantes parâmetros no transporte pneumático de sólidos. O transporte pneumático de materiais em uma tubulação a alta velocidade (Figura 8a) pode resultar em elevados custos devido ao grande consumo de energia, e também causar o aumento da degradação da tubulação principalmente nas curvas (SALMAN et al., 2002; KALMAN, 2000). Por outro lado, o transporte a uma baixa velocidade resultará na deposição das partículas no fundo da tubulação (Figura 8b) e o consequente entupimento desta.

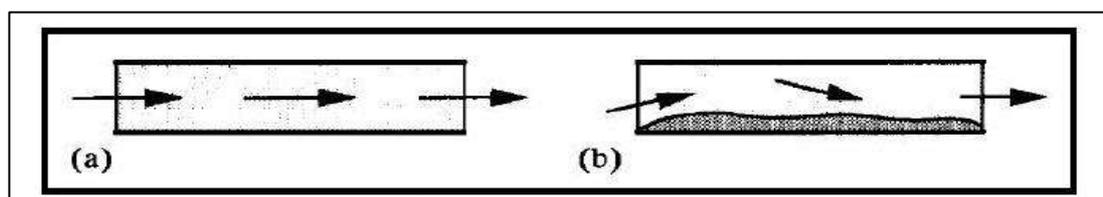


Figura 8 - Fluxo de ar na fase diluída na direção horizontal. (a) Velocidade do ar acima da velocidade mínima de transporte; (b) Velocidade do ar abaixo da velocidade mínima de transporte. (CABREJOS et al., 1992).

Operar um sistema de transporte pneumático de maneira estável representa uma grande economia de consumo de energia para a empresa, o que evidentemente possibilita uma melhor redistribuição de seu capital em outros segmentos levando-a a oferecer ao consumidor final, direta ou indiretamente produtos de qualidade a uma melhor relação de custo-benefício. Para GOMES(2006), um dos parâmetros de maior importância no alcance dessa estabilidade operacional certamente é a otimização da velocidade de transporte de modo que se possam transportar materiais particulados a uma mínima velocidade possível.

Nesse sentido, a verificação da adequação da velocidade dos sólidos em linhas de transporte pneumático é um dos objetivos deste trabalho. A simulação do transporte pneumático através de autômatos celulares permite a visualização de fenômenos como *slugs* ou deposição de partículas, por exemplo.

2.5 ESCOAMENTO DE SUSPENSÕES SÓLIDO GÁS NA DIREÇÃO HORIZONTAL

Uma das primeiras simulações numéricas do movimento das partículas em um tubo horizontal foi realizada por OTTJES (1978), considerando em um modelo bidimensional de partículas sujeitas a forças de arraste e sustentação, bem como ao efeito Magnus e colisões inelásticas partículas-parede. As trajetórias de todas as partículas foram simuladas simultaneamente, a fim de prever o escoamento da população de partículas. O efeito Magnus é o nome dado a geração de uma força lateral sobre um sólido esférico imerso em um fluido (líquido ou gás) quando há um movimento relativo entre o corpo girando e o fluido. Um objeto em movimento girando através um fluido se afasta da sua trajetória linear devido a diferenças de pressão que se desenvolvem no fluido como resultado de mudanças de velocidade induzido pelo corpo em rotação e as partículas adquirem altas velocidades angulares. A força Magnus pode ter uma influência significativa sobre o movimento das partículas. A relação entre a força de sustentação e a rotação das partículas no fluxo foi analisada por SOMMERFELD (1990) que concluiu que grandes velocidades de rotação das partículas são induzidas por colisões partículas-parede ou colisões entre partículas, mas principalmente por colisões com a parede.

A geometria do tubo mais complexo foi considerada por TSUJI et al., (1978) que calculou o comportamento de partículas em sistemas de transporte pneumático com curvas da tubulação através da simulação computacional. Nestes cálculos partículas bastante grandes foram consideradas e a influência das partículas no escoamento de gás foi negligenciada. EM TSUJI et al., (1987), uma simulação numérica foi feita para determinar o movimento das partículas e do fluido em um canal horizontal. A simulação foi baseada na abordagem Lagrangeana para a fase sólida, onde as trajetórias das partículas foram calculadas integrando-se as equações do movimento para cada partícula. O movimento do fluido foi simulado através da solução das equações de movimento utilizando um método de diferenças

finitas, em simultâneo com a solução para o movimento das partículas. Alguns parâmetros empíricos da simulação sobre a colisão das partículas com a parede foram determinados por meio de comparações entre resultados calculados e medições.

TSUJI et al., (1991) propôs uma simulação numérica de escoamento gás-sólido em um tubo horizontal com a utilização da abordagem Lagrangiana, juntamente com as equações de continuidade e momento para o fluido. Seu trabalho considerou partículas grandes em fase diluída e a forma das partículas é admitida como sendo não-esférica. O objetivo das simulações é o cálculo da perda de energia devido à colisão de partículas com a parede. Em TSUJI et al., (1992), também foi utilizada a abordagem Lagrangiana para simulação numérica, mas as partículas foram consideradas esféricas. Nesse trabalho, os autores estudaram a colisão partícula – partícula através das equações de movimento e de um modelo de Cundall modificado. Os modelos de Cundall são modelos discretos para os problemas de escoamento granular. As leis de Newton são aplicadas a cada partícula, e o seu movimento é função do tempo. As partículas são autorizadas a sobrepor-se, mas esta sobreposição é regida por forças normais e de corte, que dependem do grau de sobreposição. Assim, o material é idealizado como uma coleção de partículas "soft" com um núcleo repulsivo. Essa abordagem foi denominada "método de elementos distintos" por CUNDALL (1971); também é chamado o "método dos elementos discretos" na literatura.

A maioria dos cálculos de transporte pneumático em regime de fase dispersa tem sido realizada com base na abordagem de Euler / Lagrange. A abordagem Euler/Lagrange é baseada em um cálculo acoplado de escoamento de fluido (Euleriana) e fase de partículas (Lagrangeana). A fase de partículas é modelada por rastreamento de um grande número de pontos de partículas constituintes por meio do campo de escoamento previamente calculado resolvendo as equações de movimento, considerando as forças relevantes que atuam sobre as partículas. Uma vantagem deste método é que a natureza discreta das partículas da fase dispersa é mantida. Além disso, os efeitos físicos que influenciam o movimento das partículas, tais como turbulência, as colisões de partículas-parede, as colisões das partículas ou a aglomeração, podem ser modelado com base em princípios físicos. SOMMERFELD et al. (1998) sintetiza a abordagem Euler/Lagrange para simulações numéricas tridimensionais do escoamento gás-sólido disperso em um tubo circular

linear. Os cálculos incluem todos os efeitos importantes, tais como, a turbulência, a sustentação, as colisões das partículas com paredes - incluindo rugosidade da parede - e as colisões interpartículas. Além disso é discutida a importância destes efeitos sobre o desenvolvimento do escoamento em diferentes elementos de tubo. Os resultados são apresentados por elementos de tubo, tais como, tubos horizontais, curvas da tubulação, e tubos verticais, para diferentes diâmetros e condições de escoamento, tais como velocidade de transporte e concentração de partículas. Além disso, os sólidos arrastados exercem forças sobre o gás e criam escoamentos secundários. Verificou-se que maior rugosidade da parede implica escoamento secundário mais intenso. Eles explicaram este fenômeno pela combinação da curvatura do tubo e do efeito de ressuspensão da rugosidade da parede. Estes efeitos estão associados com maior transferência de impulso local das partículas para a fase de gás na seção de fundo, induzindo um escoamento secundário na seção transversal do tubo. SOMMERFELD (2003) executou cálculos numéricos bidimensionais, a fim de analisar detalhadamente o comportamento de partículas e avaliar os efeitos de colisões com a parede, da rugosidade da parede e das colisões interpartícula, em um canal horizontal. O escoamento das partículas sólidas esféricas em um canal horizontal é analisado utilizando simulações numéricas com base na abordagem Lagrangiana. Demonstrou-se que ambos os efeitos (rugosidade da parede e colisões entre partículas) têm uma grande influência sobre o comportamento das partículas em um canal horizontal e sobre as propriedades da fase de partículas do escoamento desenvolvido. Em uma segunda parte do trabalho as simulações são comparadas com medições detalhadas por anemometria de Doppler de fase em um canal horizontal e com uma altura de 35 mm e um comprimento de 6 m para validação.

O escoamento no tubo é um dos processos tecnológicos do mais importantes na indústria e, conseqüentemente, uma grande quantidade de publicações está disponível. A razão para numerosos estudos experimentais está relacionada à complexidade de simular um escoamento de partículas carregadas em tubos ou canais no regime diluído. A revisão bibliográfica possibilitou destacar parâmetros importantes para o fluxo de sólidos na direção horizontal como: efeitos de colisão parede; rugosidade da parede; colisão entre partículas e a forma das partículas, pois podem afetar as características de transporte. Neste contexto, o programa

computacional desenvolvido deve levar em consideração esses parâmetros. Isso será mostrado no Capítulo 4 desse trabalho.

3 METODOLOGIA

O objetivo deste capítulo é descrever os procedimentos metodológicos aplicados no presente trabalho, abordando desde a estratégia geral adotada na pesquisa em si até as metodologias empregadas nas diferentes etapas da mesma.

3.1 AUTÔMATOS CELULARES

Autômatos celulares (AC) são modelos matemáticos simples constituídos de uma malha, ou reticulado, de células idênticas e discretas, onde cada célula tem seu valor sobre um conjunto finito, por exemplo, de valores inteiros. Os valores evoluem, em passos de tempo discretos, de acordo com regras determinísticas que especificam os valores de cada célula em termos dos valores das células vizinhas. Os AC podem descrever comportamentos complexos a partir da repetição, por milhares de vezes, e em milhares de células, de regras muito simples. A natureza discreta dos Autômatos celulares torna-os potencialmente úteis para a simulação em computadores. Mas, apesar desta natureza discreta, os AC que possuem muitas células são capazes de representar adequadamente o comportamento macroscópico de sistemas considerados contínuos, como fluidos e sistemas particulados (WOLFRAM, 2002; WOLF-GLADROW, 2005; LAKSHMI, 1989).

O conceito de autômato celular foi introduzido pela primeira vez por Von Neumann na década de 1950 para estudar processos de crescimento e autoreprodução e, desde então, tem sido largamente aplicado a sistemas bastante complexos (WOLFRAM, 1994).

3.1.1 Componentes de um Autômato Celular

Em um autômato celular é imprescindível uma geometria regular, ou seja, todas as células devem possuir o mesmo tamanho e estarem dispostas em uma rede ou malha. Para compreensão da dinâmica de autômatos celulares utilizada nesse trabalho, do tipo *lattice-gas*, fazem-se necessárias as definições:

- I. Células: A célula de um AC (Figura 9) é o componente individual que pode ser considerado um elemento de memória que armazena dados celulares. Cada célula está num determinado estado, que se altera ao longo do

tempo, consoante a certas regras. O estado seguinte de uma célula depende do seu estado atual e dos estados das células na sua vizinhança (GREMONINI et al., 2008).

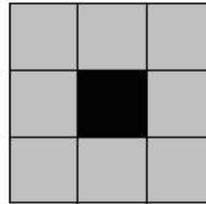


Figura 9 - Células de um autômato . (MORAES, 2007)

- II. Grade: A grade constitui o plano espacial onde as células estarão dispostas no AC. Pode estar disposta em dimensões diferentes com uma, duas ou três dimensões como mostrado abaixo, na Figura 10.

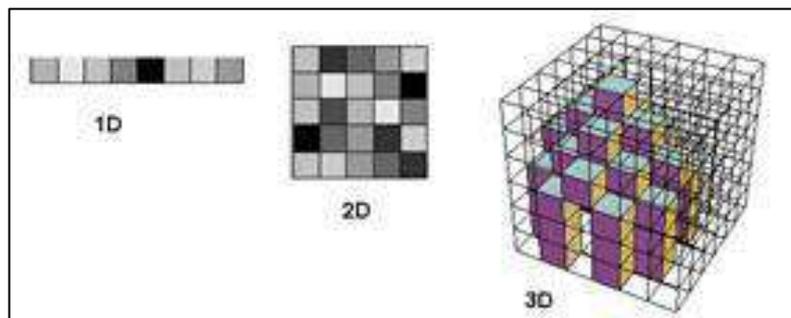


Figura 10 - Representação do modelo unidimensional (1D), bidimensional (2D) e tridimensional (3D). (GREMONINI et al., 2008.)

- III. Formato: Como mencionado, as células do autômato celular possuem a mesma forma, que pode ser triangular, quadrangular ou hexagonal, entre outros tipos.
- IV. Vizinhança: O estado da célula dependerá do estado das células vizinhas. A geometria do sistema de autômato celular está diretamente relacionada ao tamanho da vizinhança de uma célula e será a partir desta definição que serão aplicadas as regras de transição. Têm sido em geral utilizadas formas que seguem uma lógica ou regra bem definida (Von Neumann e Moore) mas podem também ser usadas formas arbitrárias como mostrado na Figura 11.

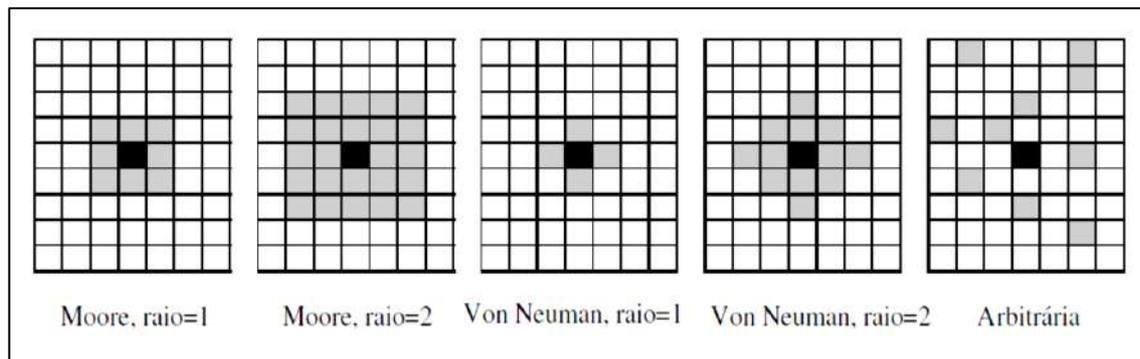


Figura 11 - Vários tipos de vizinhança. Células em cinzento representam as células de vizinhança das células em preto (raio corresponde ao raio da vizinhança). (GREMONINI et al., 2008).

- V. Estados: Os estados constituem os possíveis valores assumidos pelas células e podem ser apresentados na forma de números, cores, propriedades como ligado e desligado, etc.
- VI. Regras: O componente mais importante em um sistema utilizando Autômatos Celulares, os possíveis estados que as células podem assumir no AC serão definidos pelas regras impostas no modelo utilizado.

3.1.2 Autômatos Celulares na Simulação de Fluidos e Sistemas Particulados: Lattice-gas

Em 1986, FRISCH et al. anunciaram uma descoberta impressionante. Eles mostraram que o movimento molecular, ou atomístico, dentro dos fluidos – algo extraordinariamente complicado envolvendo graus de liberdade da ordem de 1024 valores reais – não precisava ter um detalhamento nem sequer próximo do encontrado na dinâmica molecular para que pudesse reproduzir a dinâmica dos fluidos de uma forma realista. Eles mostraram que um fluido poderia ser representado através de partículas fictícias, todas com a mesma massa e movendo-se com a mesma velocidade em módulo. E mais do que isso, estas velocidades ficaram restritas a um conjunto finito, que, em duas dimensões, pode ser representado por apenas seis elementos.

Os AC que simulam o escoamento de fluidos e a dinâmica granular são conhecidos como modelos de autômatos celulares do tipo “*lattice-gas*”. Nestes modelos, as partículas estão dispostas em uma rede (*lattice* em inglês) e durante

os passos de tempo discreto, as partículas viajam entre os vértices pelas arestas da rede e colidem com outras partículas.

Apesar de serem simplificações, estes modelos apresentam algumas vantagens, tais como a ausência de erros de arredondamento e a estabilidade computacional, graças à sua natureza discreta (BANDMAN, 2011). Uma limitação dos modelos *lattice-gas* é a atribuição de velocidade discretas para as partículas (a velocidade pode ser 0 ou 1), apesar de a média das velocidades das partículas em uma região não estar necessariamente presa a estes dois valores somente.

Na seção abaixo serão feitos os detalhamentos dessa metodologia que foi implementada no código computacional em MATLAB desenvolvido nesse trabalho, a fim de alcançar os objetivos descritos no Capítulo 1.

3.2 DESENVOLVIMENTO DO PROGRAMA COMPUTACIONAL

Nos modelos "*lattice-gas*", a área de simulação é discretizada através de uma rede triangular bidimensional (Figura12) para que o fluido obedeça à conservação do momento linear (WOLFRAM, 1986; LAKSHMI, 1989).

Nesse contexto, cada nó da rede do *lattice-gas* tem 6 vizinhos. Uma célula é composta pelo nó e as 6 arestas vizinhas a ele, sobre as quais as partículas podem se movimentar. Essas malhas são ocupadas por partículas e as variáveis que descrevem seu estado são booleanas, indicando a presença ou ausência de partículas nos nós das malhas.

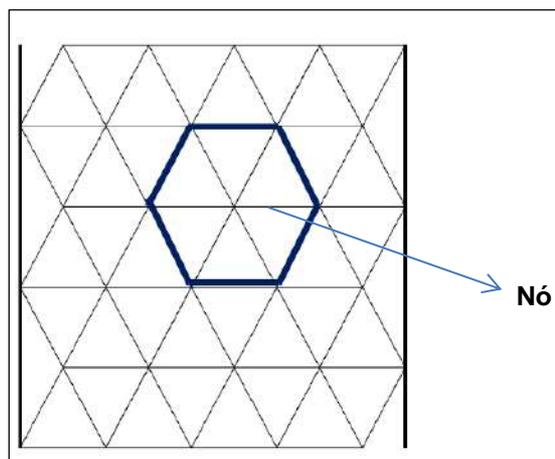


Figura 12 - Rede triangular bidimensional (células hexagonais).

A área de simulação é modelada como uma rede de tamanho $n_x \times n_y$. Devido à estrutura hexagonal o sistema de coordenadas é um pouco mais complicado do que o cartesiano normal. O sistema de coordenadas cartesianas é necessário para enumerar os sítios de rede única por suas coordenadas (x, y) . Optamos por este incomum sistema para simplificar a estrutura de dados. Ele tem vantagens significativas sobre um sistema cartesiano de modo que ambos os eixos são paralelos às linhas do *lattice*. A única complicação é que as paredes laterais não são fisicamente verticais (Figura 13).

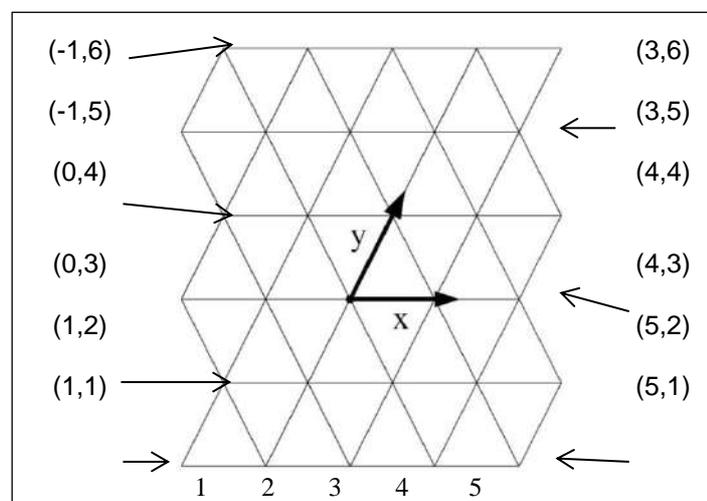


Figura 13 - Sistema de Coordenadas da área de simulação.

Cada passo do autômato consiste em duas fases, movimento e colisão. A primeira fase é determinística, ou seja, as partículas se movem na direção de suas atuais velocidades. Na fase de colisão as velocidades das partículas mudam de acordo com as regras de colisão probabilística (PÖSCHEL et al., 2005).

A velocidade de cada sítio i do *lattice* (Figura 14) é determinado por sete números binários $v_{i(j)}$, com $j = (0,1,2,\dots,6)$.

- $v_{i(j)} = 1$ se existe partícula se movendo do sítio i para seu vizinho j . Se, por exemplo, $v_{i(3)} = 1$, a partícula se move ao sítio vizinho três;
- $v_{i(j)} = 0$ se não existe partícula se movendo do sítio i para seu vizinho j ;
- $v_{i(0)} = 0$ se existe partícula em repouso no sítio i .

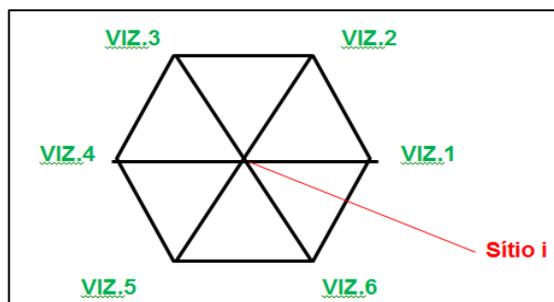


Figura 14 - Sistema de Coordenadas da área de simulação

O estado de cada célula do *lattice* é determinado por um número que especifica o número de partículas e a direção em que estão se deslocando, conforme a Figura 15. Se em uma célula há uma partícula parada (direção 0) e uma se deslocando em direção ao nó superior direito (direção 2), dizemos que seu estado é $2^0 + 2^2 = 5$. Cada célula pode conter até 7 partículas, uma vez que só é permitida uma partícula por direção (PÖSCHEL et al., 2005)

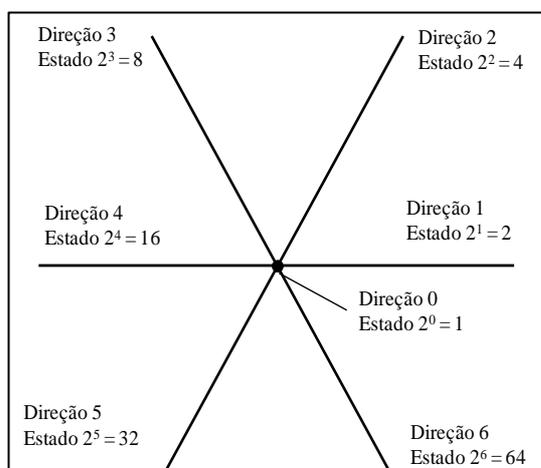


Figura 15 - Codificação das direções e estados das partículas no "*lattice*".

As leis de movimento que as partículas seguem são de simples descrição. Primeiro, o *lattice* é inicialmente preparado de tal maneira que não haja mais de uma partícula movendo-se na mesma direção em uma determinada célula. Depois, a cada passo de tempo, as partículas deslocam-se por uma unidade de *lattice* até a célula vizinha mais próxima, na direção dada por sua velocidade. Finalmente, estas partículas colidem com as partículas que chegarem ao mesmo passo de tempo a sua célula de destino.

A evolução do sistema é governada por regras que definem como as partículas se movem numa malha após o choque com outra partícula ou com as paredes. Algumas colisões fazem com que as velocidades das partículas sejam alteradas, de acordo com as velocidades das mesmas e com a regra de colisão imposta, de tal forma que não seja modificado o número de partículas nem o vetor soma de suas velocidades. Ou seja, a colisão preserva a massa e a quantidade de movimento. (FRISCH et al., 1986). As regras de colisão encontram-se representadas na Figura 16. O número p é a probabilidade de uma partícula ficar parada após um choque com outra partícula. O número p_{wall} , por sua vez, é a probabilidade de a trajetória de uma partícula sofrer uma deflexão para cima quando se choca com a parede.

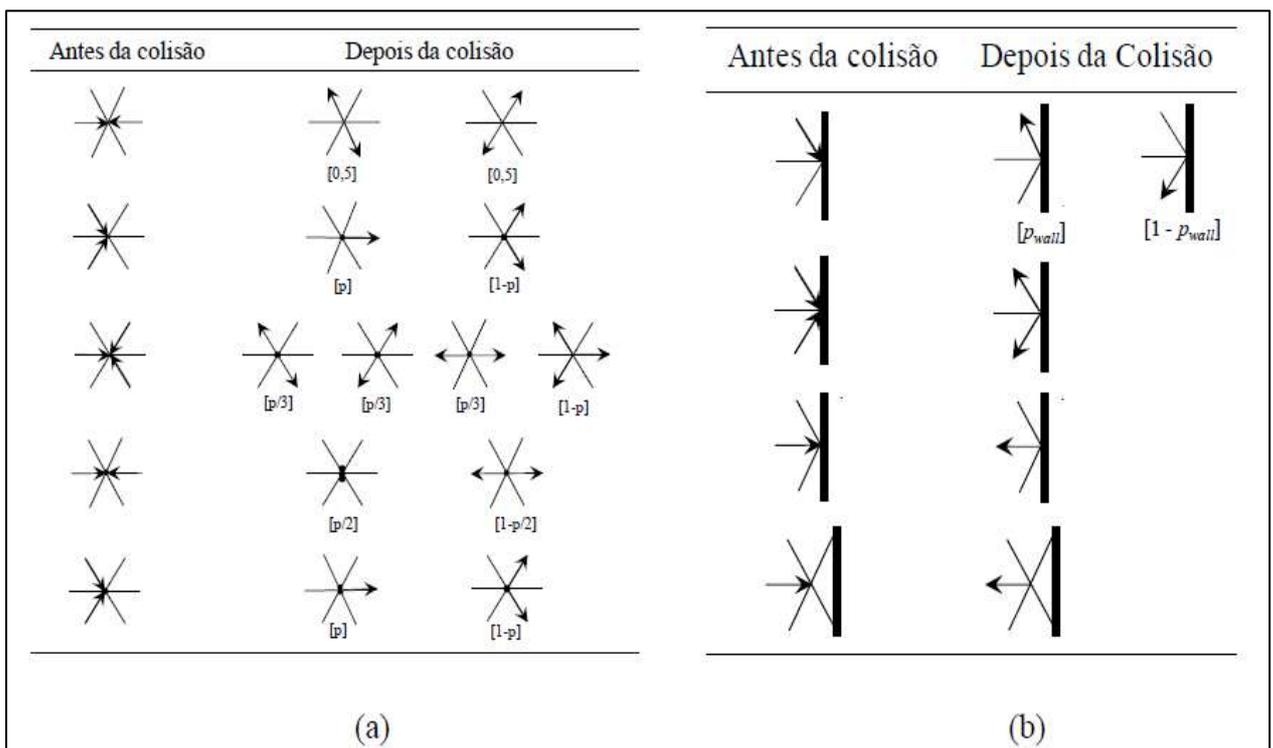


Figura 16 – Regras de colisão (a) entre partículas e (b) entre partículas e as paredes na simulação de sistemas particulados através de autômatos celulares. (PÖSCHEL et al., 2005.)

As colisões são representadas por mudanças de estados das células. Por exemplo, se uma partícula viaja na direção 1 e outra na direção 4, elas colidirão (este é o caso representado na primeira linha da Figura 16a). Assim, o estado inicial é $2^1 + 2^4 = 18$. O estado da célula após a colisão pode ser 72 (uma na direção 3, 2^3 ,

mais uma partícula na direção 6, 2^6) ou 36 (uma partícula na direção 2, 2^2 , mais uma na direção 5, 2^5), segundo uma probabilidade igual a 0,5 para cada caso.

A programação das regras de colisão é o coração do programa computacional, e sua etapa mais trabalhosa, mas além das etapas em que se representam as colisões entre as partículas, há etapas em que se implementam a ação da gravidade sobre as partículas paradas, a propagação das partículas para as células vizinhas, o perfil de concentração de partículas em pontos específicos e a visualização das posições das partículas neste passo.

A ação da gravidade é representada com o auxílio da probabilidade p_{grav} , que é a probabilidade de uma partícula parada cair, caso haja espaço para isto. Sorteia-se um número aleatório, e se ele for menor que p_{grav} , a partícula cai. A visualização da concentração local de partículas foi realizada ao se atribuírem cores diferentes a células com número diferente de partículas, sendo que as células com maior concentração são gradualmente mais escuras e células vazias são brancas, conforme o esquema da Figura 17.

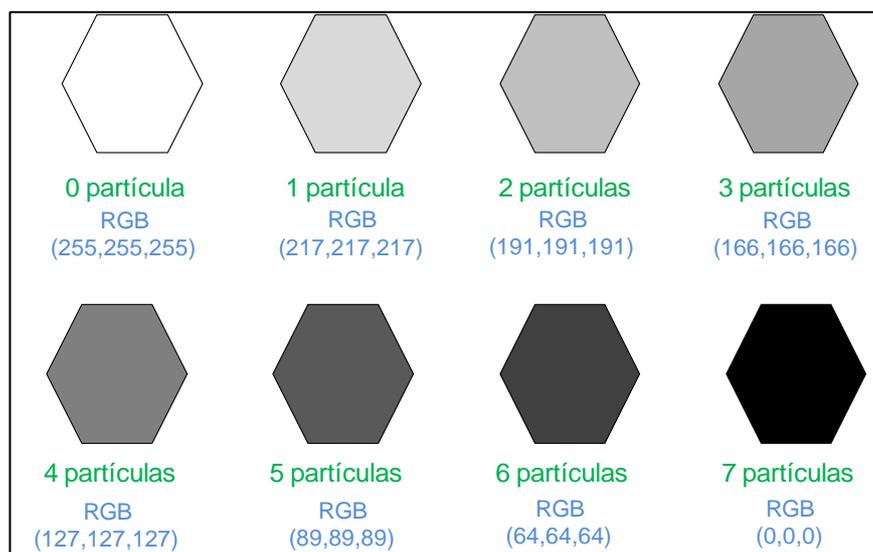


Figura 17 – Esquema de cores para a visualização da concentração local de partículas.

Em todos os passos de tempo, o estado de cada uma das células foi armazenado em uma matriz, e seus elementos eram modificados segundo as regras próprias de cada etapa de evolução do sistema. Para a visualização em um sistema de coordenadas cartesiano, foi necessário estabelecer a relação entre as

coordenadas x e y , já mostradas anteriormente na Figura 13 e as coordenadas cartesianas x_{cart} e y_{cart} . Essa relação de conversão está demonstrada abaixo:

$$x_{cart} = x + y / \tan 60^\circ \quad (3.1)$$

$$y_{cart} = y * \cos 30^\circ \quad (3.2)$$

O algoritmo do programa computacional desenvolvido neste trabalho pode ser resumido no diagrama de blocos representado na Figura 18.

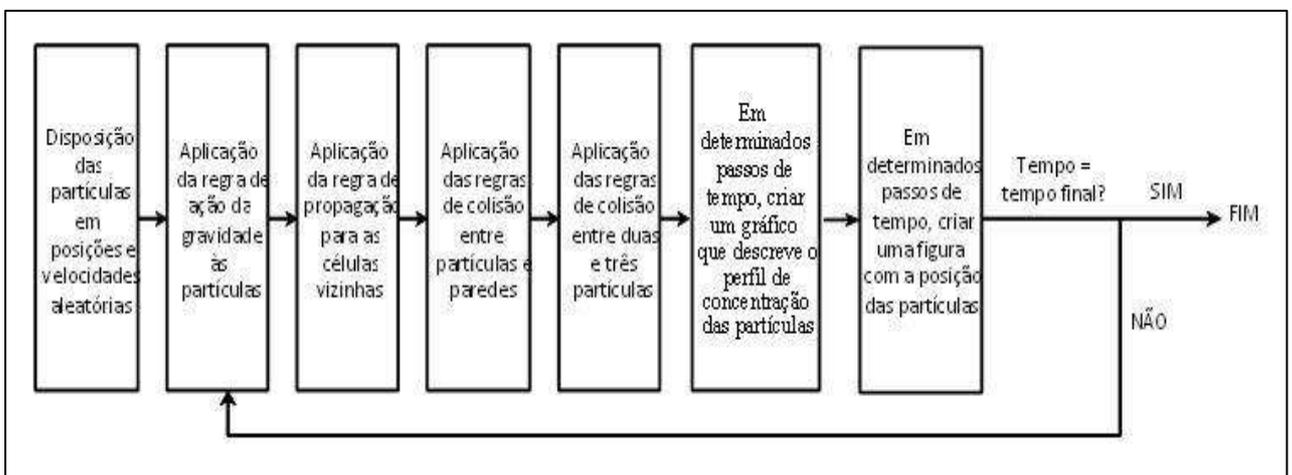


Figura 18 – Diagrama de blocos que representa a simulação do escoamento de uma suspensão pelo *lattice-gas*

4 RESULTADOS

O objetivo deste capítulo é apresentar os procedimentos da análise dimensional aplicados ao modelo proposto nesse trabalho e analisar os principais resultados obtidos a partir do código computacional para a simulação do transporte pneumático através de um tubo horizontal. Os parâmetros de simulação foram obtidos através da análise dimensional do fenômeno de transporte pneumático, e são tais que haja similaridade entre o sistema real e o sistema fictício, simulado pelo lattice-gas.

4.1 ANÁLISE DIMENSIONAL

4.1.1 Relevância

Um modelo é a representação do conhecimento e a principal ferramenta para o estudo do comportamento de sistemas complexos. Quando o modelo é uma representação válida de um sistema, informações significativas podem ser retiradas sobre sua dinâmica ou seu desempenho. Por isso o aspecto mais importante de um modelo é a relação simplicidade *versus* fidelidade. (TRIVELATO, 2003)

A solução de muitos problemas da Mecânica dos Fluidos por métodos puramente analíticos é, em geral, difícil e trabalhosa, e às vezes impossível, devido ao grande número de variáveis envolvidas. Por causa disso, desenvolvem-se métodos que permitem, nesses problemas, produzir modelos condizentes com a realidade.

A análise dimensional pode ser entendida como uma técnica que depreende alguma regularidade inerente ao fenômeno em estudo. Muitas vezes, a interdependência entre as grandezas físicas é muito complexa, porém mesmo os fenômenos caóticos ou os fractais apresentam certo grau de regularidade. A análise dimensional permite assim que as grandezas físicas sejam combinadas de maneira a evidenciar aspectos em comum entre fenômenos físicos e fornece regras de escalonamento que permitem a conversão de dados entre o modelo computacional e o sistema real. Dois conceitos importantes e imprescindíveis na aplicação da análise dimensional são o uso de um sistema coerente de unidades e a homogeneidade dimensional. (BRUNETTI, 2008)

O requisito básico nesse trabalho é alcançar a similaridade entre as condições do modelo lattice-gas computacional e as condições de um sistema real. Neste contexto, a similaridade completa é alcançada quando todos os grupos adimensionais relevantes para a descrição do fenômeno têm os mesmos valores para o modelo *lattice-gas* e para o sistema real.

4.1.2 Sistema real: Estudo de caso

Alinhada com a visão de oferecer e desenvolver continuamente soluções ambientais sustentáveis e lucrativas utilizadas para o controle de emissões atmosféricas e resíduos associados, que inclui um portfólio de produtos, serviços, tecnologias e sistemas de tratamento, a SOLVAir Solutions, braço da Solvay Chemicals, tem diversos estudos e desenvolvimento de adsorventes que visam a melhorar a eficiência da tecnologia DSI. Os documentos incluem testes em planta-piloto para diferentes cenários. (KONG et al., 2010)

Como base de um sistema real para esse trabalho serão utilizados dados de testes de desempenho de bicarbonato de sódio para controlar HCl e SO₂ a partir de uma incinerador de resíduos urbanos na Alemanha. Este incinerador de resíduos queimou cerca de 6 toneladas/h de resíduos sólidos urbanos para gerar vapor. As concentrações de HCl e SO₂ da caldeira foram 581 ppm e 32 ppm, respectivamente (KONG et al., 2010). A Tabela 3 mostra que mais que 99% de HCl e 91% de SO₂ foram removidos com baixo teor de bicarbonato de sódio.

Tabela 4 - Desempenho do Bicarbonato de sódio para remoção de HCl e SO₂ do gás exausto de um incinerador de resíduos sólidos. (Adaptado de KONG et al., 2010)

Teste	Taxa de alimentação de resíduos sólidos (tons/h)	Taxa de alimentação de Bicarbonato de sódio (kg/h)	Taxa de Remoção de HCl (%)	Taxa de Remoção do SO ₂ (%)
1	5.1	130	99.2%	91.3%
2		148	99.3%	91.3%
3		202	99.2%	95.7%
4	5.5	192	99.3%	96.7%
5		99	99.3%	95.7%
6		110	99.3%	93.5%
7	5.5	107	99.3%	92.4%
8		127	99.3%	93.5%
9		103	99.3%	93.5%

Optou-se por utilizar os dados do teste 1 da Tabela 3 como base de dados para o trabalho.

As propriedades do bicarbonato de sódio estão especificadas na Tabela 4 abaixo.

Tabela 5 - Propriedades da Trona e do Bicarbonato de sódio comercializados pela Solvay Chemicals. (Adaptado de KONG et al., 2010)

	Trona	Bicarbonato de Sódio
Formula	$\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot \text{NaHCO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	NaHCO_3
Diâmetro médio (d_{50})	30 μm	110 μm
Densidade (bulk)	49 lb/ft ³	63 lb/ft ³
Pureza	> 97%	> 99%

4.1.3 Associação dos parâmetros do lattice-gas aos parâmetros do sistema real

Colisão partícula - partícula

Para simplificar a análise, admite-se a uniformidade no tamanho e na forma das partículas, e considera-se que o material granular é composto por esferas lisas. Por isso, quer se dizer que não existe uma força tangencial exercida pela esfera sobre uma outra no ponto de contato. RAO (2008) destaca que a imagem é idêntica à das moléculas de um gás, por isso que os materiais granulares, neste estado, são muitas vezes referidos como "gases granulares" na literatura. No entanto, existe uma diferença fundamental entre um material granulado e um gás: colisões ou interações entre as moléculas são elásticas, mas colisões entre os grãos são inelásticas.

A maioria dos estudos tem utilizado um modelo simplificado para a inelasticidade de colisões. Para formular este modelo, consideram-se as partículas 1 e 2 na Figura 19, cuja velocidades de translação antes da colisão são c_1 e c , respectivamente. Após a colisão, suas velocidades tornam-se c'_1 e c' , respectivamente. Existe uma deformação plástica durante cada colisão, mas a deformação plástica total é tão pequena que é admitido que a forma das partículas permanece inalterada. Se $g \equiv c_1 - c$ é a velocidade de translação da partícula em relação a uma partícula 2, o modelo de colisão refere-se ao componente de g normal à superfície no ponto de contato, antes e após a colisão como:

$$(k * g') = -e_p * (k * g) \quad (4.1)$$

Onde o primeiro termo denota uma propriedade pós colisão, e k é o vetor unitário ao longo da linha que une o centro da partícula 1 para o centro da partícula 2. O parâmetro e_p é o coeficiente de restituição, que pode assumir qualquer valor no intervalo de $0 \leq e_p \leq 1$ e depende somente dos materiais de que os corpos são constituídos. Quando $e_p = 1$, a colisão é elástica, e a energia cinética do par de partículas é conservada durante a colisão. Caso contrário ela é inelástica.

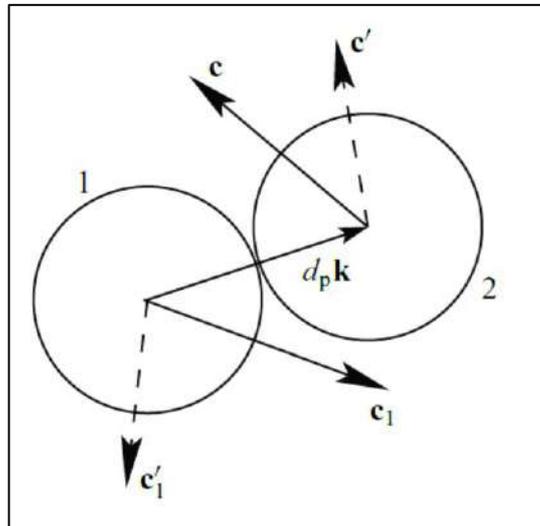


Figura 19 - Colisão entre duas esferas lisas, inelásticas 1 e 2 de diâmetro d_p . (RAO, 2008)

O modelo de colisão inelástica define a variação da energia cinética, ΔE , do par durante a colisão como:

$$\Delta E = -\frac{m_p}{4} * (1 - e_p^2) * (k * g)^2 \quad (4.2)$$

Assim, a energia cinética perdida durante a colisão é proporcional a $(1 - e_p^2)$.

O parâmetro coeficiente de restituição (e_p) do sistema real pode ser associado a probabilidade p do modelo *lattice-gas*. A probabilidade p pode significar várias realidades físicas, a depender da situação, em geral, é a probabilidade de uma partícula ficar parada após se chocar com a outra. Nesse contexto, poderemos ter dois comportamentos desse parâmetro:

- $p = 0$. As colisões ocorrem elasticamente;

- $p > 0$. As colisões ocorrem inelasticamente.

Estritamente falando para $p > 0$, o valor esperado da energia após uma colisão é menor do que energia inicial.

Desse modo, analisando a regra de colisão descrita na Figura 20 conclui-se que a probabilidade p é proporcional à perda de metade da energia cinética. Essa afirmação deve ser em termos de médias, ou seja, seria a fração do número de colisões em que se perde metade da energia cinética.

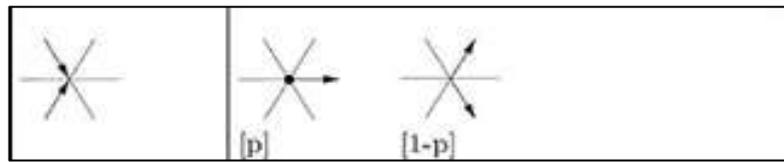


Figura 20 - Regra de colisão entre partículas. (PÖSCHEL et al., 2005.)

Por exemplo, para $p = 0,3$, 30% das colisões perdem metade da energia cinética. Consequentemente 70% das colisões conservam a energia cinética. A variação da energia cinética pode ser entendida como:

$$\Delta E = 30\% * \left(\frac{1}{2} - 1\right) * E_0 + 70\% * (1 - 1) * E_0 \tag{4.3}$$

$$\Delta E = -0,3 * \frac{1}{2} * E_0 \tag{4.4}$$

$$\Delta E = -\frac{p}{2} * E_0 \tag{4.5}$$

Aplicando o modelo de colisão inelástica à colisão do *lattice-gas*:

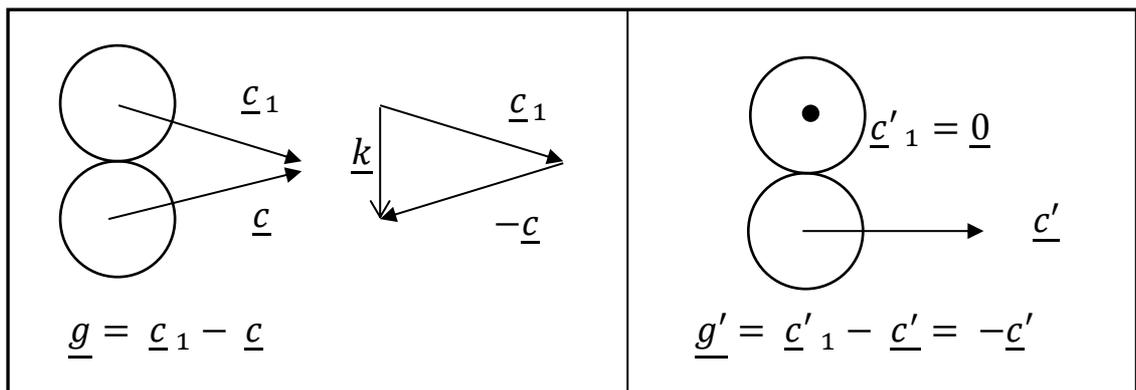


Figura 21 - Aplicação do modelo de colisão inelástica à regra de colisão entre duas partículas do *lattice-gas*.

Figura 21 –

Assim define-se o vetor unitário ao longo da distância entre os centros das partículas, \underline{k} , como:

$$\underline{k} = \frac{\underline{c}_1 - \underline{c}}{\|\underline{c}_1 - \underline{c}\|} \quad (4.6)$$

Aplicando a Fórmula (4.2):

$$\Delta E = -\frac{m_p}{4} * (1 - e_p^2) * \left[\frac{\underline{c}_1 - \underline{c}}{\|\underline{c}_1 - \underline{c}\|} * (\underline{c}_1 - \underline{c}) \right]^2 \quad (4.7)$$

Onde $\underline{c}_1 = \begin{bmatrix} c_{1x} \\ c_{1y} \end{bmatrix}$ e $\underline{c} = \begin{bmatrix} c_x \\ c_y \end{bmatrix}$, assim:

$$\Delta E = -\frac{m_p}{4} * (1 - e_p^2) * \|\underline{c}_1 - \underline{c}\|^2 \quad (4.8)$$

No caso específico do lattice-gas $\|\underline{c}_1\| = \|\underline{c}\| = \|\underline{c}_1 - \underline{c}\|$ assim:

$$\Delta E = -\frac{m_p}{4} * (1 - e_p^2) * \|\underline{c}_1\|^2 \quad (4.9)$$

$$\Delta E = -\frac{(1-e_p^2)}{4} * \left[2 * \frac{1}{2} * m_p * \|\underline{c}_1\|^2 \right] \quad (4.10)$$

$$\Delta E = -\frac{(1-e_p^2)}{4} * E_0 \quad (4.11)$$

Logo, comparando com o resultado encontrado na Fórmula (4.5):

$$-\frac{p}{2} = -\frac{(1-e_p^2)}{4} \quad (4.12)$$

Assim podemos concluir que o coeficiente de restituição do modelo lattice – gas, e_{pLG} , é:

$$e_{pLG} = \sqrt{1 - 2p} \quad (4.13)$$

Em que:

$$e_p = 1 \rightarrow p = 0$$

$$e_p = 0 \rightarrow p = 1/2$$

O coeficiente de restituição (e_p) e a probabilidade p são grandezas adimensionais.

Colisão partícula - parede

Segundo RAO (2008), toda partícula que colide transmite uma fração φ de seu momento tangencial à parede. O impulso por colisão é:

$$J_t = \varphi * m_p * v_{slip} * t \quad (4.14)$$

A constante φ é o coeficiente de especularidade, que caracteriza a rugosidade ou irregularidades na parede. As colisões são ditas especulares ($\varphi = 0$) se a parede é lisa e as partículas colidentes são defletidas sem nenhuma variação em seu momento tangencial, ou difusas ($\varphi = 1$) se as partículas são defletidas em direções não correlacionadas àquela de sua aproximação, de tal forma que, na média, todo seu momento tangencial é absorvido pela parede. A velocidade média das partículas, v , pode ser diferente da velocidade da parede, v_w , o que define a velocidade de deslizamento $v_{slip} = v - v_w$. O parâmetro t representa o vetor unitário tangente à parede e m_p , a massa das partículas. A Figura 22 demonstra uma fina camada de partículas de espessura δ adjacente a uma parede sólida e os parâmetros descritos acima. O vetor n representa a unidade normal à parede.

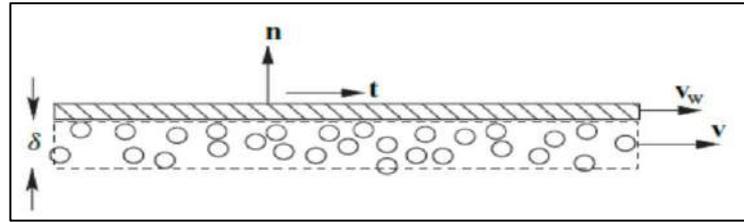


Figura 22 - Camada de partículas adjacente à uma parede rígida. (RAO, 2008)

O parâmetro p_{wall} refere-se a probabilidade de uma partícula que colide obliquamente sofrer uma deflexão para cima em sua trajetória e retornar para a mesma direção em que se chocou com a parede, tendo que ser encarado em termos de médias, ou seja, seria a fração do número de colisões em que a partícula volta para mesma direção do choque (Figura 23). O retorno da partícula não tem sentido físico mas esta estratégia diminui a velocidade média do conjunto de partículas como um todo e dessa forma auxilia na modelagem de um sistema real.

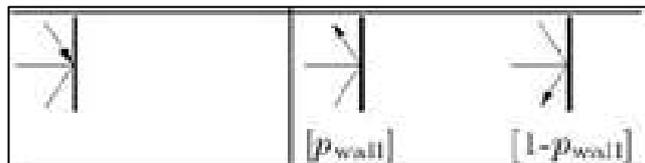


Figura 23 - Regra de colisão partícula - parede. (PÖSCHEL et al., 2005.)

Por exemplo, para $p_{wall} = 0,8$, 80% das colisões transmitem o momento tangencial para a parede e voltam para a mesma direção do choque. Consequentemente 20% das colisões não transmitem o momento à parede. A partícula que se choca com a parede e retorna na mesma direção tem uma inversão de 180° na direção da velocidade. Assim a variação total de momento linear dessa partícula será, em módulo:

$$(m_p * c) - (m_p * (-c)) = 2 * m_p * c \quad (4.15)$$

Onde \underline{c} é a velocidade da partícula no lattice-gas. Desse modo, o momento transmitido à parede por uma população de partículas pode ser entendido como:

$$p_{wall} * (2 * m_p * \underline{c} \cdot \underline{t}) + (1 - p_{wall}) * 0 = 2 * p_{wall} * m_p * c_t \quad (4.16)$$

Onde c_t é a componente tangencial da velocidade. Para fazer sentido físico, a probabilidade p_{wall} do modelo *lattice-gas* pode ser associada ao parâmetro coeficiente de especularidade (φ) do sistema real. Comparando esse resultado com a fórmula 4.13 pode-se concluir que:

$$\varphi = 2p_{wall} \quad (4.17)$$

Em que:

$$\varphi = 0 \rightarrow p_{wall} = 0$$

$$\varphi = 1 \rightarrow p_{wall} = 1/2$$

O coeficiente de especularidade (φ) e a probabilidade p_{wall} são grandezas adimensionais.

Outros parâmetros

Neste tipo de simulação, todas as partículas têm o mesmo tamanho e a velocidade é uma variável binária, ou seja, pode ter os valores 0 ou 1. Apesar de a simulação por *lattice-gas* se basear em quantidades unitárias e adimensionais, elas podem ser relacionadas a variáveis do problema real. O valor unitário da velocidade seria equivalente, em termos reais, à velocidade terminal das partículas.

O comprimento das arestas é considerado unitário neste tipo de simulação (Figura 24). Entretanto, em cada aresta, pode haver o movimento de três partículas, duas partículas móveis - cada uma vinda de um nó - mais uma parada. Logo, a distância de uma aresta seria equivalente a 3 vezes o tamanho d_p das partículas, conforme a Figura 24. As variáveis do modelo *lattice-gas* serão representadas com o subscrito "LG".

$$\Delta s_{LG} = 1 \quad (4.18)$$

$$\Delta s_{LG} = 3d_{pLG} \quad (4.19)$$

E, finalmente, cada um dos passos unitários de tempo, $t_{LG} = 1$, seria equivalente ao tempo em que uma partícula percorre uma distância igual a $3 d_{PLG}$. O parâmetro p_{grav} é proporcional à aceleração da gravidade, está relacionada à probabilidade de uma partícula isolada começar a cair. Finalmente, a concentração da suspensão em um modelo *lattice-gas* bidimensional seria equivalente à concentração em uma “fatia” de espessura dp da suspensão tridimensional.

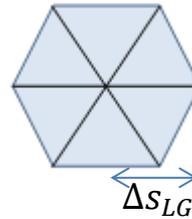


Figura 24 – Parâmetro de distância no “lattice”.

Para um sistema real, será proposta uma medida alternativa da concentração de sólidos. A razão de sólidos (em inglês, “solids ratio”) é definida como a razão entre as vazões mássicas de sólido e de ar:

$$\phi = \frac{\dot{m}_S}{\dot{m}_A} \quad (4.20)$$

A razão de sólidos pode ser reescrita em função das vazões volumétricas de sólido e de ar, bem como das densidades, ρ . A razão entre as vazões volumétricas Q_S/Q_A pode ser escrita como a razão entre os volumes ocupados pelo sólido e pelo ar dentro do tubo, em determinado instante (denotada por V_S/V_A):

$$\phi = \frac{\dot{m}_S}{\dot{m}_A} = \frac{\rho_S Q_S}{\rho_A Q_A} = \frac{\rho_S V_S}{\rho_A V_A} \quad (4.21)$$

Desta forma, define-se o novo parâmetro ϕ_V , a razão volumétrica de sólidos, como

$$\phi_V = \frac{V_S}{V_A} = \phi \frac{\rho_A}{\rho_S} \quad (4.22)$$

Nota-se que ϕ_V é um parâmetro adimensional. No caso do sistema do lattice-gas, a razão volumétrica de sólidos pode ser escrita como a razão entre o número de posições dentro do domínio ocupadas por partículas (que é igual ao número de partículas n_{part}) e o número de posições não ocupadas por partículas (que estariam, então, ocupadas pelo ar):

$$\phi_{V,LG} = \frac{n_{part}}{7 * n_x * n_y - n_{part}} \Rightarrow n_{part} = 7 * \frac{\phi_{V,LG}}{1 + \phi_{V,LG}} n_x * n_y \quad (4.23)$$

4.1.4 Grupos adimensionais relevantes

Os grupos adimensionais relevantes para a descrição do transporte pneumático podem ser obtidos através da análise dimensional e dos resultados do Teorema Pi de Buckingham (BRUNETTI, 2008). A metodologia para a obtenção dos grupos pode ser dividida nos seguintes passos:

1º Passo: Determinar o número de grandezas que influenciam o fenômeno.

Parâmetros relevantes no sistema real:

d_p – Diâmetro da partícula

D – Diâmetro da tubulação

l – Comprimento da linha de injeção

v_t – Velocidade terminal

e_p – Coeficiente de restituição (adimensional)

φ – Coeficiente de especularidade (adimensional)

C_S - Concentração de sólidos da suspensão em massa por volume

\dot{m}_S - Vazão mássica de sólidos

$$\text{Número de parâmetros relevantes} = N = 6$$

2º Passo: Construir a matriz dimensional.

Tendo como dimensões fundamentais: massa (M), comprimento (L) e tempo (T). A partir das dimensões de cada uma das grandezas tem-se a seguinte matriz dimensional:

	d_p	D	l	v_t	C_S	\dot{m}_S
M	0	0	0	0	1	1
L	1	1	1	1	-3	0
T	0	0	0	-1	0	-1

Número de dimensões fundamentais = $Z = 3$

Segundo o Teorema Pi de Buckingham, o número de grupos adimensionais é:

Número de grupos $\pi = N - Z = 6 - 3 = 3$

Assim escolhendo –se como núcleos D, v_t, C_S os grupos π serão os seguintes:

$$\pi_1 = D^{A1} \cdot v_t^{B1} \cdot C_S^{C1} \cdot d_p$$

$$M^0 \cdot L^0 \cdot T^0 = (M^0 \cdot L^1 \cdot T^0)^{A1} \cdot (M^0 \cdot L^1 \cdot T^{-1})^{B1} \cdot (M^1 \cdot L^{-3} \cdot T^0)^{C1} \cdot M^0 \cdot L^1 \cdot T^0$$

$$C1 = 0; B1 = 0; A1 = -1$$

$$\pi_1 = \frac{d_p}{D} \quad (4.24)$$

$$\pi_2 = D^{A2} \cdot v_t^{B2} \cdot C_S^{C2} \cdot L$$

$$M^0 \cdot L^0 \cdot T^0 = (M^0 \cdot L^1 \cdot T^0)^{A2} \cdot (M^0 \cdot L^1 \cdot T^{-1})^{B2} \cdot (M^1 \cdot L^{-3} \cdot T^0)^{C2} \cdot M^0 \cdot L^1 \cdot T^0$$

$$C2 = 0; B2 = 0; A2 = -1$$

$$\pi_2 = \frac{l}{D} \quad (4.25)$$

$$\pi_3 = D^{A3} \cdot v_t^{B3} \cdot C_S^{C3} \cdot \dot{m}_S$$

$$M^0 \cdot L^0 \cdot T^0 = (M^0 \cdot L^1 \cdot T^0)^{A3} \cdot (M^0 \cdot L^1 \cdot T^{-1})^{B3} \cdot (M^1 \cdot L^{-3} \cdot T^0)^{C3} \cdot M^1 \cdot L^0 \cdot T^{-1}$$

$$C3 = -1; B3 = +1; A3 = -2$$

$$\pi_3 = \frac{v_t * \dot{m}_s}{C_s * D^2} \quad (4.26)$$

4.1.5 Procedimento para projeto da tubulação pneumática através dos nomogramas e do modelo *lattice-gas* aplicando a similaridade dos grupos π

1) Para este procedimento devem ser dados o diâmetro da partícula d_p , a velocidade terminal v_t , o comprimento da linha de injeção l , a vazão de sólidos desejada para o sistema de transporte pneumático \dot{m}_s , o coeficiente de restituição e_p e o coeficiente de especularidade φ .

Na seção 4.1.2 foram detalhados alguns parâmetros como:

$$\rho_p = 63 \frac{lb}{ft^3} = 1009,1302 \frac{kg}{m^3} (SI)$$

$$d_p = 100 \mu m = 10^{-4} m (SI)$$

$$\dot{m}_s = 130 \frac{kg}{h} = 3,61 * 10^{-2} \frac{kg}{s}$$

Como não se encontrou na literatura nenhum dado de comprimento e diâmetro da linha de injeção admitiu-se, baseado em dados de outros materiais, um sistema de injeção com as seguintes características:

$$l = 250 ft = 76,2195 m (SI)$$

$$T = 350 \text{ } ^\circ F = 449,82 K$$

$$P = 14 psi = 96530 Pa (SI)$$

$$R = 8,3144 \frac{J}{mol.K}$$

$$\mu_A = 2,90 * 10^{-5} Pa.s$$

Como o sistema em fase diluída proposto é caracterizado pela baixa pressão e elevada temperatura, o gás real tende a se comportar como ideal. Quando a pressão é baixa e a temperatura é alta a distância entre as moléculas é a maior possível e o fator de compressibilidade (Z) tende a um. Assim podemos estimar a densidade do ar, ρ_A , através da equação dos gases ideais, que é representada na equação 4.27.

$$\rho_A = \frac{PM_A * P}{R * T} \quad (4.27)$$

Para calcular a massa molecular do ar seco, PM_A , a sua composição pode ser resumida como sendo 79% de N_2 e 21% de O_2 . Assim:

$$79\% N_2 = 28 * 0,79 = 22 g/mol$$

$$21\% O_2 = 32 * 0,21 = 7 g/mol$$

$$PM_A = 29 g/mol$$

$$\rho_A = 0,7485 \frac{kg}{m^3}$$

Do balanço de forças que agem sobre a partícula sólida em movimento no ar tem-se:

$$v_t = \sqrt{\frac{4}{3} * \frac{d_p * (\rho_s - \rho_A) * g}{\rho_A * C_D}} \quad (4.28)$$

O coeficiente de arraste, C_D , é função do número de Reynolds da Partícula:

$$C_D = f(Re) \quad (4.29)$$

$$C_D = \left[\left(\frac{24}{Re} \right)^{0,65} + 0,43^{0,63} \right]^{1/0,63} \quad (4.30)$$

$$Re = \frac{d_p \cdot v_t \cdot \rho_A}{\mu_A} \quad (4.31)$$

As equações acima serão utilizadas para calcular a velocidade terminal v_t por tentativa e erro, através de um método iterativo descrito na Figura 25:

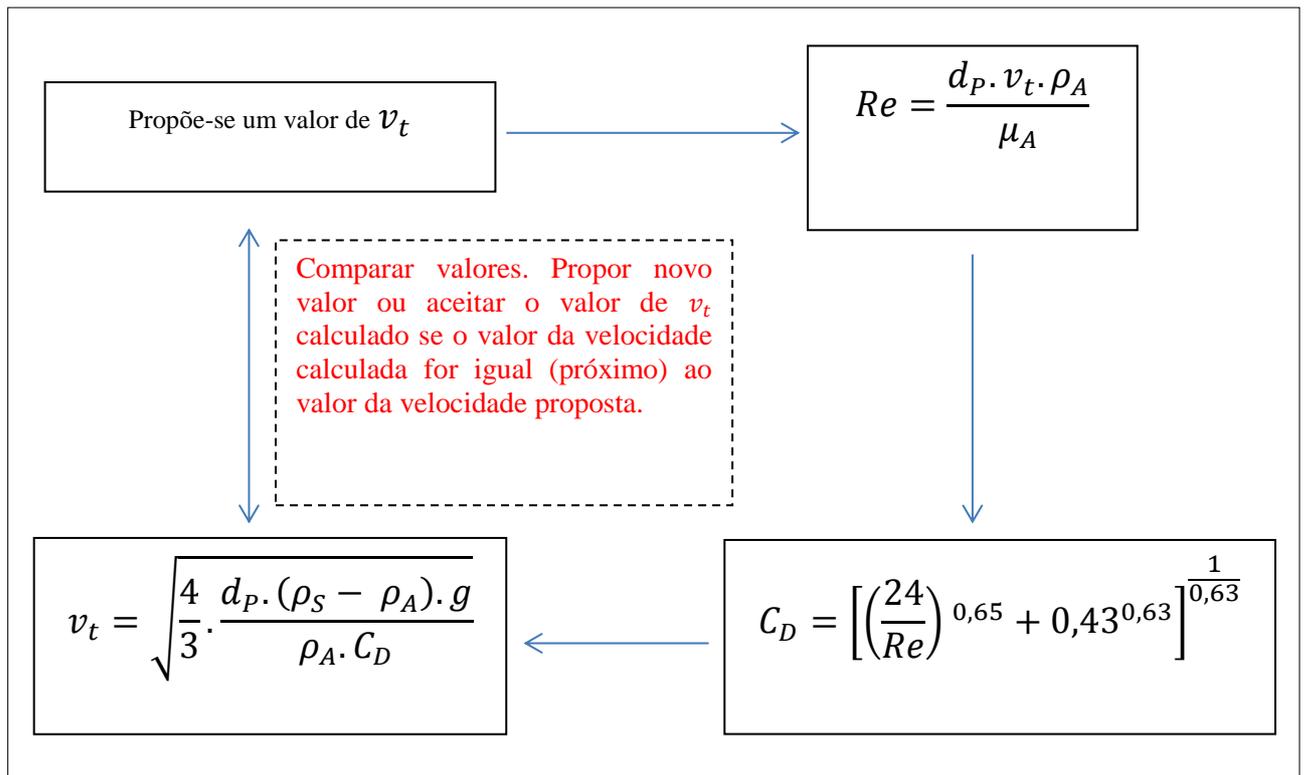


Figura 25 - Cálculo da velocidade terminal das partículas sólidas.

O produto do laço iterativo foi:

$$v_t = 0,368 \frac{m}{s}$$

O processo iterativo foi desenvolvido no Excel e os seus passos de iteração podem ser vistos na Tabela 5 seguinte.

Tabela 6 – Processo iterativo para cálculo da velocidade terminal

Cálculo da velocidade terminal:						
dp	1,00E-04 m		vt (m/s)	Rep	CD	novo vt (m/s)
rho_s	2210 kg/m3		0,01	2,58E-02	941,5835	0,063999954
rho	0,7485 kg/m3		0,064	1,65E-01	151,22	0,159699841
visc	2,90E-05 Pa.s		0,1597	4,12E-01	62,47707	0,248455582
g	9,8 m/s2		0,248456	6,41E-01	41,05085	0,306512379
densidade bulk	63 lb/ft3		0,306512	7,91E-01	33,69909	0,338298422
	1009,13 kg/m3		0,338298	8,73E-01	30,73218	0,354252091
			0,354252	9,14E-01	29,44139	0,361934435
			0,361934	9,34E-01	28,85991	0,365562446
		Rep: no. De Reynolds de Partícula CD: coeficiente de arraste vt: velocidade terminal	0,365562	9,44E-01	28,59369	0,367260271
			0,36726	9,48E-01	28,47089	0,368051456
			0,368051	9,50E-01	28,41405	0,368419422
			0,368419	9,51E-01	28,38769	0,368590401
			0,36859	9,51E-01	28,37547	0,368669813
			0,36867	9,52E-01	28,36979	0,36870669

2) Para o sistema real: escolher um valor para U (velocidade da suspensão sólido-ar) na Tabela 6 tendo como base a densidade do sólido no bulk.

$$\rho_p = 63 \frac{lb}{ft^3} = 1009,1302 \frac{kg}{m^3} (SI)$$

$$U = 7330 \frac{m}{min} = 38,6 \frac{m}{s}$$

3) Para o sistema real: escolha um diâmetro D (início do procedimento iterativo no projeto do sistema real – método apresentado em PERRY et al. (1999)); Começaremos com um tubo comum de 4 polegadas de diâmetro.

$$D = 4 \text{ in} = 0,1016 \text{ m}$$

Tabela 7 - Velocidade do ar necessária para transporta sólidos de várias densidades.
(PERRY et al., 1999)

Densidade (bulk)		Velocidade do ar		Densidade (bulk)		Velocidade do ar	
lb/ft ³	kg/m ³	ft/mim	m/mim	lb/ft ³	kg/m ³	ft/mim	m/mim
10	160	2900	884	70	1120	7700	2347
15	240	3590	1094	75	1200	8000	2438
20	320	4120	1256	80	1280	8250	2515
25	400	4600	1402	85	1360	8500	2591
30	480	5050	1539	90	1440	8700	2652
35	560	5500	1676	95	1520	9000	2743
40	640	5840	1780	100	1600	9200	2804
45	720	6175	1882	105	1680	9450	2880
50	800	6500	1981	110	1760	9700	2957
55	880	6800	2072	115	1840	9900	3118
60	960	7150	2179	120	1920	10500	3200
65	1040	7450	2270				

4) Para o sistema real: calcular os grupos adimensionais $\Pi_1 = d_p/D$ e $\Pi_2 = l/D$;

$$\pi_1 = 9,8425 * 10^{-4}$$

$$\pi_2 = 750,1919$$

5) Igualar os grupos adimensionais do *lattice-gas* aos do sistema real, para assegurar a similaridade de comportamento.

$$\Pi_1 = \frac{d_p}{D} = \frac{d_{p,LG}}{D_{LG}} ; \quad \Pi_2 = \frac{l}{D} = \frac{l_{LG}}{D_{LG}} \quad (4.32)$$

Para calcular D_{LG} , l_{LG} , e, conseqüentemente, calcular os parâmetros n_x e n_y do LG;

Parâmetros *lattice-gas*:

$$\Delta s_{LG} = 1$$

$$d_{p,LG} = \frac{\Delta s_{LG}}{3} = 0,3333$$

Assim:

$$D_{LG} = 338,6673$$

$$l_{LG} = 2,54065 * 10^5$$

Como:

$$D_{LG} = n_X * \Delta s_{LG} \text{ e } l_{LG} = n_Y * \Delta s_{LG} \quad (4.33)$$

$$n_X = 338,6673$$

$$n_Y = 2,54065 * 10^5$$

6) Para o sistema real: calcular a vazão de suspensão Q através do Nomograma 1 de PERRY et al. (1999), representado na Figura 26, ou utilizando:

$$Q = UA = \frac{U * \pi * D^2}{4} \quad (4.34)$$

$$Q = 0,302 \frac{m^3}{s}$$

Também podemos definir C_s :

$$C_s = \frac{\dot{m}_s}{Q} \quad (4.35)$$

$$C_s = 0,1195 \frac{kg}{m^3}$$

7) Para o sistema real: calcular a razão de sólidos ϕ usando o Nomograma 2 de PERRY et al. (1999), representado na Figura 27 ou a equação

$$\phi = \frac{\dot{m}_S}{\dot{m}_A} = \frac{\dot{m}_S}{\rho_A * Q_A} \approx \frac{\dot{m}_S}{\rho_A * Q} \quad (4.36)$$

$$\phi \approx 0,1597$$

8) Para o sistema real: com o valor de ϕ calculado acima, calcular a razão volumétrica de sólidos ϕ_V , definido na equação (4.20).

$$\phi_V = \frac{V_S}{V_A} = \phi * \frac{\rho_A}{\rho_S} \quad (4.37)$$

$$\phi_V = 1,1845 * 10^{-4}$$

9) Igualar o valor do ϕ_V do sistema real encontrado em acima ao $\phi_{V,LG}$. Com isto, calcular o parâmetro n_{part} do LG;

$$\phi_V = \phi_{V,LG} = \frac{n_{part}}{7 * n_x * n_y - n_{part}}$$

$$n_{part} = 7 * \frac{\phi_{V,LG}}{1 + \phi_{V,LG}} n_x * n_y$$

$$n_{part} = 71334,5$$

10) Para o sistema real: notar que o grupo adimensional pode ser reescrito em termos da vazão Q (=vazão mássica de sólidos/concentração de sólidos da suspensão em massa por volume)

$$\Pi_3 = \frac{\dot{m}_S}{C_S * v_t * D^2} = \frac{Q}{v_t * D^2} \quad (4.38)$$

e que, como $Q = UA = U \frac{\pi D^2}{4}$, podemos definir e utilizar um outro grupo adimensional mais conveniente:

$$\Pi'_3 = \frac{\Pi_3}{\frac{\pi}{4}} = \frac{Q}{\frac{v_t * \pi * D^2}{4}} = \frac{U}{v_t} \quad (4.40)$$

11) Para o sistema real: calcular o valor do grupo adimensional Π'_3 .

$$\Pi'_3 = 101,212$$

12) Igualar o grupo adimensional

$$\Pi'_3 = \frac{U}{v_t} = \frac{U_{LG}}{v_{t,LG}} = \frac{\Delta s_{LG} / \Delta t_{LG}}{p_{grav} * \Delta s_{LG} / \Delta t_{LG}} = \frac{1}{p_{grav}} \quad (4.41)$$

de modo a calcular o parâmetro p_{grav} .

$$p_{grav} = 9,88 * 10^{-3}$$

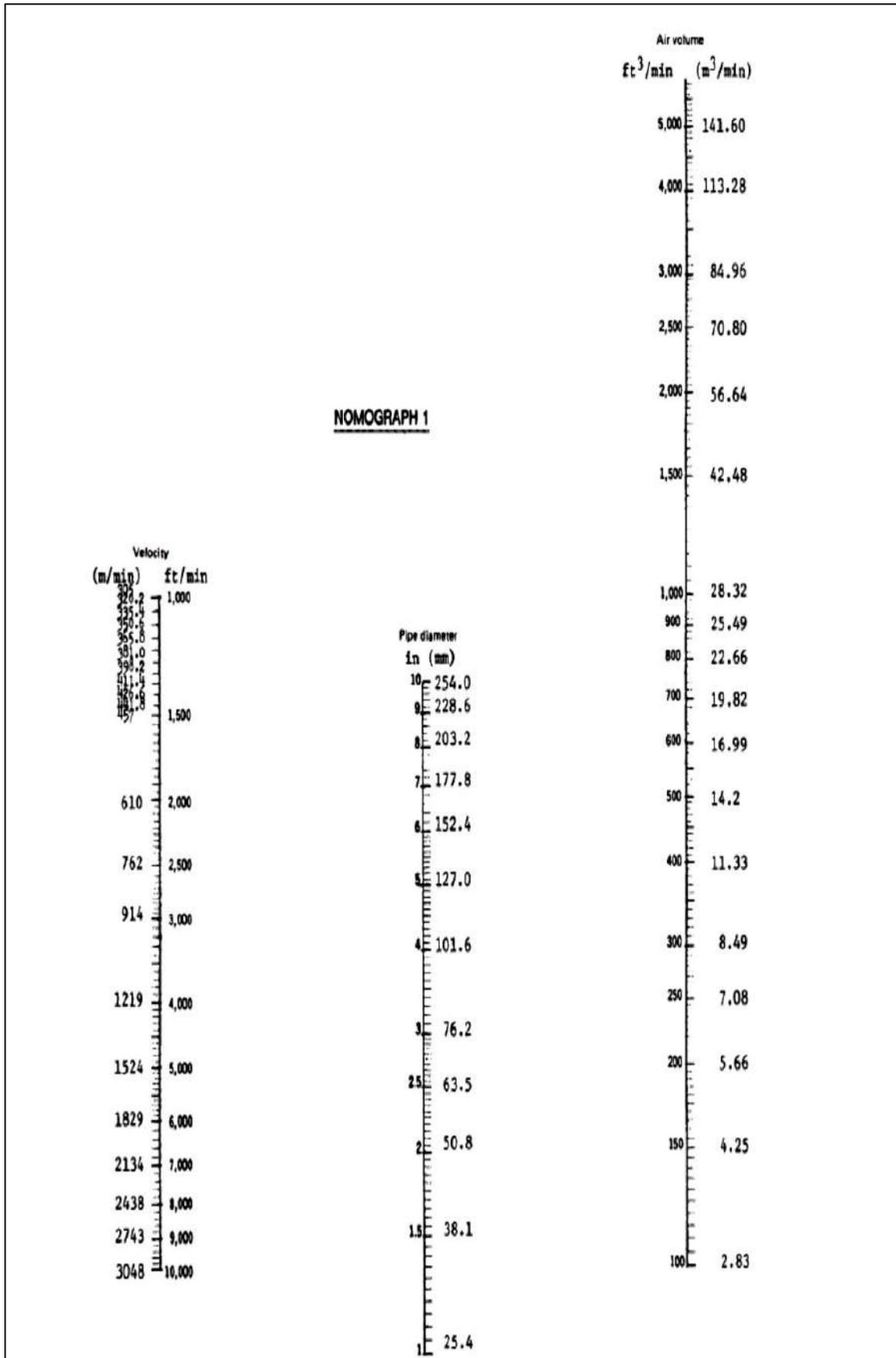


Figura 26 - Nomograma 1 para determinar parâmetros de projeto de uma linha de transmissão pneumática (PERRY et al., 1999)

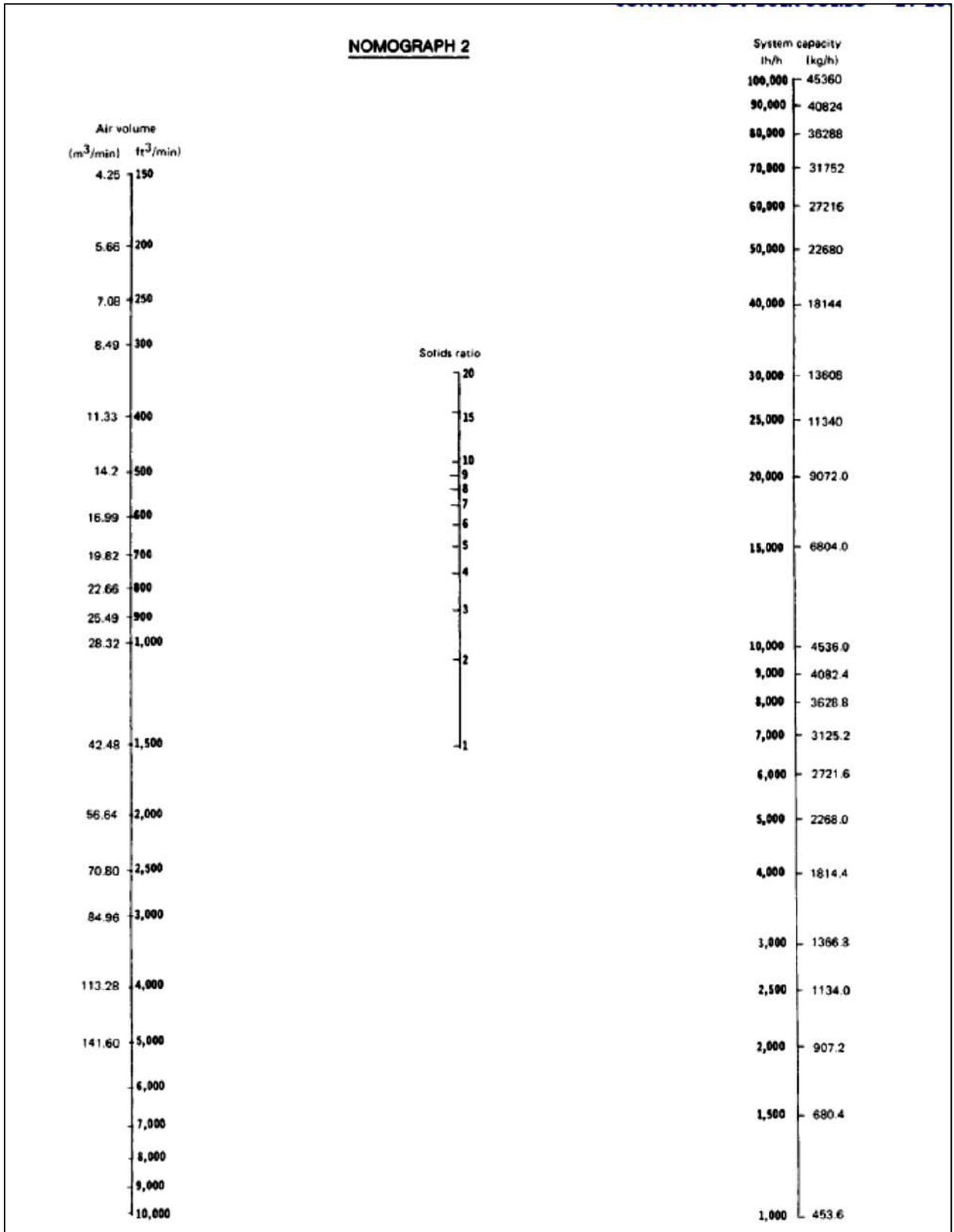


Figura 27 - Nomograma 2 para determinar parâmetros de projeto de uma linha de transmissão pneumática. (PERRY et al., 1999)

4.2 ESTRATÉGIA PARA REDUZIR O TEMPO COMPUTACIONAL DE SIMULAÇÃO

O código computacional escrito em MATLAB é composto de um programa principal e diversas *functions*. No programa principal, declaram-se os parâmetros de entrada da simulação ($nx, ny, p, pgrav, passos$, etc.) e chamam-se as *functions* ou funções, cada qual com um objetivo específico (uma delas realiza as colisões interpartículas, outra realiza as colisões partícula-parede, etc.). Entretanto, a execução do programa principal original, que incluía uma *function* para visualização do escoamento, era muito lenta, o que não permitia que se chegasse ao fim das simulações desejadas e inviabilizava a análise dos resultados.

O MATLAB fornece um mecanismo simples para analisar em quanto tempo uma determinada seção do código leva para ser executada, o “*Profiler*”. Essa ferramenta é importante para identificar os gargalos do código desenvolvido, fornecendo dados de cada função e o tempo de simulação de cada uma. Uma vez que tenha terminado a execução do “*Profiler*”, este produz uma janela que contém as informações necessárias para identificar possíveis problemas no código. A ferramenta fornece as seguintes informações:

- “*Function Name*”: o nome da função.
- “*Calls*” - o número de vezes que a função foi chamada.
- “*Total Time*” - a quantidade de tempo de CPU gasto executando essa função incluindo quaisquer outras funções que ela chame.
- “*Self Time*” - a quantidade de tempo de CPU gasto executando essa função com exclusão de quaisquer outras funções que ela chame.
- “*Total Time Plot*” - uma representação gráfica do “*total time*” e do “*self time*” .

A Figura 28 mostra o resultado da execução da ferramenta “*Profiler*” para o código original. Pela representação gráfica em barras pode-se notar que a função

hardcopy (responsável por capturar figuras), a função *visualiza* (função com o código computacional desenvolvido para visualização), e a função *dec2bin* (converte o número decimal, estado da célula, para número binário) são as funções que mais requeriram tempo computacional. No entanto, as funções *hardcopy* e *dec2bin* estão dentro do código computacional da função *visualiza*, ou seja, o grande gargalo do código computacional seria o alto tempo demandado pela função *visualiza*.

Profile Summary				
Generated 29-Oct-2014 09:26:27 using cpu time.				
Function Name	Calls	Total Time	Self Time*	Total Time Plot (dark band = self time)
simul2	1	29323.053 s	2.622 s	
visualiza	2	24446.985 s	6118.110 s	
print	2	17379.266 s	2.893 s	
graphics\private\render	2	17197.181 s	0.873 s	
hardcopy	2	17137.980 s	17137.979 s	
contagem	24	4680.182 s	1020.537 s	
dec2bin	4420000	4243.439 s	4243.439 s	
getframe	2	332.378 s	332.378 s	
propaga_novo	4	183.716 s	183.716 s	
...ph_scattergroup_schema>L.doDirtyAction	48	173.480 s	0.255 s	
specgraph_scattergroup.refresh	32	173.254 s	172.725 s	
graphics\private\restore	2	161.566 s	0.424 s	
graphics\private\restorehg	2	161.133 s	157.303 s	
imwrite	2	57.481 s	0.460 s	
imagesci\private\writetif	2	55.549 s	1.858 s	
imagesci\private\wtifc (MEX-function)	2	53.491 s	53.491 s	
scatter	16	20.154 s	3.306 s	

Figura 28 - Janela de Informações resultante da ferramenta “Profiler”

A partir disso optou-se por fazer alterações no programa a fim de reduzir o tempo computacional da simulação. Algumas ações foram tomadas como:

- desvincular a função *visualiza* do programa principal, *simul2*, e torná-la um programa à parte (a visualização passou a ser uma atividade de pós-processamento);
- otimizar a construção da matriz com o estado das células: antes o programa armazenava todas as informações da matriz, incluindo os estados das células que eram iguais a zero. Como o sistema real é diluído, na simulação com o *lattice-gas* muitas células têm o estado zero (nenhuma partícula). Modificou-se o armazenamento desta matriz esparsa, de forma que somente os valores não nulos fossem armazenados na memória, tornando o esforço computacional menor.

O resultado do *Profiler* aplicado ao programa principal *simul2* atual está na Figura 26 e do novo programa *visualiza* (oriundo da antiga função *visualiza*) está na Figura 29. O tempo de simulação de *simul2* reduziu-se significativamente devido às ações descritas acima.

Profile Summary				
Generated 31-Jan-2015 20:18:56 using cpu time.				
Function Name	Calls	Total Time	Self Time*	Total Time Plot (dark band = self time)
simul2	1	123.622 s	0.249 s	
propaga_novo	3	112.126 s	112.126 s	
gravidade_horiz	3	6.707 s	6.707 s	
dlmwrite	1	3.291 s	3.135 s	
Aleatorio	1	0.826 s	0.780 s	
colisao_parede_ccp2	2	0.281 s	0.281 s	
dlmwrite>parseinput	1	0.156 s	0.047 s	
cell.ismember	1	0.109 s	0.031 s	
ismember	1	0.078 s	0.062 s	
ccp_meio2	2	0.078 s	0.078 s	
colisao_nova2	2	0.048 s	0.048 s	

Figura 29 - Janela de Informações resultante da ferramenta *Profiler* executada sobre o programa *simul2* atual.

Através da Figura 30, nota-se que o tempo de simulação da função *visualiza* tornou-se mais aceitável em termos de simulações, devido ao armazenamento mais eficiente da matriz.

Profile Summary				
Generated 31-Jan-2015 20:24:39 using cpu time.				
Function Name	Calls	Total Time	Self Time*	Total Time Plot (dark band = self time)
visualiza	1	31.108 s	27.176 s	
dec2bin	71058	1.980 s	1.980 s	
getframe	1	1.279 s	1.279 s	
specgraph.scattergroup.refresh	14	0.889 s	0.889 s	
...ph.scattergroup.schema>LdoDirtyAction	21	0.889 s	0.000 s	
scatter	7	0.297 s	0.048 s	
dlmread	6	0.203 s	0.156 s	
specgraph.scattergroup.scattergroup	7	0.141 s	0.015 s	

Figura 30 - Janela de Informações resultante da ferramenta *Profiler* executado sobre o programa *visualiza*.

4.3 TEMPO CARACTERÍSTICO

Antes de se descreverem as condições de simulação, representadas pelo valor dos parâmetros de entrada p, p_{grav}, n_x, n_y e n_{part} no código computacional em MATLAB, deve-se atentar para a relação entre o tempo real e o tempo de simulação escolhido (representado no código pelo parâmetro $passos$). O primeiro refere-se à quantidade, em segundos, em que se observa o transporte pneumático no sistema real, e o segundo ao número inteiro $passos$, parâmetro do programa computacional que estipula a quantidade de loops que serão executados na simulação. Assim, deseja-se descobrir qual a relação entre uma escala de tempo real Δt e a escala de tempo do *lattice-gas* $\Delta t_{LG} = 1$. Dados do capítulo anterior nos levam a uma expressão para o diâmetro da tubulação do *lattice-gas*, que é adimensional:

$$D_{LG} = n_x * \Delta s_{LG} = 338,6$$

No capítulo anterior foi explicada a importância da similaridade entre o parâmetro real e o simulado. Propõe-se então a seguinte relação de proporcionalidade entre escalas de comprimento do *lattice-gas* e do sistema real:

$$\frac{D_{LG}}{\Delta s_{LG}} = \frac{D}{\Delta s}$$

$$\Delta s = D * \frac{\Delta s_{LG}}{D_{LG}} = \frac{0,1016}{338,6} = 3 * 10^{-4} m$$

Da mesma forma, propõe-se uma relação de proporcionalidade entre escalas de tempo do *lattice-gas* e do sistema real (deve-se notar que a razão $\Delta s_{LG}/v_{tLG}$ representa um tempo característico do *lattice-gas*, que poderia ser interpretado como a fração de tempo do *lattice-gas* necessária para a queda de uma partícula através da distância entre duas células Δs_{LG}):

$$\frac{\Delta t_{LG}}{\Delta s_{LG}/v_{tLG}} = \frac{\Delta t}{\Delta s/v_t} \Rightarrow \Delta t = \frac{\Delta t_{LG} * v_{tLG}}{\Delta s_{LG}} * \frac{\Delta s}{v_t}$$

Em que:

$$v_{t_{LG}} = p_{grav} * \frac{\Delta s_{LG}}{\Delta t_{LG}}$$

Logo, o tempo em segundos que seria equivalente a um “passo” discreto de tempo da simulação do *lattice-gas* Δt_{LG} é dado por:

$$\Delta t = \frac{p_{grav} * \Delta s}{v_t} = 8,05 * 10^{-6} \text{ s}$$

Ou seja, para a simulação de 1 segundo no sistema real de transporte pneumático, são necessários aproximadamente 124000 passos do sistema *lattice-gas*.

4.4 ANÁLISE DO PADRÃO DE ESCOAMENTO

A linha de transmissão pneumática foi representada por um *lattice* com diâmetro n_x e comprimento n_y . Os parâmetros utilizados na simulação encontram-se na Tabela 7.

Tabela 8 - Parâmetros para a simulação do transporte pneumático

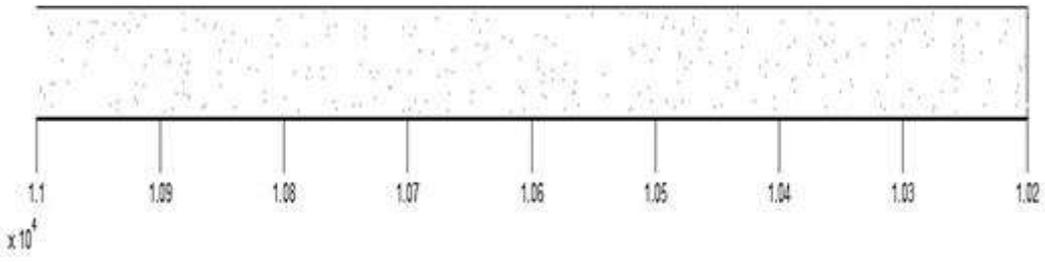
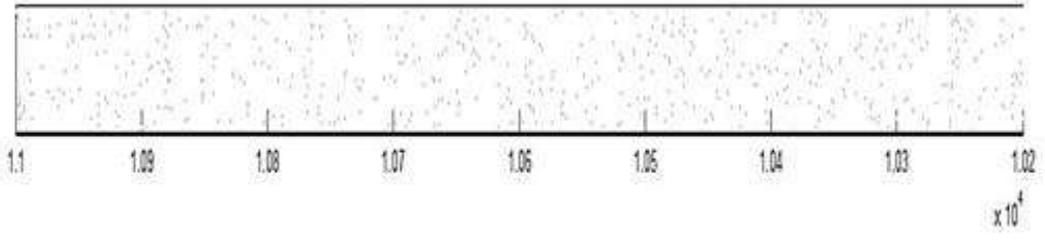
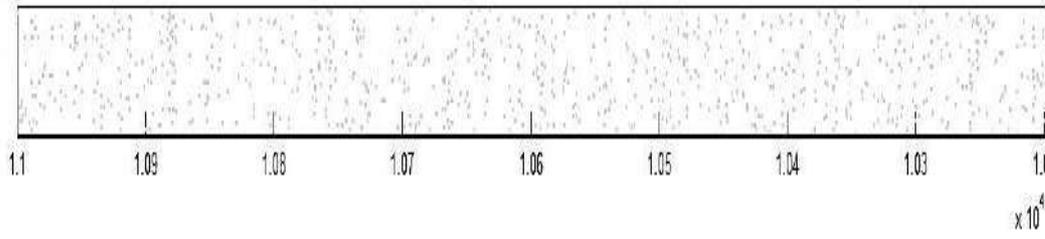
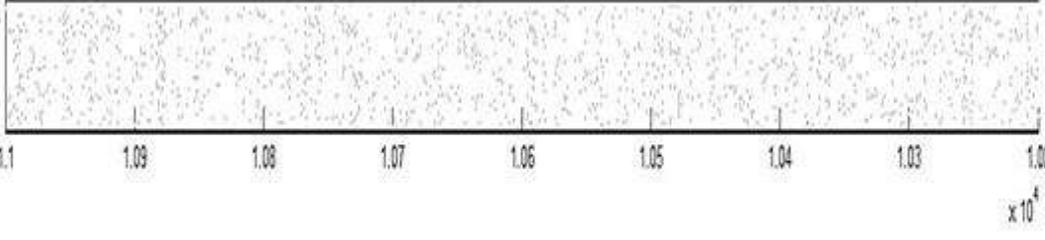
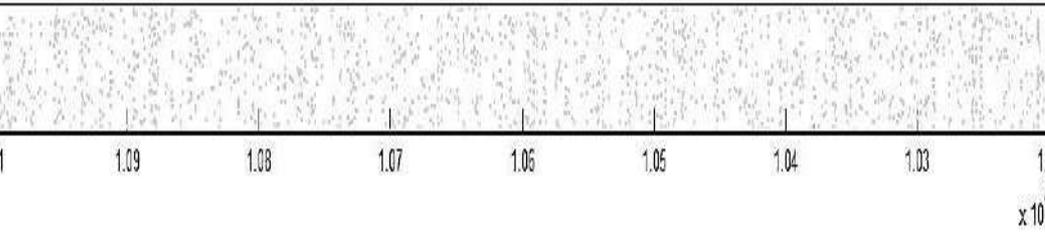
n_{part}	n_x	n_y	p_{grav}	p_{wall}	p	Passos de tempo
71335	340	254065	0,01	0,8	0,1	400000

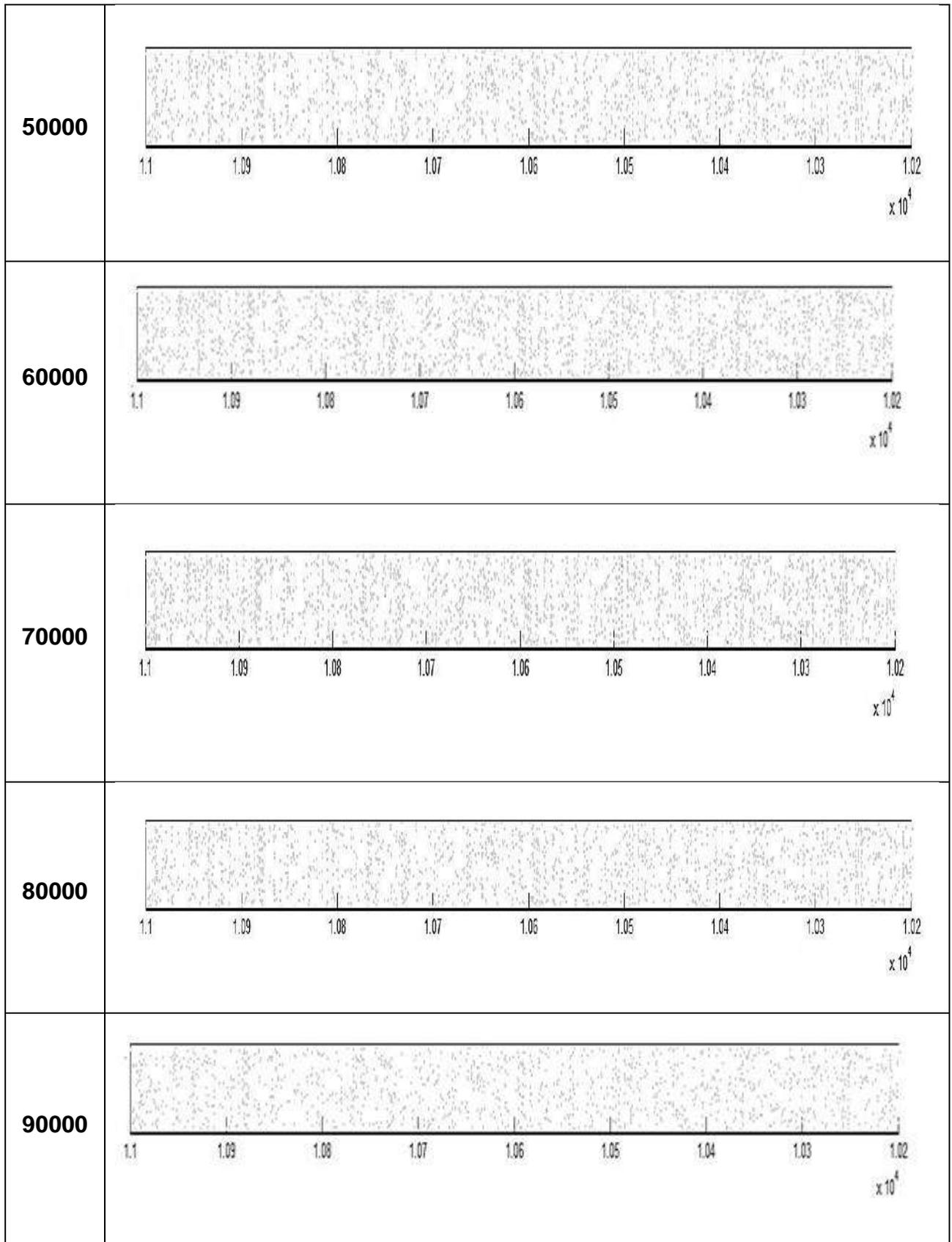
Como já foi mencionado, as funções para descrição das colisões partícula-parede e partícula-partícula são o coração do programa desenvolvido, pois são os grandes responsáveis por modelar o comportamento dinâmico das partículas. Essa conclusão também fica evidente através da revisão bibliográfica feita nesse trabalho, uma vez que os trabalhos analisados destacavam, em geral, a influência dessas colisões sobre o escoamento da suspensão. Quanto maior o contato das partículas com a parede e com outras partículas, maior a perda de carga do sistema, pelo aumento do atrito.

Nesse contexto, verificam-se, na Figura 31, mudanças no padrão de escoamento à medida que o sistema vai progredindo com o tempo discreto. O comprimento n_y é muito extenso e, para viabilizar a visualização do padrão de escoamento neste trabalho, optou-se por destacar, na Figura 28, apenas uma região da tubulação (de $n_y = 10200$ a $n_y = 11000$). No passo de tempo inicial, passo 1, ainda não há aplicação das regras de colisão, o sistema foi inicializado com a alocação aleatória das partículas nas células do *lattice*. O sistema no passo 1 mostra, conseqüentemente, uma distribuição aparentemente mais homogênea das partículas. A partir dessa configuração inicial, a simulação prossegue com as aplicações das regras de colisão, de propagação e de gravidade sobre o sistema modelado.

Dessa forma, podem ser vistos, nos *passos* que se sucedem, a formação de regiões de diferentes concentrações de partículas. Baseado nessa análise, o escoamento aparentemente não apresenta um comportamento linear. A evolução dos *passos* de tempo, pelo que pode ser observado na Figura 31, leva a uma maior concentração das células a partir do *passos* 1 ao *passos* 70000. No entanto, do *passos* 100000 ao *passos* 400000 o sistema volta a apresentar uma suspensão mais diluída. Esse comportamento caracteriza um regime de escoamento em “golfadas”, menos homogêneo e de característica oscilatória.

Na visualização do comportamento do sistema, ele aparentemente não apresenta um efeito de acúmulo de partículas no fundo do tubo. Esse comportamento é bom, significa que o sistema real previsto pelos Nomogramas, que guarda similaridade com o sistema *lattice-gas* (pois escolheu-se os parâmetros para que haja esta similaridade) teoricamente funciona bem. Se houvesse um acúmulo de partículas no fundo poderia haver comprometimento da neutralização dos gases ácidos (o gás ficaria em cima e o sólido embaixo, havendo então pouco contato entre eles).

Passo	ny = 254065
1	
10000	
20000	
30000	
40000	



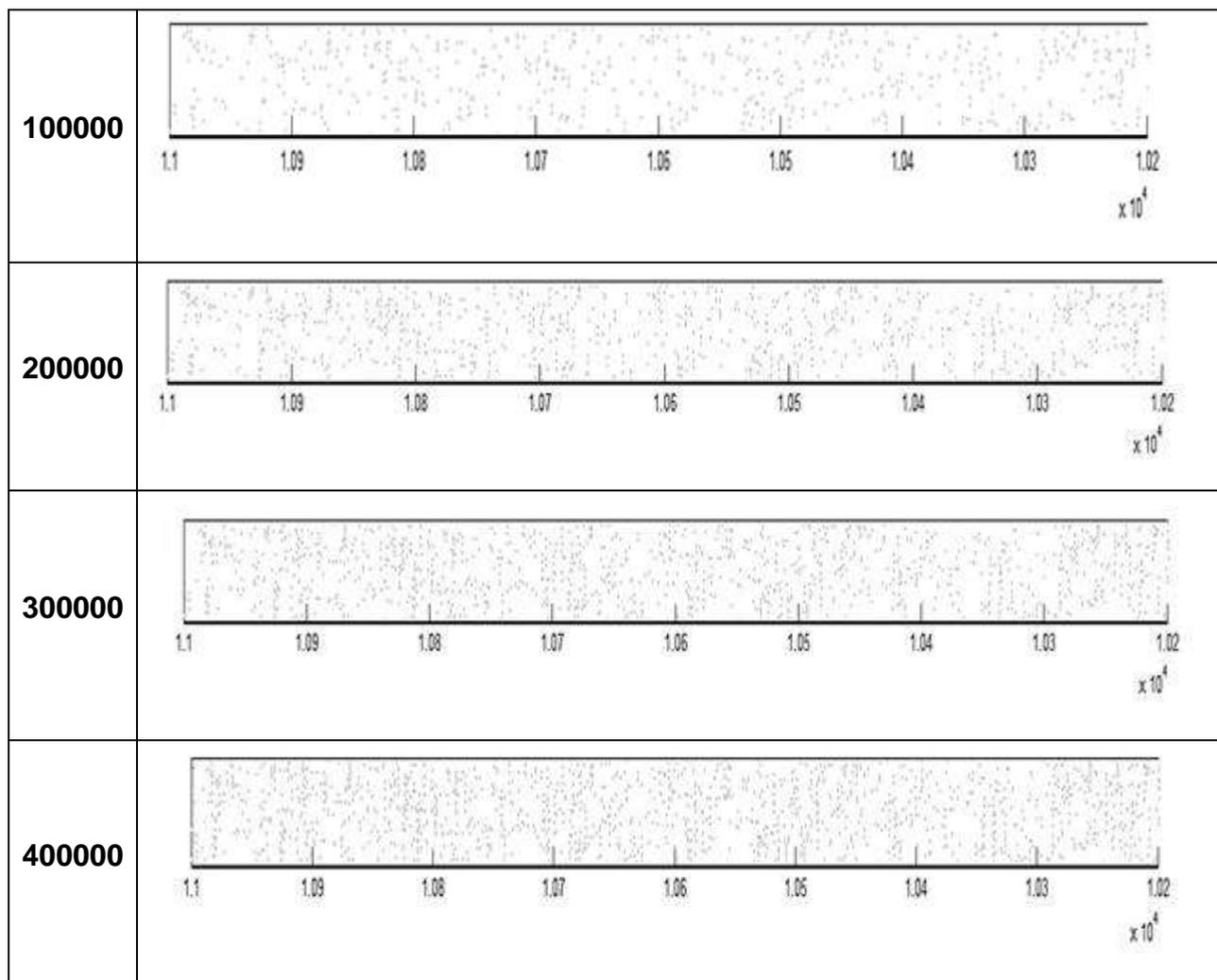


Figura 31 - Visualização da simulação do transporte horizontal de partículas e sua evolução, em passos de tempo selecionados, na seção da tubulação compreendida entre $n_y = 10200$ e $n_y = 11000$

O tempo de simulação do modelo foi cerca de 3 dias em um computador com processador Intel Core i5). Apesar de parecer muito, o *lattice-gas* é muito mais rápido e capaz de simular sistemas muito maiores do que as técnicas citadas no Capítulo 2, seção 2.5, desse trabalho. Mas uma desvantagem do LG é que é um método muito simplificado e não considera sutilezas como turbulência e diferentes dp , por exemplo.

5 CONCLUSÃO

Os problemas de dimensionamento de sistemas pneumáticos usualmente são solucionados sem auxílio de uma sistemática, sendo estes resolvidos com base na experiência profissional do projetista. Todavia, no meio acadêmico existem ferramentas e metodologias formais para solução destes problemas.

As simulações numéricas de modelos para o escoamento sólido-gás, que incorporem os efeitos sofridos pelos sólidos no transporte, poderiam apoiar o projeto e construção de sistemas de transporte pneumático eficientes. No entanto, para que estas simulações complexas sejam factíveis, são necessárias hipóteses fortemente simplificadoras. Com o aumento da disponibilidade de computadores mais rápidos e mais poderosos, os modelos discretos tendem a se tornar muito populares e uma ótima alternativa para simulação desses sistemas.

A metodologia aqui apresentada mostrou-se eficiente na proposta de simulação do padrão de escoamento em uma linha de transmissão pneumática, por meio de um código MATLAB, através da metodologia *lattice-gas*. Verificaram-se uma não homogeneidade na distribuição de partículas ao longo da tubulação, mas não foi verificada sedimentação apreciável das partículas na parte inferior da tubulação. Foi verificado um escoamento da suspensão em “golfadas”, de forma que a concentração de partículas variava com o tempo em uma mesma seção da tubulação.

Neste trabalho, verificou-se também a utilidade das ferramentas de análise dimensional para a comparação do sistema de transporte real ao sistema fictício representado pela simulação adimensional *lattice-gas*. A obtenção dos grupos adimensionais relevantes e da imposição da similaridade entre o sistema real e o *lattice-gas* foi crucial para determinar o valor dos parâmetros a serem utilizados na simulação *lattice-gas*.

Através da ferramenta “Profiler” do Matlab foi possível identificar, no código computacional, rotinas de simulação que estavam demandando muito tempo para serem processadas pelo computador, e a partir disso, foi possível tomar ações que o deixaram significativamente mais rápido.

Nota-se que a ferramenta de visualização do programa, unida a toda a metodologia proposta nesse trabalho mostra-se um recuso útil ao dimensionamento do sistema pneumático de injeção de sólidos para tratamento de gases ácidos que

crece como exigência legal para as indústrias. Sua utilidade está em prever o padrão de escoamento referente a determinados valores dos parâmetros de simulação, e com isto verificar visualmente questões referentes à homogeneidade da suspensão que escoar na tubulação e à possibilidade de sedimentação de partículas dentro desta.

De um modo geral, os objetivos determinados nesse trabalho foram alcançados, sendo que, pode-se propiciar a pesquisadores, engenheiros e projetistas, entre outros, a visualização do padrão de escoamento sem a necessidade de execução de cálculos complexos e do uso de protótipos. No entanto, podem ser apontadas algumas limitações da simulação via *lattice-gas*, como: o tempo computacional extenso para sistemas com grande quantidade de partículas e a inabilidade em considerar descrições melhores das forças de contato partícula-partícula e das colisões partícula-parede, bem como das formas de partículas não esféricas.

Futuramente, pretende-se continuar e expandir este trabalho, com a utilização de outros formatos de tubulação, por exemplo (com o estudo do comportamento das partículas nas curvas da tubulação, onde é maior a perda de carga e possível acúmulo de sedimentos). Também seria possível continuar o trabalho através da avaliação do comportamento de diferentes configurações com sólidos de diferentes densidades e de formato irregular. Acredita-se que a realização de outros estudos abordando os diversos aspectos dos sistemas pneumáticos via *lattice-gas*, aliado à análise dimensional, seria útil para o projeto e simulação de tais sistemas mais rápidos e menos custosos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BELL, B., 2013. **Boiler MACT Impacts Biomass Power**. Biomass Magazine. Page 24-27. Disponível em: <http://www.kbr.com/Newsroom/Publications/Articles/Boiler-MACT-Impacts-Biomass.pdf>

BOOTH, M. S., 2012. **Biomass Energy in Pennsylvania: Implications for Air Quality, Carbon Emissions, and Forests**. Disponível em: http://www.pfpi.net/wp-content/uploads/2012/12/PFPI-PA-Biomass-Energy-Report_12_18_12.pdf

BRUNETTI, F., 2008. **Mecânica dos Fluidos**. 2 ed. rev. Pearson Pretice Hall.

CABREJOS, F. J.; KLINZING, G. E., 1992. **Incipient motion of solid particles in horizontal pneumatic conveying**, Powder Technology,72, P. 51-61. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S003259109285021M>

CHAMBERLAIN, A., 2014. **MACT Regulations Summary: Breaking Down NESHAP & MACT**. ERA Environmental Management Solutions. Disponível em: <http://info.era-environmental.com/blog/bid/39728/MACT-Regulations-Summary-Breaking-Down-NESHAP-MACT-Regulations>

CONAMA, 2006. **Resolução Nº 382**. Disponível em: <http://www.mma.gov.br/port/conama/legiabre.cfm?codlegi=520>

CONAMA, 2011. **Resolução Nº 436**. Disponível em: <http://www.mma.gov.br/port/conama/legiabre.cfm?codlegi=660>

CORTEZ, L. A. B.; LORA, E. E. S.; GÓMEZ, E., O, 2008. **Biomassa para energia**. Editora da Unicamp, Campinas, SP. Disponível em: <http://www.nipe.unicamp.br/2013/docs/publicacoes/inte-biomassa-energia070814.pdf>

COULSON, J. M.; RICHARDSON, J. F.; HARKER, J. H.; BACKHRUST, J. R., 1999. **Coulson and Richardson's Chemical Engineering. - Fluid Flow, Heat Transfer and Mass Transfer**. V.1. SIXTH EDITION. Oxford: Butterworth-Heinemann.

CUNDALL, P.A., 1971. **A computer model for simulating progressive large scale movements in blocky rock systems**. Symposium of the International Society of Rock Mechanics, Vol. 1, Paper II-8.

DEMIRBAS, A., 2005. **Potential applications of renewable energy sources, biomass combustion problems in boiler power systems and combustion related environmental issues**. Progress in Energy and Combustion Science, Volume 31, Issue 2, Pages 171–192. Elsevier. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360128505000055>

DIEHL, S., 2008. **The solids-flux theory – Confirmation and extension by using partial differential equations**. Water Res., v. 42, n. 20, p. 4976-4988.

DOE, 2013. **Summary of EPA Final Rules for Air Toxic Standards for Industrial, Commercial, and Institutional (ICI) Boilers and Process Heaters - U.S. Department of Energy (DOE), Office of Energy Efficiency & Renewable Energy**. Disponível em: http://www.energy.gov/sites/prod/files/2013/11/f4/boiler_mact_article.pdf

FOUST, A. S.; CLUMP, C. W., 1982. **Princípios de operações unitárias**. Editora Guanabara Dois, p.571.

FRISCH, U.; HASSLACHER, B.; POMEAU, Y., 1986. **Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation**. Phys. Rev. Lett., v. 56, n. 14.

GOMES, L. M., 2006. **Análise Experimental sobre velocidade de captura em sistemas de transporte pneumático**. Tese de Mestrado, Universidade Federal do Pará, UFPA, Belém, Pará, Brasil.

GREMONINI, L.; VICENTINI, E., 2008. **Autômatos celulares: Revisão bibliográfica e exemplos de implementações**. Revista Eletrônica. Lato Sensu – Unicentro, Ed. 6.

HARDT, B.; MUNIZ, P.H.P; PEREIRA, W.S., 2003. **Desenvolvimento de Protótipo Transportador Pneumático**. Curso de Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Pará (UFPA).

HUBER, N.; SOMMERFELD, M., 1998. **Modelling and numerical calculation of dilute-phase pneumatic conveying in pipe systems**. Powder Technology 99 page 90-101. Elsevier Science S.A.

IEA, 2012. **Energy Technology Perspectives 2012: Pathways to a Clean Energy System**. Paris: OECD/IEA, 2012. Disponível em: <http://www.iea.org/etp/etp2012/> e <http://pt.slideshare.net/internationalenergyagency/etp-2012-slide-deck>.

JENKINS, B. M.; BAXTER, L. L.; MILES, T. R.; MILES, J. R. T. R., 1998.

Combustion properties of biomass. Fuel Processing Technology, Volume 54, Issues 1–3, Pages 17–46. Elsevier. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378382097000593>

JOSEPH, G.T.; BEACHLER, D.S., 1998. **Dry Scrubbing Systems** - Scrubber Systems Operation Review, Lesson 7. Second Edition. Air Pollution Training Institute (APTI) Course.

KALMAN, H., 2000. **Attrition of powders and granules at various bends during pneumatic conveying.** Powder Technology, volume 112, p. 244-250.

KLINZING, G. E.; MARCUS, R. D.; RIZK, F; LEUNG, L. S., 1997. **Pneumatic Conveying of Solids.** Chapman & Hill, 2ª Edição.

KONG, Y.; DAVIDSON, H., 2010. **Dry Sorbent Injection of sodium sorbents for SO₂, HCl and mercury mitigation.** Solvay Chemicals Inc. Disponível em: <http://www.solvair.us/EN/resourcematierial>

KONRAD, K., **Dense-Phase Pneumatic Conveying: A Review.** Powder Technology, Vol.49, 1-35. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/003259108685001X>

LAKSHMI, M. R., 1989. **Cellular automaton fluids - a review.** Sadhana, v. 14, n. 3, p. 133-172.

MACEDONIA, J., 2012. Summary of EPA Power Sector Regulation: Air toxic standards. Bipartisan Policy Center.

MILLS, D. 2004. **Pneumatic Conveying Design Guide.** Second edition. Elsevier Butterworth-Heinemann.

MINISTÉRIO DE MINAS E ENERGIA; EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA, 2007. **Plano Nacional de Energia 2030. Geração Termelétrica - Biomassa.** Disponível em: http://www.epe.gov.br/PNE/20080512_8.pdf

MORAES, A. L. S.; 2007. **Um Estudo sobre a Aplicação de Autômatos Celulares na Simulação de Fenômenos Ambientais e Aspectos Dinâmicos.** Universidade Católica de Pelotas - Escola de Informática.

OTTJES, J.A., 1978. **Digital simulation of pneumatic particle transport,** Chemical Engineering Science Volume 33, Issue 6, 1978, Pages 783–786. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/000925097880058X>

PERRY, R.E.; GREEN, D., 1999. **Handling of Bulk Solids na Packaging of Solids and Liquids.** Perry's Chemical Engineering Handbook.

PÖSCHEL, T., SCHWAGER, T., 2005. **Computational Granular Dynamics**. Springer-Verlag, 1a ed.

RAO, K. K.; NOTT, P. R., 2008. **An introduction to granular flow**. Cambridge University Press.

RENDEIRO, G.; NOGUEIRA, M. F. M., 2008. **Combustão e Gasificação de Biomassa Sólida- Soluções Energéticas para a Amazônia**. - Ministério de Minas e Energia, 1ª edição. Disponível em: http://luzparatodos.mme.gov.br/luzparatodos/downloads/Solucoes_Energeticas_para_a_Amazonia_Biomassa.pdf

SAIDURA, R.; ABDELAZIZ, E. A.; DEMIRBAS, A.; HOSSAINA, M. S.; MEKHILEF, S., 2011. **A review on biomass as a fuel for boilers**. Renewable and Sustainable Energy Reviews, Volume 15, Issue 5, Pages 2262–2289. Elsevier. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032111000578>

SALMAN, A. D.; HOUNSLOW, M. J.; VERBA, A., 2002. **Particle fragmentation in dilute phase pneumatic conveying**. Powder Technology, Volume 126, P. 109-115.

SCHANTZ, M.D.; SEWELL, M., 2013. **The Growth of Dry Sorbent Injection (DSI) and the impact on Coal Combustion Residue**. 2013 World of Coal Ash (WOCA) Conference. Disponível em: <http://www.worldofcoalah.org/2013/ashpdf/a013-Schantz-2013.pdf>

SENIOR, C., 2013. **Dry Sorbent Injection for SO₃ and MATS Application**. Air Pollution Control. ADA-ES Inc. Disponível em: <http://www.adaes.com/library-resources/dry-sorbent-injection-for-so3-and-mats/>

SOLVAY CHEMICALS, 2005. **Trona use in Dry Sodium Injection**. Technical publication. Disponível em: www.solvaychemicals.us

SOMMERFELD, M., 1990. **Numerical simulation of the particle dispersion inturbulent flow: The importance of particle lift forces and particle/wall collision models, in numerical methods for multiphase flows**. ASME, Vol. 91, agp. 11-18.

SOMMERFELD, M., 2003. **Analysis of collision effects for turbulent gas-particle flow in a horizontal channel: Part I. Particle transport**. International Journal of Multiphase Flow, 29, 675–699

SOMMERFELD, M.; HUBER, N., 1998. **Modelling and numerical calculation**

of dilute-phase pneumatic conveying in pipe systems. Powder Technology, 99, 90-101.

TATA CHEMICALS EUROPE, 2012. **Sodium Bicarbonate for Flue Gas Treatment.** Documento informativo.
http://www.tatachemicals.com/europe/products/pdf/briskarb/information_briskarb_brochure07.pdf

THIEL, M., 2012. **Can dry sorbent injection technology really work for HCl for MATS compliance?.** Nol-Tec Systems, Inc. Disponível em: *Air Pollution Control* em www.APCmag.net

TRIVELATO, G. C., 2003. **Técnicas de Modelagem e Simulação de Sistemas Dinâmicos.** INPE: Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - Ministério da Ciência e Tecnologia. Disponível em: <http://mtc-m05.sid.inpe.br/col/sid.inpe.br/jeferson/2003/07.08.08.27/doc/INPE%20-%209665%20-%20NTC.pdf>

TSUJI, Y.; MORIKAWA, Y., 1978. **Computer Simulation for Pneumatic Transport in Pipes with Bends.** 4th Int. Conf. on Pneumatic Transport of Solids in Pipes, Vol. 1.

TSUJI, Y.; MORIKAWA, Y.; TANAKA, T.; NAKATSUKASA, N.; NAKATANI, M., 1987. **Numerical simulation of gas-solid two-phase flow in a two-dimensional horizontal channel.** International Journal of Multiphase Flow, Vol.13, 5, Pag 671–684

TSUJI, Y.; SHENA, N.Y.; MORIKAWA, Y., 1991. **Lagrangian simulation of dilute gas-solid flows in a horizontal pipe.** Advanced Powder Technology, Volume 2, Issue 1, 1991, Pages 63–81.

TSUJI, Y.; TANAKA, T.; ISHIDA, T., 1992. **Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe.** Powder Technology, Volume 71, Issue 3, Pages 239–250.

VAN LOO, S.; KOPPEJAN, J., 2008. **The Handbook of Biomass Combustion and Co-firing.** Eds: S. Van Loo, J. Koppenjan. Earthscan.

VILLENEUVE, J.; PALACIOS, J. H.; SAVOIE, P.; GODBOUT, S., 2012. **A critical review of emission standards and regulations regarding biomass combustion in small scale units (<3 MW).** Bioresource Technology, 111, 1–11. Elsevier. Disponível em:

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852412003124>

WALAS, S.M., 1990. **Chemical Process Equipment – Selection and Design**. Butterworth – Heinemann Series.

WILLIAMS, A.; JONES, J.M.; MA, L.; POURKASHANIAN, M., 2012. **Pollutants from the combustion of solid biomass fuels**. - Progress in Energy and Combustion Science, 38, 113-137.

WOLF, D., 2011. **An Overview of the EPA's Industrial Boiler MACT Rule**. Burns & McDonnell. Disponível em: http://www.burnsmcd.com/Resource_/PressRelease/1290/FileUpload/White-Paper-Boiler-MACT-021312.pdf

WOLF-GLADROW, D. A., 2005. **Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models - An Introduction**. Springer.

WOLFRAM, S. A., 2002. **New Kind of Science**. Champaign: Wolfram Media.

WOLFRAM, S., 1986. **Cellular Automaton Fluids: Basic Theory**. J. Stat. Phys, v. 45, n. p. 471- 526.

WOLFRAM, S., 1994. **Cellular Automata and Complexity**. Addison Wesley, Reading. Massachusetts, pp 596.

WU, C.; KHANG, S.; KEENER, T.C.; LEE, S., 2004 . **A model for dry sodium bicarbonate duct injection flue gas desulfurization**. Advances in Environmental Research, 8, 655–666. Elsevier Science.

GLOSSÁRIO

PCS	Poder calorífico superior (PCS) é a quantidade de calor liberado pela queima (combustão), de modo que a água proveniente desta queima esteja em estado líquido (volume constante).
VCL	Valor calorífico líquido (VCL) é a quantidade de calor liberado pela queima, de modo que a água proveniente da queima esteja em estado gasoso (volume variável).
Nomograma	Diagrama que tem por finalidade solucionar cálculos e problemas, de forma gráfica, partindo da relação entre duas ou mais variáveis representada por um sistema de linhas e pontos.

APÊNDICE 1

PROGRAMA PRINCIPAL “simul2”

```
%Karoline Coelho:
%Programa principal: Simulação Lattice gás transporte
%gás-sólido tubo horizontal + condições de contorno

%Apagando os valores das variáveis na memória
clear all, close all, clc

%Dados de entrada

nx = 340; %número de vértices na direção x

ny = 254065; % números de vértices na direção y

p = 1.0; %probabilidade associada a colisões entre partículas

pgrav = 0.01; %probabilidade de queda de uma partícula parada

pwall = 0.8; % probabilidade associada a partículas colidindo com a parede
           %irem para cima

npart = 71335; %Número de partículas inicial no sistema

tmax = 400000; %número máximo de passos de tempo

tfig = 10000; %intervalo em que é gerada 1 figura

passo = 1;

%Criar visualização da distribuição aleatoria das particulas:

estado_celula = Aleatorio(nx,ny,npart);
[linha,coluna,valor] = find(estado_celula);
posicoes_particulas_visualiza = [linha,coluna,valor];
dimensoes_matriz = size(posicoes_particulas_visualiza);
N_linhas_posicoes_particulas_visualiza = dimensoes_matriz(1);
dlmwrite(['matriz_tempo' int2str(passo) '.txt'], [nx 0 0;ny 0
0;N_linhas_posicoes_particulas_visualiza 0 0;tfig 0 0;tmax 0
0;posicoes_particulas_visualiza], ' ');

% Aplicar as regras de gravidade, propagação, colisão para o tempo
%variando de 1 a tmax:

for passo=2:tmax

    passo

    %disp('inicio')

%(2) == Chamar a função gravidade ==
%disp('gravidade')
[estado_celula] = gravidade_horiz(estado_celula, pgrav, nx,ny);
```

```

%(3) == Chamar a função propaga ==
%disp('propaga')
[estado_celula] = propaga_novo(estado_celula,nx,ny);

%Função contorno periódico
%disp('ccp')
[estado_celula]=ccp_meio2(estado_celula,nx,ny);

%(4) == Chamar a função colisao_parede ==
%disp('colisao parede')
[estado_celula] = colisao_parede_ccp2(estado_celula,pwall,nx,ny);

%(5) == Chamar a função colisao_2 ==
%disp('colisao partículas')
[estado_celula] = colisao_nova2(estado_celula, p, nx,ny);

estado_celula;

% Criar um arquivo com a matriz do novo arranjo das partículas
%devido as colisões

if mod(passo, tfig) == 0

    [linha,coluna,valor] = find(estado_celula);
    posicoes_particulas_visualiza = [linha,coluna,valor];
    dimensoes_matriz = size(posicoes_particulas_visualiza);
    N_linhas_posicoes_particulas_visualiza = dimensoes_matriz(1);
    dlmwrite(['matriz_tempo' int2str(passo) '.txt'], [nx 0 0;ny 0
0;N_linhas_posicoes_particulas_visualiza 0 0;tfig 0 0;tmax 0
0;posicoes_particulas_visualiza], ' ');

    %vetor que contém as localizações na tubulação onde se mede o perfil
    %de concentração de partículas
    for i=[1, round(ny/4), round(ny/2), round(3*ny/4), ny];

        perfil_conc_part_abcissa = [];
        perfil_conc_part_ordenada = [];

        for j=1:nx

            binario = dec2bin(estado_celula(i,j));
            vetor = strfind(binario,'1');
            numero_particulas(i,j)=size(vetor,2);
            y = ny - i;                %Convertendo de índice da matriz para
                                     %coordenada y
            x = j - 1 - floor(y/2);    %Convertendo de índice da matriz para
                                     %coordenada x

            y_cart = y*cos(pi/6);      %Colocar regras de conversão
            x_cart = x+(y*cos(pi/3)) ;

            perfil_conc_part_abcissa = [perfil_conc_part_abcissa
numero_particulas(i,j)];
            perfil_conc_part_ordenada = [perfil_conc_part_ordenada x cart];

```

```
end

plot(perfil_conc_part_abcissa,perfil_conc_part_ordenada,'*','LineWidth',2);
xlabel('Número de partículas');
ylabel('Posição vertical na tubulação');
hold all

end

legend('Posição 1','Posição 2','Posição 3','Posição 4','Posição 5')

%Nome do arquivo com a gráfico:

nome_arquivo = ['concentracao_tempo_' int2str(passo)];
print('-dtiff','-r300',nome_arquivo)

close

end

end
```

APÊNDICE 2

PROGRAMA “visualiza”

```
%Karoline Coelho:
%Programa de Visualização

clc
clear all

%Dados de entrada

tamanho_marcoador = 5;

%Definindo as cores das células para cada número de partículas
cor1 = [0.84 0.84 0.84]; %Cor das células com 1 partícula
cor2 = [0.70 0.70 0.70]; %Cor das células com 2 partícula
cor3 = [0.56 0.56 0.56]; %Cor das células com 3 partícula
cor4 = [0.42 0.42 0.42]; %Cor das células com 4 partícula
cor5 = [0.28 0.28 0.28]; %Cor das células com 5 partícula
cor6 = [0.14 0.14 0.14]; %Cor das células com 6 partícula
cor7 = [0 0 0]; %Cor das células com 7 partícula

%a distribuição aleatória gera um arquivo inicial com matriz

%um número tmax/tfig de arquivos com matrizes será gerado fruto das regras
%de gravidade, propagação, colisão para o tempo variando de 1 a tmax

%Matrizes utilizadas para fazer o gráfico do tipo dispersão ("scatter")

X1 = []; %Coordenadas x das células com 1 partícula
Y1 = []; %Coordenadas y das células com 1 partícula

X2 = []; %Coordenadas x das células com 2 partículas
Y2 = []; %Coordenadas y das células com 2 partículas

X3 = []; %Coordenadas x das células com 3 partículas
Y3 = []; %Coordenadas y das células com 3 partículas

X4 = []; %Coordenadas x das células com 4 partículas
Y4 = []; %Coordenadas y das células com 4 partículas

X5 = []; %Coordenadas x das células com 5 partículas
Y5 = []; %Coordenadas y das células com 5 partículas

X6 = []; %Coordenadas x das células com 6 partículas
Y6 = []; %Coordenadas y das células com 6 partículas

X7 = []; %Coordenadas x das células com 7 partículas
Y7 = []; %Coordenadas y das células com 7 partículas
```

```
%Leitura de nx, ny, tfig e tmax(só precisa ler no primeiro arquivo gerado):

nx = dlmread(['matriz_tempo' int2str(1) '.txt'], ' ', [0,0, 0,0]);
ny = dlmread(['matriz_tempo' int2str(1) '.txt'], ' ', [1,0, 1,0]);
dlmread(['matriz_tempo' int2str(1) '.txt'], ' ', [3,0, 3,0]);
dlmread(['matriz_tempo' int2str(1) '.txt'], ' ', [4,0, 4,0]);

for k = [1, tfig: +tfig: (floor(tmax/tfig)*tfig)] %loop dos arquivos, em
cada tempo em que deve ser gerada 1 figura
    disp(k)

    %Cada arquivo txt gerará uma figura

    N_linhas_posicoes_particulas_visualiza = dlmread(['matriz_tempo'
int2str(k) '.txt'], ' ', [2,0, 2,0]);

    posicoes_particulas_visualiza = dlmread(['matriz_tempo' int2str(k)
'.txt'], ' ', 5,0);

for linha = 1:N_linhas_posicoes_particulas_visualiza    %loop de leitura de
cada arquivo

    i = posicoes_particulas_visualiza(linha,1);    %Recuperando as
posições originais das particulas da matriz estado_celula (prog. principal)
    j = posicoes_particulas_visualiza(linha,2);

    binario = dec2bin(posicoes_particulas_visualiza(linha,3));
    vetor = strfind(binario,'1');
    numero_particulas(i,j)=size(vetor,2);

    y = ny - i;    %Convertendo de índice da matriz para
coordenada y
    x = j - 1 - floor(y/2);    %Convertendo de índice da matriz para
coordenada x

    y_cart = y*cos(pi/6);    %Colocar regras de conversão
    x_cart = x+(y*cos(pi/3)) ;

    if numero_particulas(i,j)== 1
        X1=[X1,x_cart];
        Y1=[Y1,y_cart];
    end;

    if numero_particulas(i,j)== 2
        X2=[X2,x_cart];
        Y2=[Y2,y_cart];
    end;

    if numero_particulas(i,j)== 3
        X3=[X3,x_cart];
        Y3=[Y3,y_cart];
    end;

    if numero_particulas(i,j)== 4
        X4=[X4,x_cart];
        Y4=[Y4,y_cart];
    end;
end;
```

```
    if numero_particulas(i,j) == 5
        X5=[X5,x_cart];
        Y5=[Y5,y_cart];
    end;

    if numero_particulas(i,j) == 6
        X6=[X6,x_cart];
        Y6=[Y6,y_cart];
    end;

    if numero_particulas(i,j) == 7
        X7=[X7,x_cart];
        Y7=[Y7,y_cart];
    end;

end

% Criação do Gráfico

scnsize = get(0, 'ScreenSize');
h = figure('Color', [1 1 1]);
set(h, 'OuterPosition', scnsize);

scatter(X1,Y1,tamanho_marcador,cor1,'s','filled')
axis off
hold on

scatter(X2,Y2,tamanho_marcador,cor2,'s','filled')
axis off
hold on

scatter(X3,Y3,tamanho_marcador,cor3,'s','filled')
axis off
hold on

scatter(X4,Y4,tamanho_marcador,cor4,'s','filled')
axis off
hold on

scatter(X5,Y5,tamanho_marcador,cor5,'s','filled')
axis off
hold on

scatter(X6,Y6,tamanho_marcador,cor6,'s','filled')
axis off
hold on

scatter(X7,Y7,tamanho_marcador,cor7,'s','filled')
axis off
hold on

%Delimitando os limites da tubulação:

axis on
axis equal
axis([-0.5 nx+0.5 -0.5 ny*cos(pi/6)+0.5])

%Desenhando as paredes da proveta:

line([-0.5 -0.5], [-0.5 ny*cos(pi/6)+0.5], 'Color', 'k', 'LineWidth', 2)
%esquerda
```

```
line( [-0.5 nx+0.5], [-0.5 -0.5], 'Color','k','LineWidth',2)           %fundo
line( [nx+0.5 nx+0.5], [-0.5 ny*cos(pi/6)+0.5], 'Color','k','LineWidth',2)
%direita
line( [-0.5 nx+0.5], [ny*cos(pi/6)+0.5
ny*cos(pi/6)+0.5], 'Color','k','LineWidth',1)           %topo
figura = getframe;
%Nome do arquivo com a figura:
nome_arquivo = ['fig_tempo' int2str(k)];
set(gcf, 'PaperPositionMode', 'auto');
saveas(gcf, nome_arquivo, 'fig')
close
end
```