

ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA



TRABALHO DE FORMATURA

MODELAGEM DA COMBUSTÃO DE PARTÍCULAS SÓLIDAS

ALUNO: RODRIGO DE SOUSA BORGES

ORIENTADOR: EURYALE DE JESUS ZERBINI
PROFESSOR DOUTOR DO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

2001

Índice

Agradecimento	III
Resumo	IV
Lista de Símbolos	V
1. Introdução	01
2. Metas	02
3. Considerações Iniciais	02
4. Apresentação Esquemática do Modelo	04
5. Análise Geral	06
6. Modelagem Simples – estágio 1	10
7. Modelagem Composta – estágio 2	15
7.1 Parte 1: Conservação das Espécies Químicas	16
7.2 Parte 2: Conservação de Energia	22
7.3 Comportamento dos gases inertes	26
8. Modelagem Composta – estágio 3	28
8.1 Parte 1: Conservação das Espécies Químicas	29
8.2 Parte 2: Conservação de Energia	34
8.3 Comportamento dos gases inertes	39
9. O modelo	40
10. Programação do modelo	43
11. Comentários finais	47
12. Bibliografia	49
13. Anexo	50

Agradecimento

O autor deseja agradecer o professor orientador deste trabalho, E. Zerbini, por toda a assistência prestada. A motivação para a realização desta modelagem deve-se exclusivamente ao acesso ao conhecimento e experiência deste professor. Dada a dificuldade do assunto, o desenvolvimento do tema mostrou-se essencialmente dependente das muitas conversas e do material por ele cedido.

Resumo

Modelagem da combustão de uma partícula sólida, mais especificamente, uma partícula de carvão. Esta restrição foi necessária para viabilizar a análise, por se tratar de um trabalho de graduação.

O modelo foi construído baseado nas teorias de conservação das espécies químicas e conservação da energia (1ª Lei da Termodinâmica) paralelamente a informações empíricas. Realizou-se um desenvolvimento transparente, com a constante preocupação de especificar todas as hipóteses simplificadoras e restrições consideradas.

Não foram utilizadas expressões empíricas na modelagem. Na realidade, o desenvolvimento tem enfoque teórico e a aplicação de dados experimentais está relacionada às considerações, hipóteses simplificadoras e principalmente na divisão do fenômeno estudado em estágios.

Desta forma, o modelo é composto por três estágios de combustão, pelos quais o processo de queima poderá passar ou não. A “história da partícula” dependerá das condições impostas ao sistema.

O modelo resultante deste trabalho é certamente limitado, dada a complexidade do assunto, mas poderá ser útil em uma análise inicial sobre parâmetros importantes para o projeto do processo de combustão.

Lista de Símbolos

G	fluxo de massa – vazão por unidade de área
m	concentração em massa de um determinado componente
r	distância radial em relação ao centro da partícula
α	relação entre a massa de oxidante e a massa de combustível consumidos na superfície da partícula
c_p	calor específico médio da mistura gasosa
T	temperatura
h	entalpia
h_f^0	entalpia de formação
Q	quantidade de calor transferida
D	difusividade de massa – valor médio para a mistura gasosa
ρ	densidade média da mistura gasosa
k	condutividade média da mistura gasosa
ε_i	energia interna
ε_c	energia cinética
ε_p	energia potencial
W	trabalho
$\dot{m}$	vazão em massa

Símbolos sub-escritos

0	superfície da partícula sólida
f	interface de reação da mistura gasosa – “chama”
∞	vizinhança, arredores da partícula sólida
TOT	total ou resultante

1. Introdução

Os primeiros registros científicos com resultados de estudos sobre a combustão, foram realizados para solucionar o problema da armazenagem de carvão, e são atribuídos a N. Semenov. Assim, por volta do ano 1920, começavam os primeiros equacionamentos, os quais relacionavam, com abordagem bastante simplificada, a cinética química do volume de carvão armazenado e sua área sujeita a transferência de calor.

Historicamente, os avanços no conhecimento do fenômeno de combustão tiveram bastante relação com os desenvolvimentos tecnológicos no campo bélico e também no setor industrial. Cada vez mais as indústrias estão empenhadas em reduzir custos e índices de poluentes, elevar a eficiência dos processos e garantir a qualidade dos produtos exigida pelo mercado consumidor. Como o processo de combustão está amplamente presente na atividade industrial, os investimentos visando o seu aprimoramento são cada vez maiores. Além disso, o quadro de combustíveis e correspondentes preços estão sempre sofrendo alterações que conseqüentemente causam uma busca constante de alternativas para viabilizar e otimizar a substituição de combustíveis em processos.

Dentro do tema “Combustão”, entre os possíveis estados físicos do combustível, a combustão de partículas sólidas é o assunto menos conhecido e mais aberto a aprimoramentos. A exploração deste campo é uma atividade atual, não existindo um modelo teórico acabado, mundialmente aceito e consagrado.

Na realidade, diversos modelos são utilizados atualmente para simulações, dos quais, talvez o mais confiável seja o criado pelo professor D. B. Spalding. Neste modelo, ele inseriu coeficientes experimentais nas equações e criou adimensionais, conseguindo assim, reduzir toda a complexidade matemática do modelo teórico inicial à resolução de uma equação quadrática, ou seja, obteve uma solução analítica.

A motivação para a realização deste trabalho é realmente analisar um assunto complexo relativo a disciplinas como termodinâmica, mecânica dos fluidos, transferência de calor e massa, e desta forma ganhar conhecimentos que contribuirão para uma melhor atuação como engenheiro, nos processos industriais de combustão.

2. Metas

O objetivo deste trabalho é construir um modelo para combustão de partículas sólidas. Um modelo que permita simular a história da combustão da partícula, acompanhando a queima, até a extinção da partícula. Obtendo assim, a cada intervalo de tempo, o perfil de temperatura e as concentrações dos componentes gasosos na região entre a superfície e a vizinhança da partícula. Ou seja, as variações de concentração e temperatura em função do raio com origem no centro da partícula sólida. O resultado final que o modelo deve ser capaz de apresentar através de simulação é o tempo total de queima.

É importante esclarecer que não há a pretensão de construir um modelo que consiga resultados precisos comparados a dados experimentais. Na realidade pretende-se obter um modelo que contribua para uma análise inicial da combustão de partículas sólidas, fornecendo elementos que ajudem no projeto do processo de combustão, indicando principalmente os procedimentos e cuidados principais que devem ser tratados para garantir a queima desejada.

Um exemplo de resultado expressivo é a relação entre a dimensão da partícula de combustível sólido e o seu tempo de queima. Esta análise é muito importante, pois o custo operacional da redução dimensional da partícula é mais elevado quanto menor for a partícula.

3. Considerações Iniciais

Por ser um assunto muito amplo e complexo, a modelagem será restrita a combustão de uma partícula de carvão. Foi escolhido o carvão, pois sua composição é simples, suas propriedades são relativamente bem conhecidas e por não possuir muitos voláteis.

As primeiras hipóteses a serem feitas são:

- combustível: carvão pulverizado com simetria esférica;
- combustão completa, apenas CO_2 como produto final;
- nitrogênio representando os gases inertes.

O desenvolvimento do modelo proposto terá uma abordagem elementar, ou seja, não será considerado a nuvem de partículas sólidas sofrendo reações de combustão e conseqüentemente não será dado enfoque a interação entre as partículas. O que corresponde a consideração de distância muito grande entre elas.

Como primeiro contato com o sistema físico estudado, será apresentado, segundo um enfoque elementar, a queima de uma partícula de carvão sob condições reais de combustão em fornos de cimento. Esta análise que traz conhecimento prático sobre o tema, faz parte de um artigo publicado na revista World Cement (Abril / 2000), escrito pelo professor Clemente Greco.

A combustão da partícula de carvão foi dividida em 4 estágios, de acordo com sua temperatura e grau de decomposição. A fig. 1, a seguir, representa essa abordagem.

1º estágio: (início da combustão)

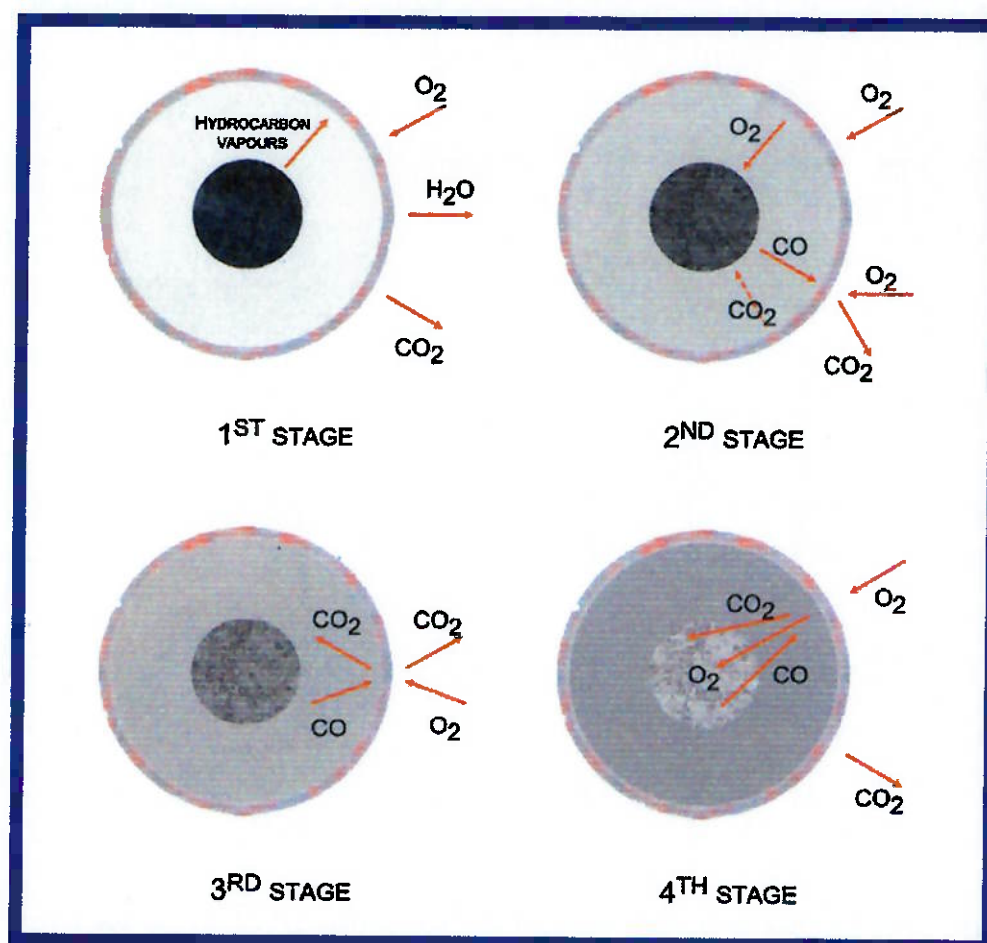
Aquecimento, secagem e pirolise das partículas, produzindo vapores hidrocarbonetos, mantidos em uma camada que envolve a partícula. Não há reação na superfície da partícula, mas somente dentro da fase gasosa (formação de CO_2 e H_2O).

Os componentes voláteis são predominantemente consumidos neste estágio.

2º estágio: ($T < 1300^\circ\text{C}$)

Em uma interface externa a partícula ocorre a combustão de CO: $\text{CO} + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$

Este CO é produto da reação que ocorre na superfície da partícula: $\text{C} + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}$



3º estágio: ($T > 1300^\circ\text{C}$)

Já existe a reação na interface externa a partícula, onde CO é queimado. Neste estágio há uma baixa concentração de O_2 entre a partícula e esta interface de reação, assim o oxidante da partícula não é mais o O_2 , mas o CO_2 . Desta forma a combustão de carbono (C) na superfície da partícula ocorre segundo a reação: $\text{C} + \text{CO}_2 \rightarrow 2 \text{CO}$

4º estágio: (final da combustão)

Devido a redução da taxa de reação, há, entre a partícula e a interface de reação, baixa concentração de CO e elevada concentração de O_2 , de tal forma que os oxidantes da partícula são CO_2 e O_2 . Portanto a combustão do carbono na superfície da partícula ocorre segundo as duas reações: $\text{C} + \text{CO}_2 \rightarrow 2 \text{CO}$ e $\text{C} + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}$.

No presente trabalho, o estágio de queima de voláteis não será tratado. Ainda não existe um modelo satisfatório para a volatilização do carvão. Além disso, o processo de vaporização da umidade da partícula também não será tratado. Resumindo, o estudo terá como combustível uma partícula de carbono, e o carbono será considerado como não volátil.

A presença de cinzas dificulta a difusão de oxigênio até o carvão, porém será desprezada, sendo outra deficiência do modelo.

Finalmente, a porosidade da partícula sólida também não será incluída nesta modelagem, mesmo sabendo da sua importância como propriedade variável com o tempo de queima e necessária na determinação da área superficial real da partícula.

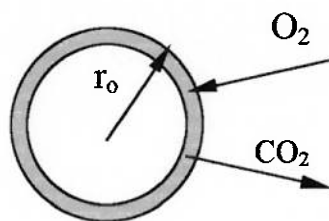
4. Apresentação esquemática do modelo

Após todas estas observações quanto às hipóteses simplificadoras e comportamento real do sistema, determinou-se a divisão da modelagem em três estágios. Estes estágios acompanham o comportamento da partícula a medida que o processo de combustão vai avançando, e o limite de um estágio para outro será inicialmente uma temperatura adotada segundo dados experimentais. Este limite poderia ser temperatura e concentração de determinado componente.

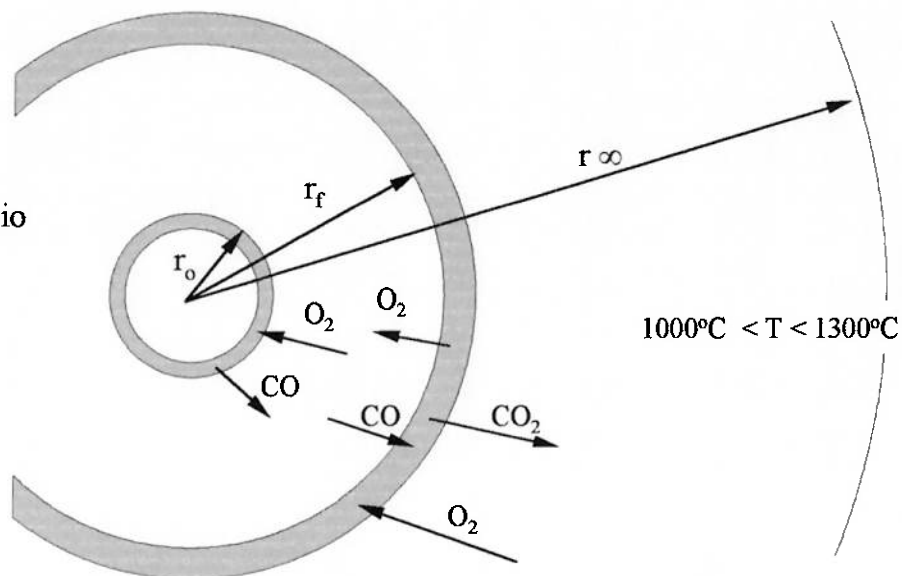
Desta forma, será apresentado abaixo um esquema do modelo de combustão a ser desenvolvido neste trabalho:

MODELAGEM DA COMBUSTÃO DE PARTÍCULAS SÓLIDAS

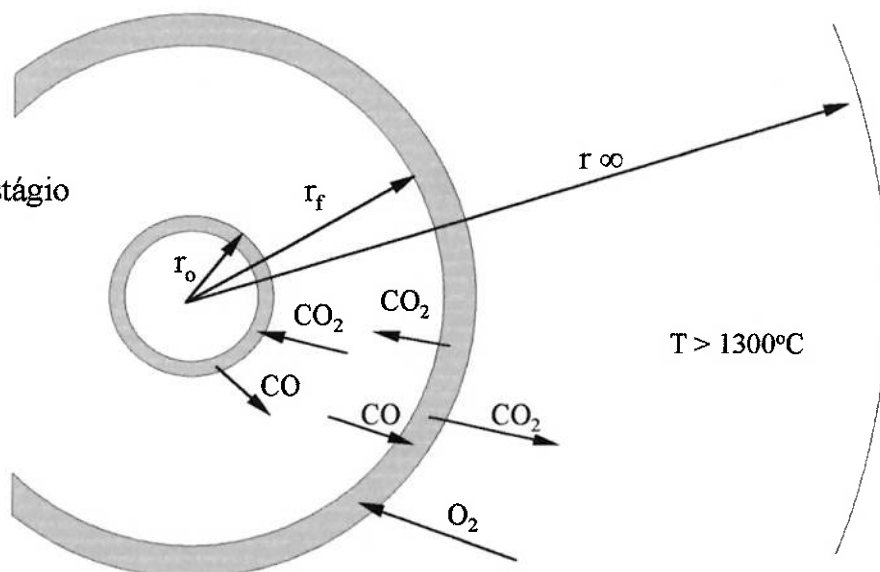
1º Estágio

 $T < 1000^\circ\text{C}$

2º Estágio

 $1000^\circ\text{C} < T < 1300^\circ\text{C}$

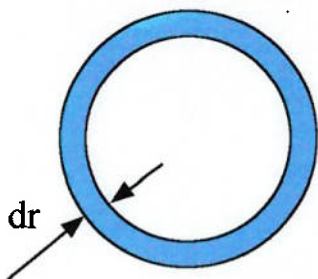
3º Estágio

 $T > 1300^\circ\text{C}$

O 1º estágio considera a presença de apenas uma reação importante para o processo de combustão da partícula. Sendo que esta reação ocorre na superfície da partícula.

O 2º e o 3º estágio considera importante duas reações químicas, o fenômeno de combustão é composto por duas regiões, uma na superfície da partícula e outra numa interface de reação da mistura gasosa onde o monóxido de carbono é queimado.

5. Análise Geral

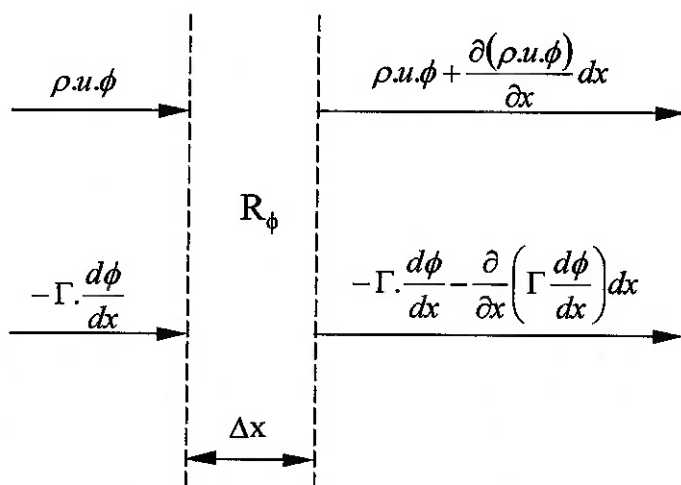


Para iniciar a modelagem será realizado o balanço de massa e de energia em um volume de controle do processo, o que é indispensável para o entendimento do que está fisicamente ocorrendo no fenômeno.

Porém, a realização desse balanço em um volume de controle esférico traz a dificuldade adicional da variação da área da superfície de controle em função do raio.

Para facilitar, o balanço será inicialmente desenvolvido para um volume com superfície de controle constante. Esta medida não trará prejuízo algum para o resultado a ser utilizado.

A seguir o desenvolvimento será iniciado:



$$\Gamma = D\rho$$

ρ = densidade

u = velocidade

D = difusividade

No esquema, ϕ é propriedade intensiva e R_ϕ é a fonte de ϕ no volume de controle.

Balanço (fluxos por unidade de área):

$$\rho u \phi - \Gamma \frac{d\phi}{dx} + R_\phi dx - \rho u \phi - \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) dx + \Gamma \frac{d\phi}{dx} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) dx = \frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi dx)$$

$$R_\phi - \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) = \frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi)$$

Continuidade: como no caso considerado $\frac{dA}{dx} = 0 \Rightarrow \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0$

$$\rho u = \text{vazão em massa por unidade de área} = G_{TOT}$$

$$G_{TOT} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) = R_\phi - \frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) \quad (1)$$

Analisando esta última equação, deve-se destacar a presença do termo referente a fonte de ϕ , representado em equações que descrevem a conservação das espécies químicas e da energia, como a taxa de reação. O valor deste termo normalmente não é conhecido, e portanto uma alternativa é manipular as equações de balanço para obter equações do balanço de propriedades ϕ que não contenham termos R_ϕ .

Se a equação de balanço de um certo ϕ não apresenta o termo de geração de ϕ , este certo ϕ é uma variável conservativa ou propriedade conservada no fenômeno.

Conservação das espécies químicas:

Consideração: Regime Permanente.

Combustível:
$$G_{TOT} \cdot \frac{dm_{fuel}}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\Gamma_{fuel} \cdot \frac{dm_{fuel}}{dx} \right) = R_{fuel} \quad (2)$$

Oxidante:
$$G_{TOT} \cdot \frac{dm_{ox}}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\Gamma_{ox} \cdot \frac{dm_{ox}}{dx} \right) = R_{ox} \quad (3)$$

m = concentração em massa

Reação química simples: combustível + oxidante $\rightarrow$ produto

$$1 \text{ kg} \quad \alpha \text{ kg} \quad (1 + \alpha) \text{ kg}$$

Assim: $R_{ox} = \alpha \cdot R_{fuel}$ (4)

Tanto R_{ox} quanto R_{fuel} são negativos, já que os dois desaparecem na reação de combustão.

Hipótese básica do modelo de sistema químico simples: $\Gamma_{fuel} = \Gamma_{ox} = \Gamma$ (5)

Combinando as equações 2, 3, 4 e 5:

$$G_{TOT} \cdot \frac{d}{dx} \left(m_{fuel} - \frac{m_{ox}}{\alpha} \right) - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d}{dx} \left(m_{fuel} - \frac{m_{ox}}{\alpha} \right) \right) = 0$$

Nota-se que não existe R_ϕ nesta equação e portanto $\left(m_{fuel} - \frac{m_{ox}}{\alpha} \right)$ é propriedade conservada.

Conservação da energia:

1ª Lei da Termodinâmica para volume de controle:

$$\dot{Q}_{VC} - \dot{W}_{VC} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} \rho \left(\varepsilon_i + \frac{u^2}{2} + g \cdot z \right) dV + \int_{SC} \rho \left(h + \frac{u^2}{2} + g \cdot z \right) \vec{u} \cdot \vec{n} \cdot dA$$

Análise de um volume de controle, no qual ocorre reação química de combustão

- Considerações:
- Regime permanente;
 - $\Delta \varepsilon_c = 0$; $\Delta \varepsilon_p = 0$; $W_{VC} = 0$;
 - Propriedades uniformes na seção

$$\dot{Q}_{VC} = \sum_{Produtos} \dot{m}_i (h_{f,i}^0 + \Delta h) - \sum_{Reagentes} \dot{m}_j (h_{f,j}^0 + \Delta h)$$

Aproximação: $\Delta h = c_p \cdot (\Delta T)$

$\dot{m}$ = vazão em massa

h_f^0 = entalpia de formação

Voltando a considerar a equação (1), e buscando determinar uma propriedade conservativa no balanço de energia, observa-se que para o caso em estudo:

R_ϕ = energia liberada na reação de combustão = $\dot{Q}_{lib}$ (energia por unidade de área e volume)

Considerando-se que toda energia liberada na combustão é transferida para o próprio escoamento, monta-se as equações da conservação de energia da seguinte forma:

$$G_{TOT} \cdot \frac{d(\sum m_i \cdot h_{f,i}^0)}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d(\sum m_i \cdot h_{f,i}^0)}{dx} \right) = \dot{Q}_{lib}$$

$$G_{TOT} \cdot \frac{d(c_p \cdot T)}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d(c_p \cdot T)}{dx} \right) = \dot{Q}_{trans}$$

$$\dot{Q}_{lib} = -\dot{Q}_{trans}$$

c_p = calor específico médio da mistura gasosa

T = Temperatura média da mistura gasosa

Desta forma, somando as equações obtém-se:

$$G_{TOT} \cdot \frac{d}{dx} (\sum (m_i \cdot h_{f,i}^0) + c_p \cdot T) - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d}{dx} (\sum (m_i \cdot h_{f,i}^0) + c_p \cdot T) \right) = 0$$

Portanto: $\sum (m_i \cdot h_{f,i}^0) + c_p \cdot T = \text{Propriedade Conservada}$

Equação do balanço de qualquer variável conservativa:

Hipótese: $\Gamma = \text{constante}$

$$\left(G_{TOT} \cdot \phi - \Gamma \cdot \frac{d\phi}{dr} \right) 4\pi r^2 = \left(G_{TOT,0} \cdot \phi_0 - \Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_0 \right) 4\pi r_0^2 \quad (6)$$

$$\left(G_{TOT} \cdot \phi - \Gamma \cdot \frac{d\phi}{dr} \right) r^2 = \left(G_{TOT,0} \cdot \phi_0 - \Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_0 \right) r_0^2 = C_1$$

$$G_{TOT} \cdot \phi \cdot r^2 - \Gamma \cdot \frac{d\phi}{dr} r^2 = C_1 \quad C_2 = G_{TOT} r^2 = G_{TOT,0} r_0^2$$

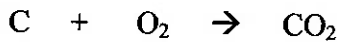
$$C_2 \cdot \phi - \Gamma \frac{d\phi}{dr} r^2 = C_1 \Rightarrow -\Gamma \frac{d\phi}{dr} r^2 = C_1 - C_2 \cdot \phi$$

$$\gamma = C_1 - C_2 \phi \rightarrow \frac{d\gamma}{d\phi} = -C_2 \Rightarrow d\phi = -\frac{d\gamma}{C_2}$$

$$\Gamma \cdot \frac{d\gamma}{dr} \cdot \frac{r^2}{C_2} = \gamma \Rightarrow \Gamma \cdot \frac{d\gamma}{\gamma} = C_2 \frac{dr}{r^2} \quad (7)$$

6. Modelagem Simples – estágio 1

Consideração inicial → Uma única reação química importante:



$$12 \text{ kg C} + 32 \text{ kg O}_2 = 44 \text{ kg CO}_2$$

$$1 \text{ kg C} + \alpha_0 \text{ kg O}_2 \rightarrow (\alpha_0 + 1) \text{ kg CO}_2 \rightarrow \alpha_0 = 32 / 12 = 2,67$$

O carbono não é volátil, então só é necessário considerar a difusão do oxigênio para a superfície do carvão. Este fenômeno sempre é um limite para o ritmo da combustão do carvão.

Integrando a eq. 7, que é resultado do balanço da propriedade conservativa, obtêm-se:

$$\int_{C_1 - C_2 \cdot \phi_0}^{C_1 - C_2 \cdot \phi_\infty} \Gamma \cdot \frac{d\gamma}{\gamma} = \int_{r_0}^{r \rightarrow \infty} C_2 \cdot \frac{dr}{r^2} \rightarrow \Gamma \cdot \ln \left(\frac{C_1 - C_2 \cdot \phi_\infty}{C_1 - C_2 \cdot \phi_0} \right) = C_2 \cdot \frac{1}{r_0}$$

Substituindo C_1 e C_2 :

$$\frac{G_{TOT,0} \cdot r_0}{\Gamma} = \ln \left[1 + \frac{(\phi_0 - \phi_\infty)}{-\Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right] \quad (8)$$

Sendo $\phi = \left(m_C - \frac{m_{O_2}}{\alpha_0} \right)$ e $m_C =$ fração em massa de vapor de carvão

Como $m_{C,0}$ é muito pequena, será considerado $m_{C,0} = m_{C,\infty} = 0$.

$$\frac{G_{TOT,0} \cdot r_0}{\Gamma} = \ln \left[1 + \frac{\left(\frac{-m_{O_2,0} + m_{O_2,\infty}}{\alpha_0} \right)}{\frac{1}{\alpha_0} \cdot \Gamma \cdot \left(\frac{dm_{O_2}}{dr} \right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right] \quad (9)$$

$-\Gamma \cdot \left(\frac{d}{dr} (m_{O_2}) \right)_0$ é a difusão de oxigênio para a superfície.

Equação da transferência de massa: $G_{O_2,0} = m_{O_2,0} \cdot G_{TOT,0} - \Gamma \cdot \left(\frac{dm_{O_2}}{dr} \right)_0$

$G_{O_2,0} = -\alpha_0 \cdot G_C$ onde G_C é a taxa de reação de carbono e $G_{TOT,0} = G_C$

$$-\Gamma \cdot \left(\frac{dm_{O_2}}{dr} \right)_0 = -G_{TOT,0} \cdot (\alpha_0 + m_{O_2,0})$$

Aplicando esta última equação na eq. 8, obtêm-se:

$$\frac{G_{TOT,0} \cdot r_0}{\Gamma} = \ln \left(1 + \frac{m_{O_2,\infty} - m_{O_2,0}}{\alpha_0 + m_{O_2,0}} \right) \quad (10)$$

Se o carvão não for muito ativo, pode-se admitir que $\left(\frac{m_{O_2,\infty} - m_{O_2,0}}{\alpha_0 + m_{O_2,0}} \right)$ é pequeno.

Assim,
$$\frac{G_{TOT,0} \cdot r_0}{\Gamma} = \frac{m_{O_2,\infty} - m_{O_2,0}}{\alpha_0 + m_{O_2,0}}$$

Quando o oxigênio atinge a superfície do carvão ele pode reagir ou não. A equação a seguir é adequada para modelar a cinética química.

$$G_c = k.P.m_{ox,0} \cdot \exp\left(\frac{-E}{R.T_0}\right)$$

$$\frac{k.P.m_{ox,0} \cdot \exp\left(\frac{-E}{R.T_0}\right) r_0}{\Gamma} = \frac{m_{ox,\infty} - m_{ox,0}}{\alpha + m_{ox,0}}$$

Com manipulações matemáticas, obtêm-se:

$$\frac{m_{ox,0}}{m_{ox,\infty}} = \left(1 + (\alpha + m_{ox,0}) \cdot \frac{k.P.r_0}{\Gamma} \cdot \exp\left(\frac{-E}{R.T_0}\right) \right)^{-1}$$

Combinando com a seguinte equação:

$$\frac{G_{TOT,0}}{k.P \cdot \exp\left(\frac{-E}{R.T_0}\right)} = m_{ox,0}$$

Resulta na equação:

$$G_{TOT,0} = \frac{m_{ox,\infty}}{\underbrace{\frac{1}{k.P \cdot \exp\left(\frac{-E}{R.T_0}\right)}}_{\text{Resistência Química}} + \underbrace{\frac{(\alpha_0 + m_{ox,0}) r_0}{\Gamma}}_{\text{Resistência Física}}}$$

A maior resistência controla o processo. Neste trabalho será considerado que as temperaturas são altas e que as reações ocorrem muito rapidamente. Desta forma, a modelagem somente dará importância a resistência física, ou seja, apenas a difusão das espécies químicas controlará as reações de combustão.

Seguindo este raciocínio, pode-se dizer que o oxigênio é consumido imediatamente ao atingir a superfície do carvão, e assim, a concentração em massa de O_2 na superfície da partícula ($m_{O_2,0}$) é igual a zero.

Portanto a eq. 10 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{G_{TOT,0} \cdot r_0}{\Gamma} = \ln\left(1 + \frac{m_{O_2,\infty}}{\alpha_0}\right)$$

Substituindo a propriedade conservada no balanço de energia $\phi_e = m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 + c_p \cdot T$ na equação do balanço de qualquer propriedade conservativa aplicada no volume de controle entre r_0 e $r \rightarrow \infty$ (eq. 8), resulta em:

$$\begin{aligned} \frac{G_{TOT,0} \cdot r_0}{\Gamma} &= \ln \left(1 + \frac{m_{CO_2,0} \cdot h_{f,CO_2}^0 + c_p \cdot T_0 - m_{CO_2,\infty} \cdot h_{f,CO_2}^0 - c_p \cdot T_\infty}{-\Gamma \left(\frac{d}{dr} (m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 + c_p \cdot T) \right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right) \quad (11) \\ -\Gamma \left(\frac{dm_{CO_2}}{dr} \right)_0 &= G_{CO_2,0} - G_{TOT,0} \cdot m_{CO_2,0} \\ G_{CO_2,0} &= (\alpha_0 + 1) G_C = (\alpha_0 + 1) G_{TOT,0} \\ \therefore -\Gamma \left(\frac{dm_{CO_2}}{dr} \right)_0 \cdot h_{f,CO_2}^0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} &= (\alpha_0 + 1 - m_{CO_2,0}) h_{f,CO_2}^0 \end{aligned}$$

Consideração a respeito do número de Lewis, que é a relação entre a difusividade térmica e a difusividade de massa:

$$Le = \frac{k}{\rho \cdot c_p} \cdot \frac{1}{D} = 1$$

$$\Rightarrow -\Gamma \cdot c_p \cdot \left(\frac{dT}{dr} \right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = -k \cdot \left(\frac{dT}{dr} \right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = \frac{Q_0}{G_{TOT,0}}$$

Substituindo estas últimas deduções na eq. 11, e considerando $m_{CO_2,\infty} = 0$, pode-se reescreve-la da seguinte forma:

$$\frac{G_{TOT,0} \cdot r_0}{\Gamma} = \ln \left(1 + \frac{m_{CO_2,0} \cdot h_{f,CO_2}^0 + c_p \cdot T_0 - c_p \cdot T_\infty}{(\alpha_0 + 1 - m_{CO_2,0}) h_{f,CO_2}^0 + \frac{Q_0}{G_{TOT,0}}} \right)$$

Estudo do comportamento dos gases inertes

Considerações:

$\Rightarrow$ gases inertes será representado apenas pelo nitrogênio.

- ⇒ Concentração em massa de nitrogênio em regiões relativamente distantes radialmente da partícula, simbolizada como $m_{N_2,\infty}$, será considerada igual à concentração atmosférica. Assim, $m_{N_2,\infty} = 76,7 \%$.
- ⇒ O fluxo total de Nitrogênio em qualquer superfície do volume de controle é igual a zero: $G_{N_2,i} = 0$

$$G_{N_2,i} = m_{N_2,i} \cdot G_{TOT,i} - \Gamma \cdot \left(\frac{dm_{N_2}}{dr} \right)_i$$

$$\Rightarrow G_{TOT,i} \cdot m_{N_2,i} = \Gamma \cdot \left(\frac{dm_{N_2}}{dr} \right)_i \quad \rightarrow \quad G_{TOT,i} = G_{TOT,0} \cdot \left(\frac{r_0}{r_i} \right)^2$$

$$\int_{r_0}^{r_\infty} G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \frac{dr}{r^2} = \int_{m_{N_2,0}}^{m_{N_2,\infty}} \Gamma \cdot \frac{dm_{N_2}}{m_{N_2}} \quad \Rightarrow \quad G_{TOT,0} \cdot r_0 = \Gamma \cdot \ln \left(\frac{m_{N_2,\infty}}{m_{N_2,0}} \right)$$

Tempo de queima da partícula

$$V_{partícula} = \frac{4}{3} \pi r_0^3$$

$$M_{partícula} = \frac{4}{3} \pi r_0^3 \cdot \rho_C$$

$$\frac{dM}{dt} = -G_{TOT,0} \cdot 4 \cdot \pi \cdot r_0^2 = \frac{4}{3} \pi \cdot \rho_C \cdot 3 \cdot r_0^2 \cdot \frac{dr_0}{dt}$$

$$\therefore \frac{dr_0}{dt} = -\frac{G_{TOT,0}}{\rho_C}$$

Esta equação diferencial permitirá a simulação do modelo por método iterativo.

7. Modelagem Composta – estágio 2

Consideração inicial: divisão do estudo em dois volumes de controle com duas reações químicas principais. Neste desenvolvimento, interface da reação $\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$ será denominada chama.

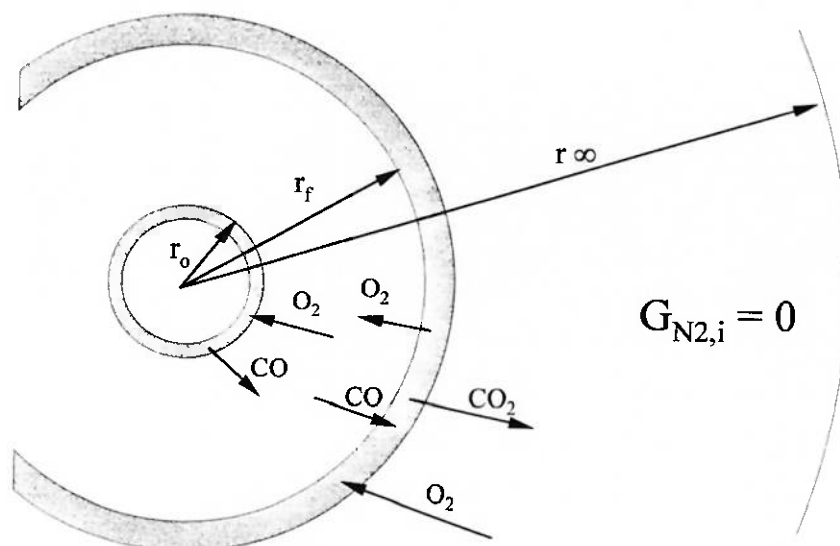


Diagrama das concentrações inicialmente estimado e considerado para os componentes presentes nos dois volumes de controle:

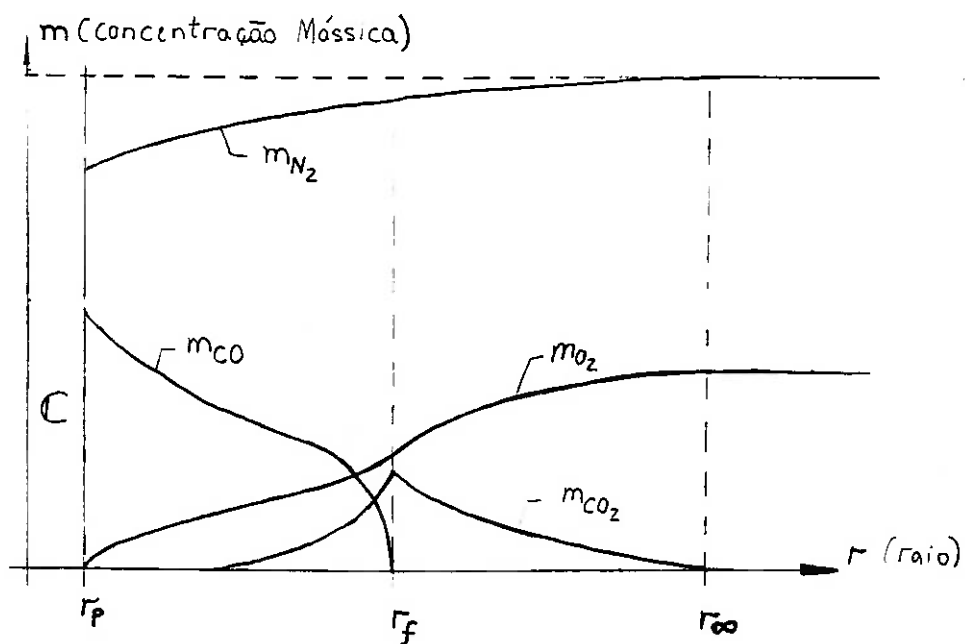


Gráfico realizado pelo próprio autor deste trabalho

Nota-se no diagrama apresentado a consideração de combustíveis muito ativos e temperaturas elevadas, tanto na superfície da partícula quanto na chama, ou seja, está sendo considerado que as reações são muito rápidas. Consequentemente, o oxigênio é consumido imediatamente ao chegar na superfície do carvão, e o monóxido de carbono é consumido imediatamente ao chegar na interface da reação responsável pela sua queima (chama).

Equações do balanço das concentrações na superfície da partícula e na chama:

$$m_{CO,0} = 1 - m_{N_2,0}$$

$$m_{O_2,f} + m_{CO_2,f} = 1 - m_{N_2,f}$$

Volume de Controle 1

- casca esférica entre o raio da superfície da partícula (r_0) e o raio da chama (r_f)

- Reação envolvida:

$$C + \frac{1}{2}O_2 = CO$$

→ 12 kg de carbono + 16 kg de oxigênio = 28 kg de monóxido de carbono

→ 1 kg de carbono → α_1 kg de oxigênio → $(\alpha_1 + 1)$ kg de monóxido de carbono

Volume de Controle 2

- casca esférica entre o raio da chama (r_f) e um raio que representa a vizinhança, ou seja, um raio tendendo ao infinito em relação ao centro da partícula (r_∞).

- Reação envolvida:

$$CO + \frac{1}{2}O_2 = CO_2$$

→ 28 kg de monóxido de carbono + 16 kg de oxigênio = 44 kg de gás carbônico

→ 1 kg de carbono → $(\alpha_1 + 1)$ kg de monóxido de carbono

→ α_1 kg de oxigênio

→ $(2\alpha_1 + 1)$ kg de gás carbônico

7.1 Parte 1: Conservação das Espécies Químicas

Propriedade Conservativa

Já foi apresentado anteriormente o procedimento para a obtenção de uma propriedade conservativa. Partindo deste, e tendo como objetivo a análise da conservação das espécies químicas, obtém-se:

Volume de controle 1

$$\begin{aligned}
 (-) \quad & G_{TOT} \cdot \frac{dm_C}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{dm_C}{dx} \right) = R_C \\
 & G_{TOT} \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{m_{O_2}}{\alpha_1} \right) - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{m_{O_2}}{\alpha_1} \right) \right) = \frac{R_{O_2}}{\alpha_1} \\
 \hline
 & G_{TOT} \cdot \frac{d}{dx} \left(m_C - \frac{m_{O_2}}{\alpha_1} \right) - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d}{dx} \left(m_C - \frac{m_{O_2}}{\alpha_1} \right) \right) = 0
 \end{aligned}$$

Propriedade conservativa quanto ao fluxo de espécies químicas no volume de controle 1 :

$$\phi_{m,1} = m_C - \frac{m_{O_2}}{\alpha_1}$$

Volume de Controle 2

$$\begin{aligned}
 (-) \quad & G_{TOT} \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{m_{CO}}{\alpha_1 + 1} \right) - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{m_{CO}}{\alpha_1 + 1} \right) \right) = \frac{R_{CO}}{\alpha_1 + 1} \\
 & G_{TOT} \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{m_{O_2}}{\alpha_1} \right) - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{m_{O_2}}{\alpha_1} \right) \right) = \frac{R_{O_2}}{\alpha_1} \\
 \hline
 & G_{TOT} \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{m_{CO}}{\alpha_1 + 1} - \frac{m_{O_2}}{\alpha_1} \right) - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{m_{CO}}{\alpha_1 + 1} - \frac{m_{O_2}}{\alpha_1} \right) \right) = 0
 \end{aligned}$$

Propriedade conservativa quanto ao fluxo de espécies químicas no volume de controle 2 :

$$\phi_{m,2} = \frac{m_{CO}}{\alpha_1 + 1} - \frac{m_{O_2}}{\alpha_1}$$

Balanco da variável conservativa – Volume de controle 1

A partir da equação (7), que é resultado do desenvolvimento do balanço de qualquer variável conservativa

$$\Gamma \cdot \frac{d\gamma}{\gamma} = C_2 \frac{dr}{r^2}$$

o desenvolvimento se inicia integrando-a entre a chama (interface da reação entre CO e O₂) e a superfície da partícula:

$$\int_{C_1 - C_2 \phi_0}^{C_1 - C_2 \phi_f} \Gamma \cdot \frac{d\gamma}{\gamma} = \int_{r_0}^{r_f} C_2 \frac{dr}{r^2}$$

$$\Rightarrow \Gamma \cdot \ln \left(\frac{C_1 - C_2 \phi_f}{C_1 - C_2 \phi_0} \right) = -C_2 \left(\frac{1}{r_f} - \frac{1}{r_0} \right) = C_2 \left(\frac{1}{r_0} - \frac{1}{r_f} \right)$$

$$G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \frac{1}{\Gamma} \left(\frac{r_f - r_0}{r_0 r_f} \right) = \ln \left(\frac{G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \phi_0 - \Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_0 \cdot r_0^2 - G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \phi_f}{G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \phi_0 - \Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_0 \cdot r_0^2 - G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \phi_0} \right)$$

$$\therefore G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0}{\Gamma} \cdot \left(1 - \frac{r_0}{r_f} \right) = \ln \left(\frac{G_{TOT,0} \cdot (\phi_0 - \phi_f) - \Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_0}{-\Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_0} \right) = \ln \left(1 + \frac{G_{TOT,0} \cdot (\phi_0 - \phi_f)}{-\Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_0} \right) \quad (12)$$

Utilizando a propriedade conservativa desenvolvida anteriormente, $\phi_{m,1} = \left(m_C - \frac{m_{O_2}}{\alpha_1} \right)$,

a equação acima será reescrita como:

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0}{\Gamma} \cdot \left(1 - \frac{r_0}{r_f} \right) = \ln \left(1 + \frac{\left(m_{C,0} - \frac{m_{O_2,0}}{\alpha_1} - m_{C,f} + \frac{m_{O_2,f}}{\alpha_1} \right)}{-\Gamma \cdot \frac{d}{dr} \left(m_C - \frac{m_{O_2}}{\alpha_1} \right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right)$$

Considerações: $m_{C,0} = 0$; $m_{C,f} = 0$; $m_{O_2,0} = 0$; $\left(\frac{dm_C}{dr}\right)_0 = 0$

Desenvolvimento da expressão $-\Gamma\left(\frac{dm_{O_2}}{dr}\right)_0$:

$$G_{O_2,0} = m_{O_2,0} \cdot G_{TOT,0} - \Gamma\left(\frac{dm_{O_2}}{dr}\right)_0 \rightarrow G_{O_2,0} = -\alpha_1 \cdot G_C = -\alpha_1 \cdot G_{TOT,0}$$

$$-\Gamma\left(\frac{dm_{O_2}}{dr}\right)_0 = -\alpha_1 \cdot G_{TOT,0} - m_{O_2,0} \cdot G_{TOT,0} \quad \{\text{Como } m_{O_2,0} = 0\}$$

$$\Rightarrow -\Gamma\left(\frac{dm_{O_2}}{dr}\right)_0 \cdot \frac{1}{\alpha_1 \cdot G_{TOT,0}} = -1$$

Desta forma, a equação final obtida para o estudo da conservação das espécies químicas no volume de controle 1 é:

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0}{\Gamma} \cdot \left(1 - \frac{r_0}{r_f}\right) = \ln\left(1 + \frac{m_{O_2,f}}{\alpha_1}\right) \quad (13)$$

Balanco da propriedade conservativa - Volume de Controle 2

A partir da equação (7), que é resultado do desenvolvimento do balanço de qualquer variável conservativa

$$\Gamma \cdot \frac{d\gamma}{\gamma} = C_2 \frac{dr}{r^2}$$

o desenvolvimento se inicia integrando-a entre a vizinhança (infinito) e a chama (interface da reação entre CO e O₂):

$$\int_{C_1-C_2 \cdot \phi_f}^{C_1-C_2 \cdot \phi_\infty} \Gamma \cdot \frac{d\gamma}{\gamma} = \int_{r_f}^{r_\infty} C_2 \frac{dr}{r^2}$$

$$\Rightarrow \Gamma \cdot \ln \left(\frac{C_1 - C_2 \cdot \phi_\infty}{C_1 - C_2 \cdot \phi_f} \right) = -C_2 \left(\frac{1}{r_\infty} - \frac{1}{r_f} \right) = \frac{C_2}{r_f}$$

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0^2}{\Gamma \cdot r_f} = \ln \left(\frac{G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \phi_f - \Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_f \cdot r_f^2 - G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \phi_\infty}{G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \phi_f - \Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_f \cdot r_f^2 - G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \phi_f} \right)$$

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0^2}{\Gamma \cdot r_f} = \ln \left(\frac{G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot (\phi_f - \phi_\infty) - \Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_f \cdot r_f^2}{-\Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_f \cdot r_f^2} \right)$$

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0^2}{\Gamma \cdot r_f} = \ln \left(1 + \frac{\phi_f - \phi_\infty}{-\Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_f \cdot \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right) \quad (14)$$

Utilizando a propriedade conservativa desenvolvida anteriormente, $\phi_{m,2} = \frac{m_{CO}}{\alpha_1 + 1} - \frac{m_{O_2}}{\alpha_1}$

, a equação acima será reescrita como:

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0^2}{\Gamma \cdot r_f} = \ln \left(1 + \frac{\frac{m_{CO,f}}{\alpha_1 + 1} - \frac{m_{O_2,f}}{\alpha_1} - \frac{m_{CO,\infty}}{\alpha_1 + 1} + \frac{m_{O_2,\infty}}{\alpha_1}}{-\Gamma \cdot \left(\frac{d}{dr} \left(\frac{m_{CO}}{\alpha_1 + 1} - \frac{m_{O_2}}{\alpha_1} \right) \right)_f \cdot \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right) \quad (15)$$

- Considerações:
- $m_{CO,f} = 0$; $m_{CO,\infty} = 0$
 - CO não reage no Volume de Controle 1

Desenvolvimento da expressão: $\left\{ -\Gamma \left(\frac{d}{dr} \left(\frac{m_{CO}}{\alpha_1 + 1} - \frac{m_{O_2}}{\alpha_1} \right) \right) \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} \right\}$

.....

$$G_{CO,f} = m_{CO,f} \cdot G_{TOT,f} - \Gamma \left(\frac{dm_{CO}}{dr} \right)_f \Rightarrow G_{CO,f} = -\Gamma \left(\frac{dm_{CO}}{dr} \right)_f$$

$$G_{CO,0} = (\alpha_1 + 1)G_C = (\alpha_1 + 1)G_{TOT,0} \rightarrow G_{CO,f} = G_{CO,0} \left(\frac{r_0}{r_f} \right)^2$$

$$\Rightarrow -\Gamma \left(\frac{dm_{CO}}{dr} \right)_f \cdot \frac{1}{(\alpha_1 + 1)} \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = 1$$

.....

$$G_{O_2,f} = m_{O_2,f} \cdot G_{TOT,f} - \Gamma \left(\frac{dm_{O_2}}{dr} \right)_f$$

Consideração:

⇒ O fluxo de oxigênio pela fronteira do Volume de Controle 2 é apenas o responsável pela reação $C + \frac{1}{2} O_2 = CO$.

$$\Rightarrow \therefore G_{O_2,f} = -\alpha_1 \cdot G_C \left(\frac{r_0}{r_f} \right)^2$$

$$G_C = G_{TOT,0} \rightarrow G_{TOT,f} = G_{TOT,0} \left(\frac{r_0}{r_f} \right)^2$$

$$-\Gamma \left(\frac{dm_{O_2}}{dr} \right)_f = -\alpha_1 \left(\frac{r_0}{r_f} \right)^2 \cdot G_{TOT,0} - m_{O_2,f} \left(\frac{r_0}{r_f} \right)^2 \cdot G_{TOT,0}$$

$$\frac{\Gamma}{\alpha_1} \left(\frac{dm_{O_2}}{dr} \right)_f \left(\left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} \right) = \frac{\alpha_1 + m_{O_2,f}}{\alpha_1}$$

.....

Retornando a equação (15), e adicionando as últimas deduções e considerações, conclui-se que:

$$G_{TOT,0} \cdot \left(\frac{r_0^2}{\Gamma r_f} \right) = \ln \left(1 + \frac{m_{O_2,\infty} - m_{O_2,f}}{2\alpha_1 + m_{O_2,f}} \right) \quad (16)$$

7.2 Parte 2: Conservação de Energia

Propriedade Conservativa

A propriedade conservativa relativa a transferência de energia, como já apresentado anteriormente, será agora determinada para os dois volumes de controle.

Volume de Controle 1

$$\begin{aligned} (+) \quad & G_{TOT} \cdot \frac{d(m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0)}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d(m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0)}{dx} \right) = \dot{Q}_{lib} \\ & G_{TOT} \cdot \frac{d(c_p \cdot T)}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d(c_p \cdot T)}{dx} \right) = \dot{Q}_{trans} \\ \dot{Q}_{lib} &= -\dot{Q}_{trans} \\ \hline & G_{TOT} \cdot \frac{d}{dx} (m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T) - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d}{dx} (m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T) \right) = 0 \end{aligned}$$

Propriedade conservativa referente ao balanço térmico no volume de controle 1:

$$\phi_{T,1} = m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T$$

Volume de Controle 2:

$$\begin{aligned} (+) \quad & G_{TOT} \cdot \frac{d(m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0)}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d(m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0)}{dx} \right) = \dot{Q}_{lib} \\ & G_{TOT} \cdot \frac{d(c_p \cdot T)}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d(c_p \cdot T)}{dx} \right) = \dot{Q}_{trans} \\ \dot{Q}_{lib} &= -\dot{Q}_{trans} \\ \hline & G_{TOT} \cdot \frac{d}{dx} (m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T) - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d}{dx} (m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T) \right) = 0 \end{aligned}$$

Propriedade conservativa referente ao balanço térmico no volume de controle 2:

$$\phi_{T,2} = m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T$$

Balanço da variável conservativa – Volume de controle 1

Este desenvolvimento pode partir da equação (12), pois o balanço que a determinou, no volume de controle 1, é válido para qualquer propriedade conservativa. Portanto,

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0}{\Gamma} \cdot \left(1 - \frac{r_0}{r_f}\right) = \ln \left(1 + \frac{(\phi_0 - \phi_f)}{-\Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr}\right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right)$$

Inserindo a propriedade conservativa $\phi_{T,1} = m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T$, resulta em:

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0}{\Gamma} \cdot \left(1 - \frac{r_0}{r_f}\right) = \ln \left(1 + \frac{m_{CO,0} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T_0 - m_{CO,f} \cdot h_{f,CO}^0 - c_p \cdot T_f}{-\Gamma \cdot \left(\frac{d}{dr} (m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T)\right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right) \quad (17)$$

Desenvolvimento da expressão:

$$-\Gamma \cdot \left(\frac{d}{dr} (m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T)\right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}$$

$$-\Gamma \cdot \left(\frac{dm_{CO}}{dr}\right)_0 = G_{CO,0} - G_{TOT,0} \cdot m_{CO,0} \quad \text{e} \quad G_{CO,0} = G_C \cdot (\alpha_1 + 1) = G_{TOT,0} \cdot (\alpha_1 + 1)$$

$$\Rightarrow -\Gamma \cdot \left(\frac{dm_{CO}}{dr}\right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = \alpha_1 + 1 - m_{CO,0}$$

.....

Número de Lewis é igual a relação entre a difusividade térmica α e a difusividade de massa D .

Consideração: $Numero\ de\ Lewis\ (Le) = \frac{k}{c_p \cdot \Gamma} = 1 \Rightarrow k = c_p \cdot \Gamma$

$$-\Gamma \cdot c_p \cdot \left(\frac{dT}{dr} \right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = -k \cdot \left(\frac{dT}{dr} \right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = \frac{Q_0}{G_{TOT,0}}$$

.....

Substituindo estas deduções na equação (17), obtém-se:

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0}{\Gamma} \cdot \left(1 - \frac{r_0}{r_f} \right) = \ln \left(1 + \frac{m_{CO,0} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot (T_0 - T_f)}{\frac{Q_0}{G_{TOT,0}} + (\alpha + 1 - m_{CO,0}) h_{f,CO}^0} \right) \quad (18)$$

Balanco da variável conservativa – Volume de controle 2

Este desenvolvimento pode partir da equação (14), pois o balanço que a determinou, no volume de controle 2, é válido para qualquer propriedade conservativa. Portanto,

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0^2}{\Gamma r_f} = \ln \left(1 + \frac{\phi_f - \phi_\infty}{-\Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_f \cdot \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right)$$

Inserindo a propriedade conservativa $\phi_{T,2} = m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T$, resulta em:

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0^2}{\Gamma r_f} = \ln \left(1 + \frac{m_{CO_2,f} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO,f} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T_f - m_{CO_2,\infty} \cdot h_{f,CO_2}^0 + m_{CO,\infty} \cdot h_{f,CO}^0 - c_p \cdot T_\infty}{-\Gamma \cdot \left(\frac{d}{dr} (m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T) \right)_f \cdot \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right) \quad (19)$$

Considerações: $m_{CO,f} = 0$; $m_{CO,\infty} = 0$; $m_{CO_2,\infty} = 0$

Desenvolvimento da expressão:

$$-\Gamma \left(\frac{d}{dr} (m_{CO_2} h_{f,CO_2}^0 - m_{CO} h_{f,CO}^0 + c_p T) \right)_f \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}$$

.....

$$-\Gamma \left(\frac{dm_{CO}}{dr} \right)_f = G_{CO,f} - G_{TOT,f} m_{CO,f}$$

$$-\Gamma \left(\frac{dm_{CO_2}}{dr} \right)_f = G_{CO_2,f} - G_{TOT,f} m_{CO_2,f}$$

$$G_{CO_2,f} = 0 \quad e \quad G_{TOT,f} = G_{TOT,0} \left(\frac{r_0}{r_f} \right)^2$$

$$-\Gamma \left(\frac{dm_{CO_2}}{dr} \right)_f \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 h_{f,CO_2}^0 = -m_{CO_2,f} h_{f,CO_2}^0$$

.....

$$-\Gamma \left(\frac{dm_{CO}}{dr} \right)_f = G_{CO,f} - G_{TOT,f} m_{CO,f}$$

$$m_{CO,f} = 0 \quad e \quad G_{CO,f} = (\alpha_1 + 1) G_{TOT,0} \left(\frac{r_0}{r_f} \right)^2$$

$$\Gamma \left(\frac{dm_{CO}}{dr} \right)_f h_{f,CO}^0 \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = -(\alpha_1 + 1) h_{f,CO}^0$$

.....

Consideração: $Numero\ de\ Lewis\ (Le) = \frac{k}{c_p \Gamma} = 1 \Rightarrow k = c_p \Gamma$

$$-\Gamma c_p \left(\frac{dT}{dr} \right)_f \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = -k \left(\frac{dT}{dr} \right)_f \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = \frac{Q_f}{G_{TOT,0}} \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2$$

.....

Substituindo estas deduções na equação (19), obtém-se:

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0^2}{\Gamma r_f} = \ln \left(1 + \frac{m_{CO_2,f} \cdot h_{f,CO_2}^0 + c_p (T_f - T_\infty)}{\frac{Q_f}{G_{TOT,0}} \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 - m_{CO_2,f} \cdot h_{f,CO_2}^0 - (\alpha_1 + 1) h_{f,CO}^0} \right) \quad (20)$$

Análise dos termos referentes a transferência de calor

Transferência de calor por condução:

$$Q_0 = -k \cdot \left(\frac{T_f - T_0}{r_f - r_0} \right) \quad Q_f = -k \cdot \left(\frac{T_f - T_0}{r_f - r_0} + \frac{T_\infty - T_f}{r_\infty - r_f} \right)$$

Transferência de calor por radiação:

A idéia utilizada nesta modelagem é considerar o efeito da radiação em conjunto com a equação de condução. Desta forma,

$$Q_{rad} = \varepsilon \cdot \sigma \cdot (T_0^4 - T_\infty^4) = -k_{rad} \cdot \left(\frac{T_f - T_0}{r_f - r_0} \right) \Rightarrow k_{rad} = -\varepsilon \cdot \sigma \cdot (T_0^4 - T_\infty^4) \left(\frac{r_f - r_0}{T_f - T_0} \right)$$

O k_{rad} é adicionado ao k_{cond} para o cálculo de Q_0 .

7.3 Comportamento dos gases inertes

Considerações:

- ⇒ gases inertes serão representados apenas pelo nitrogênio.
- ⇒ Concentração em massa de nitrogênio em regiões relativamente distantes radialmente à partícula, simbolizada como $m_{N_2,\infty}$, será considerada igual à concentração média na atmosfera. Assim, $m_{N_2,\infty} = 76,7 \%$.
- ⇒ O fluxo total de Nitrogênio em qualquer superfície do volume de controle é igual a zero: $G_{N_2,i} = 0$

$$G_{N_2,i} = m_{N_2,i} \cdot G_{TOT,i} - \Gamma \cdot \left(\frac{dm_{N_2}}{dr} \right)_i$$

$$\Rightarrow G_{TOT,i} \cdot m_{N_2,i} = \Gamma \cdot \left(\frac{dm_{N_2}}{dr} \right)_i \quad \rightarrow \quad G_{TOT,i} = G_{TOT,0} \cdot \left(\frac{r_0}{r_i} \right)^2$$

Volume de Controle 1

$$\int_{r_0}^{r_f} G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \frac{dr}{r^2} = \int_{m_{N_2,0}}^{m_{N_2,f}} \Gamma \cdot \frac{dm_{N_2}}{m_{N_2}} \quad \Rightarrow \quad -G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \left(\frac{1}{r_f} - \frac{1}{r_0} \right) = \Gamma \cdot \ln \left(\frac{m_{N_2,f}}{m_{N_2,0}} \right) \quad (21)$$

Volume de Controle 2

$$\int_{r_f}^{r_\infty} G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \frac{dr}{r^2} = \int_{m_{N_2,f}}^{m_{N_2,\infty}} \Gamma \cdot \frac{dm_{N_2}}{m_{N_2}} \quad \Rightarrow \quad G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \frac{1}{r_f} = \Gamma \cdot \ln \left(\frac{m_{N_2,\infty}}{m_{N_2,f}} \right) \quad (22)$$

8. Modelagem Composta – estágio 3

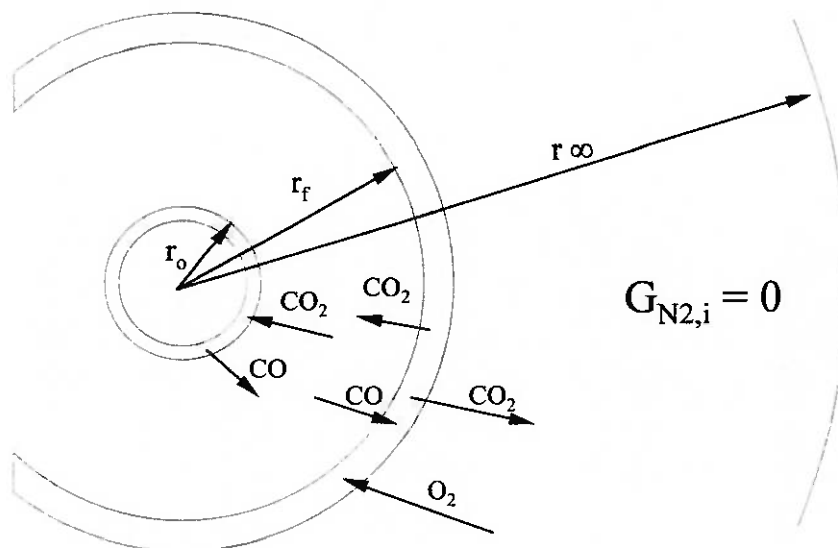
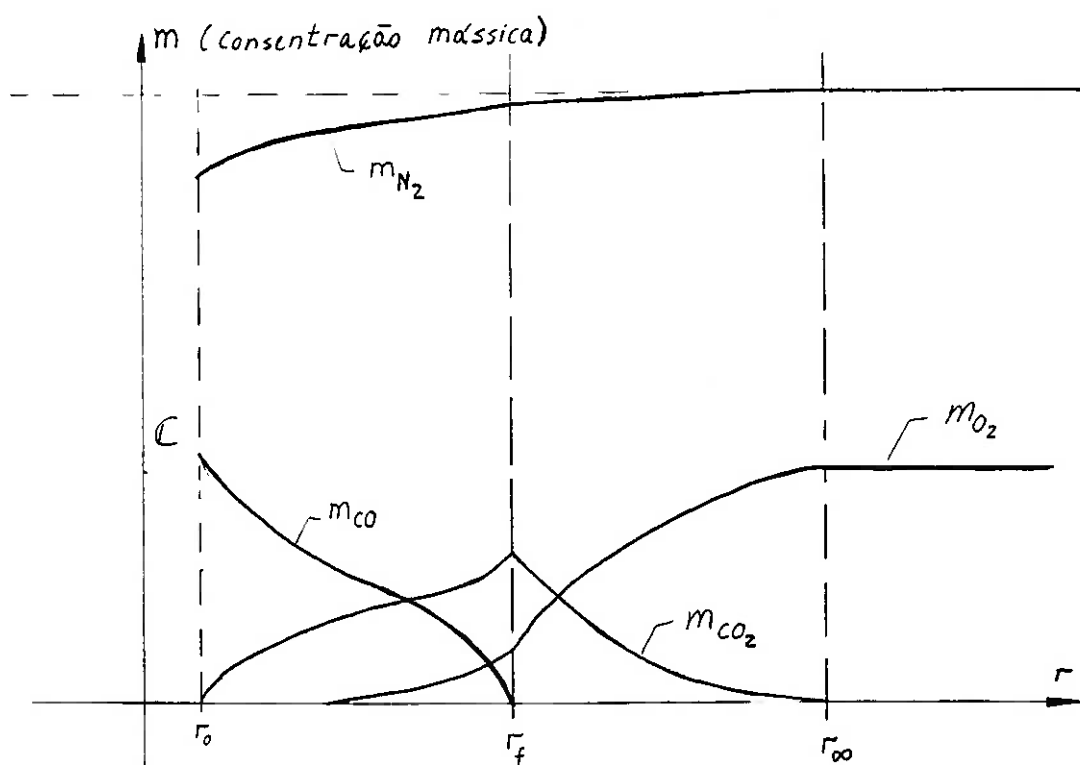


Diagrama das concentrações inicialmente estimado e considerado para os componentes presentes nos dois volumes de controle:



Nota-se no diagrama apresentado a consideração de combustíveis muito ativos e temperaturas elevadas, tanto na superfície da partícula quanto na chama, ou seja, está sendo considerado que as reações são muito rápidas. Consequentemente, o dióxido de carbono é consumido imediatamente ao chegar na superfície do carvão, e o monóxido de carbono é consumido imediatamente ao chegar na interface da reação responsável pela sua queima (chama).

Equações do balanço das concentrações na superfície da partícula e na chama:

$$m_{CO,0} = 1 - m_{N_2,0}$$

$$m_{O_2,f} + m_{CO_2,f} = 1 - m_{N_2,f}$$

Volume de Controle 1

– casca esférica entre o raio da superfície da partícula (r_0) e o raio da chama (r_f)

– Reação envolvida: $C + CO_2 = 2CO$

→ 12 kg de carbono + 44 kg de gás carbônico = 56 kg de monóxido de carbono

→ 1 kg de carbono → α_2 kg de gás carbônico → $(\alpha_2 + 1)$ kg de monóxido de carbono

Volume de Controle 2

- casca esférica entre o raio da chama (r_f) e um raio que representa a vizinhança, ou seja, um raio tendendo ao infinito em relação ao centro da partícula (r_∞).

- Reação envolvida: $2CO + O_2 = 2CO_2$

→ 56 kg de monóxido de carbono + 32 kg de oxigênio = 88 kg de gás carbônico

→ 1 kg de carbono → $(\alpha_2 + 1)$ kg de monóxido de carbono

→ $(\alpha_2 - 1)$ kg de oxigênio

→ $2\alpha_2$ kg de gás carbônico

8.1 Parte 1: Conservação das Espécies Químicas

Propriedade Conservativa

Já foi apresentado anteriormente o procedimento para a obtenção de uma propriedade conservativa. Partindo deste, e tendo como objetivo a análise da conservação das espécies químicas, obtem-se:

Volume de controle 1

$$\begin{aligned}
 (-) \quad & G_{TOT} \cdot \frac{dm_C}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{dm_C}{dx} \right) = R_C \\
 & G_{TOT} \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{m_{CO_2}}{\alpha_2} \right) - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{m_{CO_2}}{\alpha_2} \right) \right) = \frac{R_{CO_2}}{\alpha_2} \\
 \hline
 & G_{TOT} \cdot \frac{d}{dx} \left(m_C - \frac{m_{CO_2}}{\alpha_2} \right) - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d}{dx} \left(m_C - \frac{m_{CO_2}}{\alpha_2} \right) \right) = 0
 \end{aligned}$$

Propriedade conservativa quanto ao fluxo de espécies químicas no volume de controle 1 :

$$\phi_{m,1} = m_C - \frac{m_{CO_2}}{\alpha_2}$$

Volume de Controle 2

$$\begin{aligned}
 (-) \quad & G_{TOT} \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{m_{CO}}{\alpha_2 + 1} \right) - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{m_{CO}}{\alpha_2 + 1} \right) \right) = \frac{R_{CO}}{\alpha_2 + 1} \\
 & G_{TOT} \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{m_{O_2}}{\alpha_2 - 1} \right) - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{m_{O_2}}{\alpha_2 - 1} \right) \right) = \frac{R_{O_2}}{\alpha_2 - 1} \\
 \hline
 & G_{TOT} \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{m_{CO}}{\alpha_2 + 1} - \frac{m_{O_2}}{\alpha_2 - 1} \right) - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{m_{CO}}{\alpha_2 + 1} - \frac{m_{O_2}}{\alpha_2 - 1} \right) \right) = 0
 \end{aligned}$$

Propriedade conservativa quanto ao fluxo de espécies químicas no volume de controle 2 :

$$\phi_{m,2} = \frac{m_{CO}}{\alpha_2 + 1} - \frac{m_{O_2}}{\alpha_2 - 1}$$

Balanco da variável conservativa – Volume de controle 1

Este desenvolvimento pode partir da equação (12), pois o balanço que a determinou, no volume de controle 1, é valido para qualquer propriedade conservativa. Portanto,

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0}{\Gamma} \cdot \left(1 - \frac{r_0}{r_f}\right) = \ln \left(1 + \frac{(\phi_0 - \phi_f)}{-\Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr}\right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right)$$

Utilizando a propriedade conservativa desenvolvida anteriormente, $\phi_{m,1} = \left(m_C - \frac{m_{CO_2}}{\alpha_2} \right)$,

a equação acima será reescrita como:

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0}{\Gamma} \cdot \left(1 - \frac{r_0}{r_f}\right) = \ln \left(1 + \frac{\left(m_{C,0} - \frac{m_{CO_2,0}}{\alpha_2} - m_{C,f} + \frac{m_{CO_2,f}}{\alpha_2} \right)}{-\Gamma \cdot \frac{d}{dr} \left(m_C - \frac{m_{CO_2}}{\alpha_2} \right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right)$$

Considerações: $m_{C,0} = 0$; $m_{C,f} = 0$; $m_{CO_2,0} = 0$; $\left(\frac{dm_C}{dr}\right)_0 = 0$

Desenvolvimento da expressão $-\Gamma \left(\frac{dm_{CO_2}}{dr}\right)_0$:

$$G_{CO_2,0} = m_{CO_2,0} \cdot G_{TOT,0} - \Gamma \left(\frac{dm_{CO_2}}{dr}\right)_0 \rightarrow G_{O_2,0} = -\alpha_2 \cdot G_C = -\alpha_2 \cdot G_{TOT,0}$$

$$-\Gamma \left(\frac{dm_{CO_2}}{dr}\right)_0 = -\alpha_2 \cdot G_{TOT,0} - m_{CO_2,0} \cdot G_{TOT,0} \quad \{ \text{Como } m_{CO_2,0} = 0 \}$$

$$\Rightarrow \Gamma \left(\frac{dm_{CO_2}}{dr}\right)_0 \cdot \frac{1}{\alpha_2 \cdot G_{TOT,0}} = 1$$

Desta forma, a equação final obtida para o estudo da conservação das espécies químicas no volume de controle 1 é:

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0}{\Gamma} \cdot \left(1 - \frac{r_0}{r_f}\right) = \ln \left(1 + \frac{m_{CO_2,f}}{\alpha_2}\right) \quad (23)$$

Balanco da propriedade conservativa - Volume de Controle 2

Este desenvolvimento pode partir da equação (14), pois o balanço que a determinou, no volume de controle 2, é válido para qualquer propriedade conservativa. Portanto,

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0^2}{\Gamma r_f} = \ln \left(1 + \frac{\phi_f - \phi_\infty}{-\Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr}\right)_f \cdot \left(\frac{r_f}{r_0}\right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right)$$

Utilizando a propriedade conservativa desenvolvida anteriormente,

$$\phi_{m,2} = \frac{m_{CO}}{\alpha_2 + 1} - \frac{m_{O_2}}{\alpha_2 - 1}$$

a equação acima será reescrita como:

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0^2}{\Gamma r_f} = \ln \left(1 + \frac{\frac{m_{CO,f}}{\alpha_2 + 1} - \frac{m_{O_2,f}}{\alpha_2 - 1} - \frac{m_{CO,\infty}}{\alpha_2 + 1} + \frac{m_{O_2,\infty}}{\alpha_2 - 1}}{-\Gamma \cdot \left(\frac{d}{dr} \left(\frac{m_{CO}}{\alpha_2 + 1} - \frac{m_{O_2}}{\alpha_2 - 1} \right)\right)_f \cdot \left(\frac{r_f}{r_0}\right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right) \quad (24)$$

Considerações: - $m_{CO,f} = 0$; $m_{CO,\infty} = 0$; $G_{O_2,f} = 0$
 - CO não reage no Volume de Controle 1

Desenvolvimento da expressão: $\left\{ -\Gamma \left(\frac{d}{dr} \left(\frac{m_{CO}}{\alpha_2 + 1} - \frac{m_{O_2}}{\alpha_2 - 1} \right) \right)_f \cdot \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} \right\}$

$$G_{CO,f} = m_{CO,f} \cdot G_{TOT,f} - \Gamma \left(\frac{dm_{CO}}{dr} \right)_f \Rightarrow G_{CO,f} = -\Gamma \left(\frac{dm_{CO}}{dr} \right)_f$$

$$G_{CO,0} = (\alpha_2 + 1)G_C = (\alpha_2 + 1)G_{TOT,0} \rightarrow G_{CO,f} = G_{CO,0} \left(\frac{r_0}{r_f} \right)^2$$

$$\Rightarrow -\Gamma \left(\frac{dm_{CO}}{dr} \right)_f \cdot \frac{1}{(\alpha_2 + 1)} \cdot \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = 1$$

.....

$$G_{O_2,f} = m_{O_2,f} \cdot G_{TOT,f} - \Gamma \left(\frac{dm_{O_2}}{dr} \right)_f$$

$$G_C = G_{TOT,0} \rightarrow G_{TOT,f} = G_{TOT,0} \left(\frac{r_0}{r_f} \right)^2$$

$$-\Gamma \left(\frac{dm_{O_2}}{dr} \right)_f = -m_{O_2,f} \cdot \left(\frac{r_0}{r_f} \right)^2 \cdot G_{TOT,0}$$

$$\frac{\Gamma}{\alpha_2 - 1} \cdot \left(\frac{dm_{O_2}}{dr} \right)_f \cdot \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = \frac{m_{O_2,f}}{\alpha_2 - 1}$$

.....

Retornando a equação (24), e adicionando as últimas deduções e considerações, conclui-se que:

$$G_{TOT,0} \left(\frac{r_0^2}{\Gamma r_f} \right) = \ln \left(1 + \frac{m_{O_2,\infty} - m_{O_2,f}}{\alpha_2 - 1 + m_{O_2,f}} \right) \quad (25)$$

8.2 Parte 2: Conservação de Energia

Propriedade Conservativa

Volume de Controle 1

$$G_{TOT} \cdot \frac{d(m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 - m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0)}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d(m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 - m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0)}{dx} \right) = \dot{Q}_{lib} \quad (+)$$

$$G_{TOT} \cdot \frac{d(c_p \cdot T)}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d(c_p \cdot T)}{dx} \right) = \dot{Q}_{trans}$$

$$\dot{Q}_{lib} = -\dot{Q}_{trans}$$

$$G_{TOT} \cdot \frac{d}{dx} (m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 - m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 + c_p \cdot T) - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d}{dx} (m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 - m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 + c_p \cdot T) \right) = 0$$

Propriedade conservativa referente ao balanço térmico no volume de controle 1:

$$\phi_{T,1} = m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 - m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 + c_p \cdot T$$

Volume de Controle 2:

$$G_{TOT} \cdot \frac{d(m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0)}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d(m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0)}{dx} \right) = \dot{Q}_{lib} \quad (+)$$

$$G_{TOT} \cdot \frac{d(c_p \cdot T)}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d(c_p \cdot T)}{dx} \right) = \dot{Q}_{trans}$$

$$\dot{Q}_{lib} = -\dot{Q}_{trans}$$

$$G_{TOT} \cdot \frac{d}{dx} (m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T) - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \cdot \frac{d}{dx} (m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T) \right) = 0$$

Propriedade conservativa referente ao balanço térmico no volume de controle 2:

$$\phi_{T,2} = m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T$$

Balanco da variável conservativa – Volume de controle 1

Este desenvolvimento pode partir da equação (12), pois o balanço que a determinou, no volume de controle 1, é valido para qualquer propriedade conservativa. Portanto,

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0}{\Gamma} \cdot \left(1 - \frac{r_0}{r_f}\right) = \ln \left(1 + \frac{(\phi_0 - \phi_f)}{-\Gamma \cdot \left(\frac{d\phi}{dr}\right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right)$$

Inserindo a propriedade conservativa $\phi_{T,1} = m_{CO} h_{f,CO}^0 - m_{CO_2} h_{f,CO_2}^0 + c_p T$, resulta em:

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0}{\Gamma} \cdot \left(1 - \frac{r_0}{r_f}\right) = \ln \left(1 + \frac{m_{CO,0} h_{f,CO}^0 - m_{CO_2,0} h_{f,CO_2}^0 + c_p T_0 - m_{CO,f} h_{f,CO}^0 + m_{CO_2,f} h_{f,CO_2}^0 - c_p T_f}{-\Gamma \cdot \left(\frac{d}{dr}(m_{CO} h_{f,CO}^0 - m_{CO_2} h_{f,CO_2}^0 + c_p T)\right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right) \quad (26)$$

Desenvolvimento da expressão: $-\Gamma \cdot \left(\frac{d}{dr}(m_{CO} h_{f,CO}^0 - m_{CO_2} h_{f,CO_2}^0 + c_p T)\right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}$

Considerações: $m_{CO_2,0} = 0$; $m_{CO,f} = 0$

$$-\Gamma \cdot \left(\frac{dm_{CO}}{dr}\right)_0 = G_{CO,0} - G_{TOT,0} \cdot m_{CO,0} \quad \text{e} \quad G_{CO,0} = G_C \cdot (\alpha_2 + 1) = G_{TOT,0} \cdot (\alpha_2 + 1)$$

$$\Rightarrow -\Gamma \cdot \left(\frac{dm_{CO}}{dr}\right)_0 \cdot h_{f,CO}^0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = (\alpha_2 + 1 - m_{CO,0}) h_{f,CO}^0$$

.....

$$-\Gamma \cdot \left(\frac{dm_{CO_2}}{dr}\right)_0 = G_{CO_2,0} - G_{TOT,0} \cdot m_{CO_2,0} \quad \text{e} \quad G_{CO_2,0} = -G_C \cdot \alpha_2 = -G_{TOT,0} \cdot \alpha_2$$

$$-\Gamma \left(\frac{dm_{CO_2}}{dr} \right)_0 = -G_{TOT,0} \cdot \alpha_2 \quad \Rightarrow \quad \Gamma \left(\frac{dm_{CO_2}}{dr} \right)_0 \cdot h_{f,CO_2}^0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = \alpha_2 \cdot h_{f,CO_2}^0$$

.....

Número de Lewis é igual a relação entre a difusividade térmica α e a difusividade de massa D .

Consideração:

$$\text{Numero de Lewis (Le)} = \frac{k}{c_p \Gamma} = 1 \quad \Rightarrow \quad k = c_p \Gamma$$

$$-\Gamma \cdot c_p \left(\frac{dT}{dr} \right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = -k \left(\frac{dT}{dr} \right)_0 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = \frac{Q_0}{G_{TOT,0}}$$

.....

Substituindo estas deduções e considerações na equação (26), obtém-se:

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0}{\Gamma} \left(1 - \frac{r_0}{r_f} \right) = \ln \left(1 + \frac{m_{CO,0} \cdot h_{f,CO}^0 + m_{CO_2,f} \cdot h_{f,CO_2}^0 + c_p \cdot (T_0 - T_f)}{\frac{Q_0}{G_{TOT,0}} + (\alpha_2 + 1 - m_{CO,0}) h_{f,CO}^0 + \alpha_2 \cdot h_{f,CO_2}^0} \right) \quad (27)$$

Balanco da variável conservativa – Volume de controle 2

Este desenvolvimento pode partir da equação (14), pois o balanço que a determinou é válido para qualquer propriedade conservativa. Portanto,

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0^2}{\Gamma r_f} = \ln \left(1 + \frac{\phi_f - \phi_\infty}{-\Gamma \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_f \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right)$$

Inserindo a propriedade conservativa $\phi_{T,2} = m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T$, resulta em:

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0^2}{\Gamma \cdot r_f} = \ln \left(1 + \frac{m_{CO_2,f} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO,f} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T_f - m_{CO_2,\infty} \cdot h_{f,CO_2}^0 + m_{CO,\infty} \cdot h_{f,CO}^0 - c_p \cdot T_\infty}{-\Gamma \cdot \left(\frac{d}{dr} (m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T) \right)_f \cdot \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}}} \right) \quad (28)$$

Considerações: $m_{CO,f} = 0$; $m_{CO,\infty} = 0$; $m_{CO_2,\infty} = 0$

Desenvolvimento da expressão:

$$\begin{aligned} & -\Gamma \cdot \left(\frac{d}{dr} (m_{CO_2} \cdot h_{f,CO_2}^0 - m_{CO} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot T) \right)_f \cdot \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} \\ & \quad \dots \\ & -\Gamma \left(\frac{dm_{CO_2}}{dr} \right)_f = G_{CO_2,f} - G_{TOT,f} \cdot m_{CO_2,f} \\ & G_{CO_2,f} = -\alpha_2 \cdot G_{TOT,f} \quad e \quad G_{TOT,f} = G_{TOT,0} \cdot \left(\frac{r_0}{r_f} \right)^2 \\ & -\Gamma \cdot \left(\frac{dm_{CO_2}}{dr} \right)_f \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} \cdot \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot h_{f,CO_2}^0 = -(\alpha_2 + m_{CO_2,f}) h_{f,CO_2}^0 \\ & \quad \dots \\ & -\Gamma \cdot \left(\frac{dm_{CO}}{dr} \right)_f = G_{CO,f} - G_{TOT,f} \cdot m_{CO,f} \\ & m_{CO,f} = 0 \quad e \quad G_{CO,f} = (\alpha_2 + 1) G_{TOT,0} \cdot \left(\frac{r_0}{r_f} \right)^2 \\ & \Gamma \cdot \left(\frac{dm_{CO}}{dr} \right)_f \cdot h_{f,CO}^0 \cdot \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = -(\alpha_2 + 1) h_{f,CO}^0 \\ & \quad \dots \end{aligned}$$

Consideração: $Numero\ de\ Lewis\ (Le) = \frac{k}{c_p \cdot \Gamma} = 1 \Rightarrow k = c_p \cdot \Gamma$

$$-\Gamma \cdot c_p \cdot \left(\frac{dT}{dr} \right)_f \cdot \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = -k \cdot \left(\frac{dT}{dr} \right)_f \cdot \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{G_{TOT,0}} = \frac{Q_f}{G_{TOT,0}} \cdot \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2$$

.....

Substituindo estas deduções na equação (28), obtém-se:

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0^2}{\Gamma r_f} = \ln \left(1 + \frac{m_{CO_2,f} \cdot h_{f,CO_2}^0 + c_p \cdot (T_f - T_\infty)}{\frac{Q_f}{G_{TOT,0}} \cdot \left(\frac{r_f}{r_0} \right)^2 - (\alpha_2 + m_{CO_2,f}) h_{f,CO_2}^0 - (\alpha_2 + 1) h_{f,CO}^0} \right) \quad (29)$$

Análise dos termos referentes a transferência de calor

Transferência de calor por condução:

$$Q_0 = -k \cdot \left(\frac{T_f - T_0}{r_f - r_0} \right) \quad Q_f = -k \cdot \left(\frac{T_f - T_0}{r_f - r_0} + \frac{T_\infty - T_f}{r_\infty - r_f} \right)$$

Transferência de calor por radiação:

A idéia utilizada nesta modelagem é considerar o efeito da radiação em conjunto com a equação de condução. Desta forma,

$$Q_{rad} = \varepsilon \cdot \sigma \cdot (T_0^4 - T_\infty^4) = -k_{rad} \cdot \left(\frac{T_f - T_0}{r_f - r_0} \right) \Rightarrow k_{rad} = -\varepsilon \cdot \sigma \cdot (T_0^4 - T_\infty^4) \cdot \left(\frac{r_f - r_0}{T_f - T_0} \right)$$

O k_{rad} é adicionado ao k_{cond} para o cálculo de Q_0 .

8.3 Comportamento dos gases inertes

Considerações:

- ⇒ gases inertes serão representados apenas pelo nitrogênio.
- ⇒ Concentração em massa de nitrogênio em regiões relativamente distantes radialmente da partícula, simbolizada como $m_{N_2,\infty}$, será considerada igual à concentração média na atmosfera. Assim, $m_{N_2,\infty} = 76,7\%$.
- ⇒ O fluxo total de Nitrogênio em qualquer superfície do volume de controle é igual a zero: $G_{N_2,i} = 0$

$$G_{N_2,i} = m_{N_2,i} \cdot G_{TOT,i} - \Gamma \cdot \left(\frac{dm_{N_2}}{dr} \right)_i$$

$$\Rightarrow G_{TOT,i} \cdot m_{N_2,i} = \Gamma \cdot \left(\frac{dm_{N_2}}{dr} \right)_i \quad \rightarrow \quad G_{TOT,i} = G_{TOT,0} \cdot \left(\frac{r_0}{r_i} \right)^2$$

Volume de Controle 1

$$\int_{r_0}^{r_f} G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \frac{dr}{r^2} = \int_{m_{N_2,0}}^{m_{N_2,f}} \Gamma \cdot \frac{dm_{N_2}}{m_{N_2}} \quad \Rightarrow \quad -G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \left(\frac{1}{r_f} - \frac{1}{r_0} \right) = \Gamma \cdot \ln \left(\frac{m_{N_2,f}}{m_{N_2,0}} \right) \quad (30)$$

Volume de Controle 2

$$\int_{r_f}^{r_\infty} G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \frac{dr}{r^2} = \int_{m_{N_2,f}}^{m_{N_2,\infty}} \Gamma \cdot \frac{dm_{N_2}}{m_{N_2}} \quad \Rightarrow \quad G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \frac{1}{r_f} = \Gamma \cdot \ln \left(\frac{m_{N_2,\infty}}{m_{N_2,f}} \right) \quad (31)$$

9. O modelo

Equações que governam o modelo:

Estágio 1 – Modelo Simples

$$\frac{G_{TOT,0} r_0}{\Gamma} = \ln \left(1 + \frac{m_{O_2,\infty}}{\alpha_0} \right)$$

$$\frac{G_{TOT,0} r_0}{\Gamma} = \ln \left(1 + \frac{m_{CO_2,0} h_{f,CO_2}^0 + c_p T_0 - c_p T_\infty}{(\alpha_0 + 1 - m_{CO_2,0}) h_{f,CO_2}^0 + \frac{Q_0}{G_{TOT,0}}} \right)$$

$$G_{TOT,0} r_0 = \Gamma \cdot \ln \left(\frac{m_{N_2,\infty}}{m_{N_2,0}} \right)$$

$$m_{CO_2,0} = 1 - m_{N_2,0}$$

Variáveis: $G_{TOT,0}$; T_0 ; $m_{CO_2,0}$; $m_{N_2,0}$

Estágio 2 – Modelo Composto

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0}{\Gamma} \cdot \left(1 - \frac{r_0}{r_f}\right) = \ln \left(1 + \frac{m_{O_2,f}}{\alpha_1}\right)$$

$$G_{TOT,0} \cdot \left(\frac{r_0^2}{\Gamma r_f}\right) = \ln \left(1 + \frac{m_{O_2,\infty} - m_{O_2,f}}{2\alpha_1 + m_{O_2,f}}\right)$$

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0}{\Gamma} \cdot \left(1 - \frac{r_0}{r_f}\right) = \ln \left(1 + \frac{m_{CO,0} \cdot h_{f,CO}^0 + c_p \cdot (T_0 - T_f)}{\frac{Q_0}{G_{TOT,0}} + (\alpha + 1 - m_{CO,0}) h_{f,CO}^0}\right)$$

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0^2}{\Gamma r_f} = \ln \left(1 + \frac{m_{CO_2,f} \cdot h_{f,CO_2}^0 + c_p \cdot (T_f - T_\infty)}{\frac{Q_f}{G_{TOT,0}} \cdot \left(\frac{r_f}{r_0}\right)^2 - m_{CO_2,f} \cdot h_{f,CO_2}^0 - (\alpha_1 + 1) h_{f,CO}^0}\right)$$

$$G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \left(\frac{1}{r_f} - \frac{1}{r_0}\right) = -\Gamma \cdot \ln \left(\frac{m_{N_2,f}}{m_{N_2,0}}\right)$$

$$G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \frac{1}{r_f} = \Gamma \cdot \ln \left(\frac{m_{N_2,\infty}}{m_{N_2,f}}\right)$$

$$m_{CO,0} = 1 - m_{N_2,0}$$

$$m_{O_2,f} + m_{CO_2,f} = 1 - m_{N_2,f}$$

Variáveis: $G_{TOT,0}$; r_f ; $m_{O_2,f}$; T_0 ; T_f ; $m_{CO,0}$; $m_{CO_2,f}$; $m_{N_2,f}$; $m_{N_2,0}$

Estágio 3 – Modelo Composto

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0}{\Gamma} \cdot \left(1 - \frac{r_0}{r_f}\right) = \ln \left(1 + \frac{m_{CO_2,f}}{\alpha_2}\right)$$

$$G_{TOT,0} \cdot \left(\frac{r_0^2}{\Gamma r_f}\right) = \ln \left(1 + \frac{m_{O_2,\infty} - m_{O_2,f}}{\alpha_2 - 1 + m_{O_2,f}}\right)$$

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0}{\Gamma} \cdot \left(1 - \frac{r_0}{r_f}\right) = \ln \left(1 + \frac{m_{CO,0} \cdot h_{f,CO}^0 + m_{CO_2,f} \cdot h_{f,CO_2}^0 + c_p \cdot (T_0 - T_f)}{\frac{Q_0}{G_{TOT,0}} + (\alpha_2 + 1 - m_{CO,0}) h_{f,CO}^0 + \alpha_2 \cdot h_{f,CO_2}^0}\right)$$

$$G_{TOT,0} \cdot \frac{r_0^2}{\Gamma r_f} = \ln \left(1 + \frac{m_{CO_2,f} \cdot h_{f,CO_2}^0 + c_p \cdot (T_f - T_\infty)}{\frac{Q_f}{G_{TOT,0}} \cdot \left(\frac{r_f}{r_0}\right)^2 - (\alpha_2 + m_{CO_2,f}) h_{f,CO_2}^0 - (\alpha_2 + 1) h_{f,CO}^0}\right)$$

$$G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \left(\frac{1}{r_f} - \frac{1}{r_0}\right) = -\Gamma \cdot \ln \left(\frac{m_{N_2,f}}{m_{N_2,0}}\right)$$

$$G_{TOT,0} \cdot r_0^2 \cdot \frac{1}{r_f} = \Gamma \cdot \ln \left(\frac{m_{N_2,\infty}}{m_{N_2,f}}\right)$$

$$m_{CO,0} = 1 - m_{N_2,0}$$

$$m_{O_2,f} + m_{CO_2,f} = 1 - m_{N_2,f}$$

Variáveis: $G_{TOT,0}$; r_f ; $m_{CO_2,f}$; T_0 ; T_f ; $m_{CO,0}$; $m_{O_2,f}$; $m_{N_2,f}$; $m_{N_2,0}$

Tempo de Queima

$$\frac{dr_0}{dt} = - \frac{G_{TOT,0}}{\rho_C}$$

10. Programação do modelo

Estrutura da Programação:

O primeiro estágio do modelo é representado por 4 equações a 4 incógnitas, contando com uma equação diferencial que permitirá acompanhar a partícula durante a combustão.

O segundo e terceiro estágios são representados, cada um, por 8 equações a 9 incógnitas, contando com uma equação diferencial que permitirá acompanhar a partícula durante a combustão.

Para conseguir solucionar os sistemas de equações, a idéia de construção do programa é a seguinte:

O programa será dividido em 5 sub-programas, os quais seguirão certa ordem de execução.

Sub-programa 1:

Entrando com valores do raio inicial da partícula e da temperatura média da sua vizinhança, o primeiro sub-programa, referente ao modelo do 1º estágio, simulará a queima da partícula em função do tempo. A cada intervalo de tempo de iteração, será obtido como saída, os valores das variáveis do sistema.

A execução deste sub-programa será interrompida quando a temperatura da partícula atingir um valor especificado experimentalmente como um limitante a consideração de apenas uma reação de combustão. Ao ser interrompido, o sub-programa apresentará como saídas, o tempo de queima percorrido e o raio final da partícula. Entretanto, se o raio da partícula atingir um valor que simboliza a extinção da partícula, a simulação estará encerrada e o programa apresentará o tempo total de queima.

Sub-programa 2:

A temperatura e o raio da partícula serão as entradas do próximo sub-programa, o qual representará o modelo do 2º estágio. Neste sub-programa será executada apenas a primeira iteração do sistema de equações do modelo. O objetivo deste sub-programa é obter o valor do raio da chama. Além deste, serão obtidos como saída, todas as variáveis do sistema.

Sub-programa 3:

As entradas para o terceiro sub-programa serão a relação entre o raio da chama e o raio da partícula, e as demais variáveis obtidas como saída do sub-programa anterior. Neste sub-programa, a temperatura da partícula passa a ser uma incógnita. Assim, será simulado, segundo o modelo do estágio 2, a queima da partícula em função do tempo, e a cada intervalo de tempo de iteração, os valores das variáveis do sistema serão obtidos como saída.

A execução do sub-programa será interrompida quando a temperatura da superfície atingir um valor especificado experimentalmente como limite. Este é o limite para que se possa considerar o oxigênio como oxidante do carbono na superfície da partícula. Ao ser interrompido, o sub-programa apresentará como saídas, o tempo de queima percorrido e o raio final da partícula. Entretanto, se o raio da partícula atingir um valor, que simboliza a extinção da partícula, a simulação estará encerrada e o programa apresentará o tempo total de queima.

Sub-programa 4:

Os valores finais de temperatura e raio da partícula serão as entradas do próximo sub-programa. Este sub programa representará o modelo do 3º estágio, mas será executada apenas a primeira iteração do sistema de equações do modelo. O objetivo deste sub-programa é obter o valor do raio da chama. Além deste, serão obtidos como saída, todas as variáveis do sistema.

Sub-programa 5:

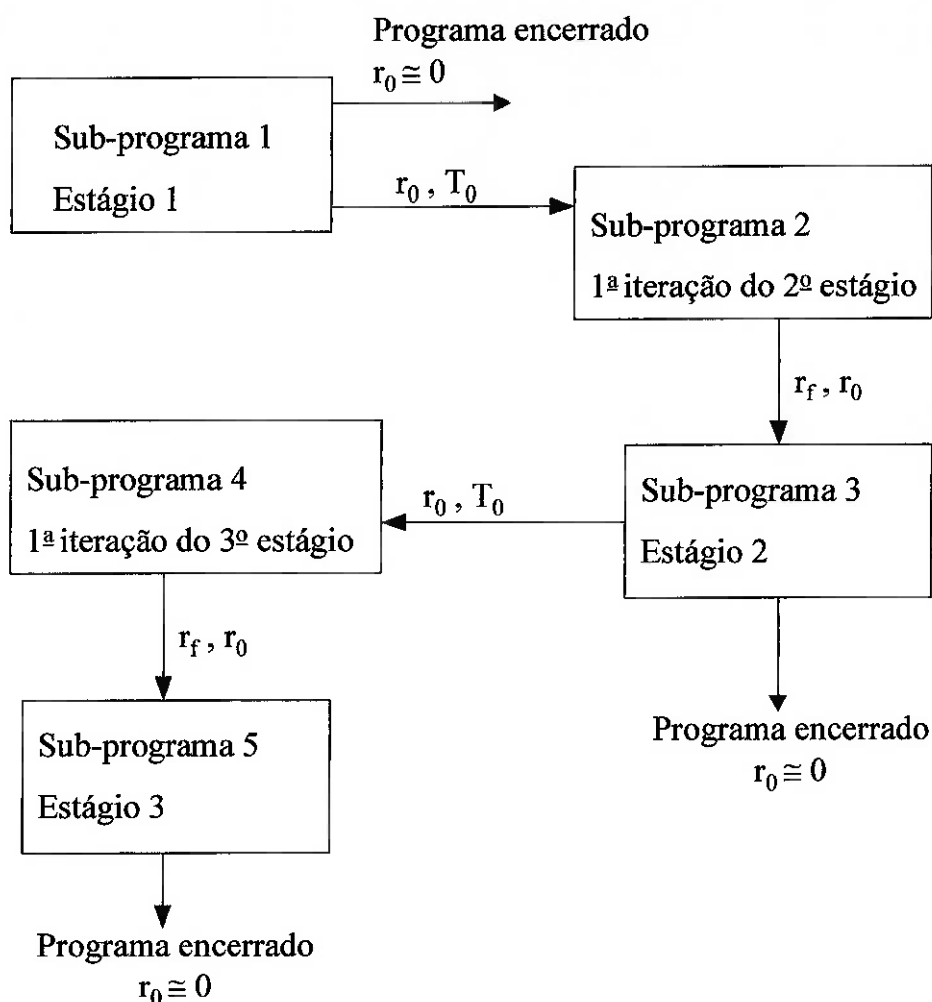
As entradas para o quinto sub-programa serão a relação entre o raio da chama e o raio da partícula, e as demais variáveis obtidas como saída do sub-programa anterior. Neste sub-programa, a temperatura da partícula passa a ser uma das incógnitas. Assim, será simulado, segundo o modelo do 3º estágio, a queima da partícula em função do tempo, e a cada intervalo de tempo de iteração, os valores das variáveis do sistema serão obtidos como saída.

A execução do programa será interrompida quando o raio da partícula atingir um valor, que simbolizará a extinção da partícula. Portanto a simulação estará encerrada e o programa apresentará o tempo total de queima.

Com as saídas parciais no decorrer de toda a simulação, pode-se traçar gráficos com as distribuições de concentrações e temperaturas a cada intervalo de tempo, e assim, realmente contar a história da partícula.

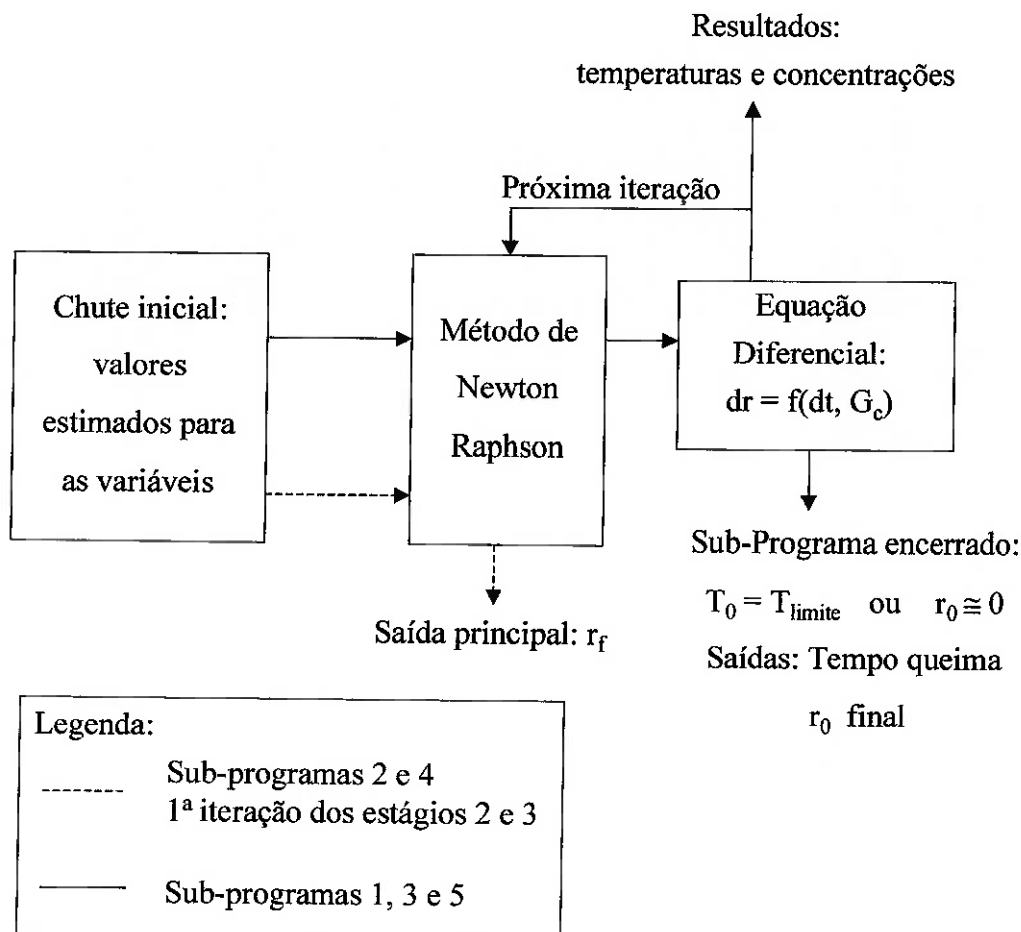
Nota-se, no raciocínio apresentado, que foi feita a hipótese simplificadora de que a relação entre o raio da chama e o raio da partícula não se altera em função do tempo, dentro dos estágios 2 e 3.

Desenho esquemático com a estrutura do programa:



Para a programação, ou seja, para a resolução do sistema de equações de cada modelo, foram utilizados os métodos numéricos de Newton Raphson e de Gauss Seidel.

Desenho esquemático da estrutura dos sub-programas:



Infelizmente, encontrou-se dificuldades na execução do programa. A complicação foi o fato das variáveis estarem dentro de logaritmos. Isto torna a escolha da estimativa inicial muito delicada, pois há grande tendência de erro de domínio.

Para evitar o erro de domínio, utilizou-se a tática de substituição do valor do logaritmo por um número inteiro quando o logaritmando fosse um número menor ou igual a zero. Foram feitas tentativas com este número de substituição variando de -10000 a $+10000$ com passo aritmético de 500. A idéia era evitar o erro de domínio e jogar o procedimento de resolução para outra região de valores, e com isso acertar a convergência. Porém, o método de Newton Raphson não convergia ou convergia para uma solução correta matematicamente, mas incoerente fisicamente.

Foram experimentados varios índices de relaxação para o método de Newton Raphson, mas mesmo assim, não se conseguiu solucionar o problema.

Uma outra tentativa foi resolver o sistema de equações no EES (Engineering Equation Solver), para uma análise comparativa. Porém ocorria erro de domínio, por mais que se alterasse os limites de convergência das variáveis.

O EES utiliza um método de Newton Raphson modificado para a resolução de sistemas de equação.

Concluindo, não se conseguiu simular o modelo utilizando para a programação o método de Newton Raphson.

Em anexo, será apresentado como exemplo, sub-programas 2 e 3 realizados para o 2º estágio da combustão. Não estão convergindo, mas podem ser úteis para uma possível continuação do trabalho.

11. Comentários finais

Com a constante preocupação de se apresentar claramente todas as hipóteses simplificadoras e restrições consideradas na modelagem, foi construido um modelo para a combustão de uma partícula sólida, mais especificamente de carvão.

Para a utilização de qualquer modelo deve-se avaliar cuidadosamente todas as considerações utilizadas no seu desenvolvimento. Neste caso complexo da combustão de partículas sólidas, o modelo obtido servirá para uma análise inicial do processo, trazendo maior familiaridade com as variáveis envolvidas, relações e comportamentos importantes.

Na realidade a melhor forma de se representar o fenômeno físico real da combustão de partículas sólidas seria através de uma modelagem que unisse análise teórica e expressões empíricas. Este trabalho teve um enfoque teórico e a vivência experimental foi aplicada apenas nas considerações, hipóteses simplificadoras e para especificar as principais etapas que o processo pode apresentar.

Naturalmente, o resultado deste trabalho deve ser aprimorado. Houve um avanço significativo, mas ainda muito limitado dentro da amplitude do campo a ser explorado e da complexidade do assunto.

Segundo a visão do autor, os próximos passos para a continuação do estudo do tema seriam:

- Resolver a problemática da programação, investindo mais em modificações sobre os métodos numéricos já experimentados ou partindo para outras alternativas, outros métodos.
- Redução das hipóteses simplificadoras e restrições é obviamente o objetivo de qualquer trabalho futuro. Serão citados alguns exemplos:
 - Incluir o resultado da cinética química para ampliar o campo de atuação do modelo;
 - Utilizar mais dados experimentais para poder especificar melhor as etapas do fenômeno combustão;
 - Aumentar o número de volumes de controle no desenvolvimento do modelo;
 - Considerar as etapas de vaporização e volatilização da partícula sólida;
 - Considerar a influência e comportamento da nuvem de partículas, ou seja, a interação entre elas;
 - Introduzir expressões empíricas ao modelo;
 - Etc.

Para finalizar, é importante comentar a transparência com que se preocupou desenvolver a modelagem. Pode-se dizer que o modelo construído neste trabalho é limitado frente a complexidade do fenômeno físico, mas é fisicamente, quimicamente e matematicamente coerente.

12. Bibliografia

- S. R. Turns, *An Introduction to Combustion*, McGraw-Hill, Inc., 1996.
- F. P. Incropera, D. P. DeWitt, *Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa*, Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 1998.
- F. A. Willians, *Combustion Theory*, B. Cummings Pub., 1985.
- K. Kuo, *Principles of Combustion*, Wiley, 1987.
- R. E. Sonntag, C. Borgnakke e G. J. Van Wylen, *Fundamentals of Thermodynamics*, John Wiley & Sons, 1998.
- R. B. Keey, *Drying – Principles and Practice*, Pergamon Press, 1972.
- D. B. Spalding, *The stability of steady exothermic chemical reactions in simple non-adiabatic systems*, Paper, 1959.
- S. Chapra, R. Canale, *Numerical Methods for Engineers*, McGraw-Hill, Inc.
- A. Humes, I. Melo, L. Yoshida, W. Martins, *Noções de Cálculo Numérico*, McGraw-Hill do Brasil Ltda., 1984.
- C. Greco, *Combustion Optimisation*, Word Cement (Periódico), April 2000.

13. Anexo

Nas páginas seguintes serão apresentados os códigos dos sub-programas 2 e 3, os quais representam o 2º estágio do modelo.

Os códigos dos outros sub-programas são similares.

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>
void main (void) {
    FILE * arq;
    double F, d[10][10], x[10], y[10], f[10], rp, To, R, ro, D, L, a, mo2i, mn2i,
    K1, K2, K3, K4, K5, K6, K7, K8, hfco, hfco2, c, Ti, ri, err, e, dx[10], M, k;
    int i, cont, N;
    arq = fopen ("a:tfl.xls", "w");
    /*Estimativas*/
    x[0]=0.0002; /*G*/
    x[1]=0.15; /*Concentracao de oxigenio na chama*/
    x[2]=0.01; /*Raio da chama*/
    x[3]=1200; /*Temperatura na chama*/
    x[4]=0.3; /*Concentracao de CO na superficie da partícula*/
    x[5]=0.1; /*Concentracao de CO2 na chama*/
    x[6]=0.75; /*Concentracao de N2 na chama*/
    x[7]=0.7; /*Concentracao de N2 na superficie da partícula*/
    cont=0;
    rp=0.0002; /*raio da partícula*/
    ro=0.2; /*densidade média da mistura gasosa*/
    D=0.00025; /*difusividade média da mistura gasosa*/
    L=ro*D;
    a=1.333; /*relação entre a massa de oxidante e a massa de combustível
    consumidos na superfície da partícula*/
    mo2i=0.233; /*concentração mássica média de oxigênio na atmosfera*/
    mn2i=0.767; /*concentração mássica média de nitrogênio na atmosfera*/
    k=0.11; /*condutividade média da mistura gasosa*/
    hfco=-3947390; /*entalpia de formação de CO*/
    hfco2=-8943680; /*entalpia de formação de CO2*/
    c=1250; /*calor específico médio da mistura gasosa*/
    To=800; /*temperatura da superfície da partícula*/
    Ti=1200; /*temperatura ao longe*/
    ri=1; /*valor que simboliza o raio tendendo ao infinito*/
    F=-1000; /*termo de ajuste dos logaritmos*/
    N=0;

    /*Newton Raphson*/
    do {
        if (N==100){
            F=F+0.5*F;
            N=0;
        }
        for (i=0; i<8; i++){
            x[i]=x[i]-dx[i]*0.3;
        }
        N=N+1;
        R=x[2]/rp;
        K1=(a+1)*hfco+c*To-c*x[3]+(k*To)/(rp*(R-1)*x[0])-(k*x[3])/(rp*(R-1)*x[0]);
        K2=(a+1)*hfco-x[4]*hfco+(k*To)/(rp*(R-1)*x[0])-(k*x[3])/(rp*(R-1)*x[0]);
        K3=-k*R*R*((x[3]-To)/(x[0]*rp*(R-1))+(Ti-x[3])/(x[0]*(ri-R*rp)));
        K4=-k*R*R*((x[3]-To)/(x[0]*rp*(R-1))+(Ti-x[3])/(x[0]*(ri-R*rp)));
        K5=-k*R*R*((x[3]-To)/(x[0]*rp*(R-1))+(Ti-x[3])/(x[0]*(ri-R*rp)));
        K6=-k*R*R*((x[3]-To)/(x[0]*rp*(R-1))+(Ti-x[3])/(x[0]*(ri-R*rp)));
        K7=-k*R*R*((x[3]-To)/(x[0]*rp*(R-1))+(Ti-x[3])/(x[0]*(ri-R*rp)));
        K8=-k*R*R*((x[3]-To)/(x[0]*rp*(R-1))+(Ti-x[3])/(x[0]*(ri-R*rp)));
        d[0][0]=rp/L-rp/(L*R);
        d[0][1]=-1/(a+x[1]);
        d[0][2]=x[0]*rp*rp/(L*x[2]*x[2]);
        d[0][3]=d[0][4]=d[0][5]=d[0][6]=d[0][7]=0;
        d[1][0]=rp/(L*R);
        d[1][1]=1/(2*a+x[1]);
        d[1][2]=-x[0]*rp*rp/(L*x[2]*x[2]);
        d[1][3]=d[1][4]=d[1][5]=d[1][6]=d[1][7]=0;
        d[2][0]=rp/L-rp/(L*R)-((k*(x[3]-To))/(rp*(R-1)*x[0]*x[0]*K1))
        +((k*(x[3]-To))/(rp*(R-1)*x[0]*x[0]*K2));
        d[2][2]=x[0]*rp*rp/(L*x[2]*x[2])-k*(x[3]-To)/(x[0]*K1*(x[2]*x[2]-2*x[2]
        *rp+rp*rp))+k*(x[3]-To)/(x[0]*K2*(x[2]*x[2]-2*x[2]*rp+rp*rp));
        d[2][3]=c/K1+k/(x[0]*rp*(R-1)*K1)-k/(x[0]*rp*(R-1)*K2);
        d[2][4]=-hfco/K2;
        d[2][1]=d[2][5]=d[2][6]=d[2][7]=0;
    } while (F>0.0001);
}
```



```

d[3][0]=rp/(L*R)-(k*R*R/(K3*x[0]*x[0]))*((x[3]-To)/(rp*(R-1))+(Ti-x[3])
/(ri-R*rp))+(k*R*R/(K4*x[0]*x[0]))*((x[3]-To)/(rp*(R-1))+(Ti-x[3])
/(ri-R*rp));
d[3][2]=-x[0]*rp*rp/(L*x[2]*x[2])-k*(x[3]-To)*x[2]*(2*rp-x[2])/(K3*x[0]
*rp*rp*(x[2]*x[2]-2*x[2]*rp+rp*rp))-k*(Ti-x[3])*x[2]*(-2*ri+x[2])
/(K3*x[0]*rp*rp*(ri*ri-2*ri*x[2]+x[2]*x[2]))+k*(x[3]-To)*x[2]
*(2*rp-x[2])/(K4*x[0]*rp*rp*(x[2]*x[2]-2*x[2]*rp+rp*rp))+k*(Ti-x[3])
*x[2]*(-2*ri+x[2])/(K4*x[0]*rp*rp*(ri*ri-2*ri*x[2]+x[2]*x[2]));
d[3][3]=-c/K3+k*R*R/(x[0]*rp*(R-1))*(1/K3-1/K4)+k*R*R/(x[0]*(ri-R*rp))
*(1/K4-1/K3);
d[3][5]=-hfco2/K4;
d[3][1]=d[3][4]=d[3][6]=d[3][7]=0;
d[4][0]=rp/(R*L)-rp/L;
d[4][6]=1/x[6];
d[4][7]=-1/x[7];
d[4][2]=-x[0]*rp*rp/(L*x[2]*x[2]);
d[4][1]=d[4][3]=d[4][4]=d[4][5]=0;
d[5][0]=rp/(L*R);
d[5][6]=1/x[6];
d[5][2]=-x[0]*rp*rp/(L*x[2]*x[2]);
d[5][1]=d[5][3]=d[5][4]=d[5][5]=d[5][7]=0;
d[6][4]=d[6][7]=1;
d[6][0]=d[6][1]=d[6][2]=d[6][3]=d[6][5]=d[6][6]=0;
d[7][1]=d[7][5]=d[7][6]=1;
d[7][0]=d[7][2]=d[7][3]=d[7][4]=d[7][7]=0;
K5=1+x[1]/a;
K6=1+(mo2i-x[1])/(2*a+x[1]);
K7=x[6]/x[7];
K8=mn2i/x[6];
if(cont==20){
    fprintf(arq, "%lf ", K1);
    fprintf(arq, "%lf ", K2);
    fprintf(arq, "%lf ", K3);
    fprintf(arq, "%lf ", K4);
    fprintf(arq, "%lf ", K5);
    fprintf(arq, "%lf ", K6);
    fprintf(arq, "%lf ", K7);
    fprintf(arq, "%lf ", K8);
    fprintf(arq, "\n");
}
if(K5>0)
    f[0]=x[0]*rp/L-x[0]*rp/(L*R)-log(K5);
else
    f[0]=x[0]*rp/L-x[0]*rp/(L*R)-F;
if(K6>0)
    f[1]=x[0]*rp/(L*R)-log(K6);
else
    f[1]=x[0]*rp/(L*R)-F;
if(K1>0 && K2>0)
    f[2]=x[0]*rp/L-x[0]*rp/(L*R)-log(K1)+log(K2);
if(K1>0 && K2<=0)
    f[2]=x[0]*rp/L-x[0]*rp/(L*R)-log(K1)+F;
if(K1<=0 && K2>0)
    f[2]=x[0]*rp/L-x[0]*rp/(L*R)-F+log(K2);
if(K1<=0 && K2<=0)
    f[2]=x[0]*rp/L-x[0]*rp/(L*R);
if(K3>0 && K4>0)
    f[3]=x[0]*rp/(L*R)-log(K3)+log(K4);
if(K3>0 && K4<=0)
    f[3]=x[0]*rp/(L*R)-log(K3)+F;
if(K3<=0 && K4>0)
    f[3]=x[0]*rp/(L*R)-F+log(K4);
if(K3<=0 && K4<=0)
    f[3]=x[0]*rp/(L*R);
if(K7>0)
    f[4]=x[0]*rp/(L*R)-x[0]*rp/L+log(K7);
else
    f[4]=x[0]*rp/(L*R)-x[0]*rp/L+0.1;
if(K8>0)
    f[5]=x[0]*rp/(L*R)-log(K8);
else

```

```

    f[5]=x[0]*rp/(L*R)-F;
    f[6]=x[4]-1+x[7];
    f[7]=x[1]+x[5]-1+x[6];
    for (i=0; i<8; i++){
        dx[i]=0;
        y[i]=0;
    }

    /*Gauss-Seidel*/
    do {
        for (i=0; i<8; i++){
            dx[i]=(1/d[i][i])*(f[i]-d[i][0]*dx[0]-d[i][1]*dx[1]-d[i][2]*dx[2]
            -d[i][3]*dx[3]-d[i][4]*dx[4]-d[i][5]*dx[5]-d[i][6]*dx[6]-d[i][7]
            *dx[7]+d[i][i]*dx[i]);
        }
        err=0;
        for (i=0; i<8; i++){
            if (dx[i]!=0)
                e=fabs((dx[i]-y[i])/dx[i]);
            if (y[i]!=0 && dx[i]==0)
                e=1;
            if (y[i]==0 && dx[i]==0)
                e=0;
            if (e>err)
                err=e;
        }
        for (i=0; i<8; i++){
            y[i]=dx[i];
        }
    } while (err>0.01);
    M=dx[0]/x[0];
    for (i=1; i<8; i++){
        if (fabs(dx[i]/x[i])>M)
            M=fabs(dx[i]/x[i]);
    }
    if (cont==100)
        cont=0;
    cont=cont+1;
} while (M>0.05) || (x[1]>1) || (x[4]>1) || (x[5]>1) || (x[6]>1) || (x[7]>1));
fprintf(arq, "G    mO2,f To Tf mCO,o mCO2,f    mN2,f mN2,o");
fprintf(arq, "\n");
for (i=0; i<8; i++){
    fprintf(arq, "%lf ", x[i]);
}
fclose (arq);
}

```

```

#include <stdio.h>
#include <math.h>
void main (void) {
    FILE * arq;
    double d[10][10], x[10], y[10], f[10], rp, R, ro, D, L, a, mo2i, mn2i, K1, K2
        , K3, K4, K5, K6, K7, K8, hfco, hfco2, c, Ti, ri, err, e, dx[10], dr
        , dt, roC, t, M, k;
    int i, cont;
    arq = fopen ("a:tfl.xls", "w");

    /*ESTIMATIVAS*/
    x[0]=0; /*G*/
    x[1]=0.15; /*Concentracao de oxigenio na chama*/
    x[2]=800; /*Temperatura na superficie da partícula*/
    x[3]=1300; /*Temperatura na chama*/
    x[4]=0.3; /*Concentracao de CO na superficie da partícula*/
    x[5]=0.1; /*Concentracao de CO2 na chama*/
    x[6]=0.75; /*Concentracao de N2 na chama*/
    x[7]=0.7; /*Concentracao de N2 na superficie da partícula*/
    cont=0;
    dt=0.008; /*intervalo de tempo de integração*/
    rp=0.0002; /*raio da partícula*/
    R=50; /*relação entre rf e r0 - Resultado do sub-programa anterior*/
    ro=0.2; /*densidade média da mistura gasosa*/
    roC=1600; /*densidade do carvão*/
    D=0.00025; /*difusividade média da mistura gasosa*/
    L=ro*D;
    a=1.333; /*relação entre a massa de oxidante e a massa de combustível
    consumidos na superfície da partícula*/
    mo2i=0.233; /*concentração mássica média de oxigênio na atmosfera*/
    mn2i=0.767; /*concentração mássica média de nitrogênio na atmosfera*/
    k=0.11; /*condutividade média da mistura de gases*/
    hfco=-3947393; /*entalpia de formação de CO*/
    hfco2=-8943682; /*entalpia de formação de CO2*/
    c=1250; /*calor específico da mistura gasosa*/
    Ti=1200; /*temperatura ao longe*/
    ri=1; /*valor que simboliza o raio detendo ao infinito*/
    do {
        for (i=0; i<8; i++){
            dx[i]=0;
        }

        /*Newton Raphson*/
        do {
            for (i=0; i<8; i++){
                x[i]=x[i]-dx[i]*0.2;
            }
            K1=(a+1)*hfco+c*x[2]-c*x[3]+(k*x[2])/ (rp*(R-1)*x[0])-(k*x[3])/ (rp*(R-1)
            *x[0]);
            K2=(a+1)*hfco-x[4]*hfco+(k*x[2])/ (rp*(R-1)*x[0])-(k*x[3])/ (rp*(R-1)
            *x[0]);
            K3=-k*R*R*((x[3]-x[2])/ (x[0]*rp*(R-1))+(Ti-x[3])/ (x[0]*(ri-R*rp)))
            -(a+1)*hfco+c*(x[3]-Ti);
            K4=-k*R*R*((x[3]-x[2])/ (x[0]*rp*(R-1))+(Ti-x[3])/ (x[0]*(ri-R*rp)))
            -(a+1)*hfco-x[5]*hfco2;
            fprintf(arq, "%lf ", K1);
            fprintf(arq, "%lf ", K2);
            fprintf(arq, "%lf ", K3);
            fprintf(arq, "%lf ", K4);
            d[0][0]=rp/L-rp/(L*R);
            d[0][1]=-1/(a+x[1]);
            d[0][2]=d[0][3]=d[0][4]=d[0][5]=d[0][6]=d[0][7]=0;
            d[1][0]=rp/(L*R);
            d[1][1]=1/(2*a+x[1]);
            d[1][2]=d[1][3]=d[1][4]=d[1][5]=d[1][6]=d[1][7]=0;
            d[2][0]=rp/L-rp/(L*R)-((k*(x[3]-x[2]))/(rp*(R-1)*x[0]*x[0]*K1))
            +((k*(x[3]-x[2]))/(rp*(R-1)*x[0]*x[0]*K2));
        } while (err>e);
    } while (cont<8);
}

```

```

d[2][2]=-k/(x[0]*rp*(R-1)*K1)-c/K1+k/(x[0]*rp*(R-1)*K2);
d[2][3]=c/K1+k/(x[0]*rp*(R-1)*K1)-k/(x[0]*rp*(R-1)*K2);
d[2][4]=-hfco/K2;
d[2][1]=d[2][5]=d[2][6]=d[2][7]=0;
d[3][0]=rp/(L*R)-(k*R*R/(K3*x[0]*x[0]))*(x[3]-x[2])/(rp*(R-1))
+(Ti-x[3])/(ri-R*rp)+(k*R*R/(K4*x[0]*x[0]))*(x[3]-x[2])
/(rp*(R-1))+(Ti-x[3])/(ri-R*rp);
d[3][2]=(k*R*R/(x[0]*rp*(R-1)))*(1/K4-1/K3);
d[3][3]=-c/K3+k*R*R/(x[0]*rp*(R-1))*(1/K3-1/K4)+k*R*R/(x[0]*(ri-R*rp))
*(1/K4-1/K3);
d[3][5]=-hfco2/K4;
d[3][1]=d[3][4]=d[3][6]=d[3][7]=0;
d[4][0]=rp/(R*L)-rp/L;
d[4][6]=1/x[6];
d[4][7]=-1/x[7];
d[4][1]=d[4][2]=d[4][3]=d[4][4]=d[4][5]=0;
d[5][0]=rp/(L*R);
d[5][6]=1/x[6];
d[5][1]=d[5][2]=d[5][3]=d[5][4]=d[5][5]=d[5][7]=0;
d[6][4]=d[6][7]=1;
d[6][0]=d[6][1]=d[6][2]=d[6][3]=d[6][5]=d[6][6]=0;
d[7][1]=d[7][5]=d[7][6]=1;
d[7][0]=d[7][2]=d[7][3]=d[7][4]=d[7][7]=0;
K5=1+x[1]/a;
K6=1+(mo2i-x[1])/(2*a+x[1]);
K7=x[6]/x[7];
K8=mn2i/x[6];
fprintf(arq, "%lf ", K5);
fprintf(arq, "%lf ", K6);
fprintf(arq, "%lf ", K7);
fprintf(arq, "%lf ", K8);
fprintf(arq, "\n");
if (K5>0)
    f[0]=x[0]*rp/L-x[0]*rp/(L*R)-log(K5);
else
    f[0]=x[0]*rp/L-x[0]*rp/(L*R);
if (K6>0)
    f[1]=x[0]*rp/(L*R)-log(K6);
else
    f[1]=x[0]*rp/(L*R);
if (K1>0 && K2>0)
    f[2]=x[0]*rp/L-x[0]*rp/(L*R)-log(K1)+log(K2);
if (K1>0 && K2<=0)
    f[2]=x[0]*rp/L-x[0]*rp/(L*R)-log(K1);
if (K1<=0 && K2>0)
    f[2]=x[0]*rp/L-x[0]*rp/(L*R)+log(K2);
if (K1<=0 && K2<=0)
    f[2]=x[0]*rp/L-x[0]*rp/(L*R);
if (K3>0 && K4>0)
    f[3]=x[0]*rp/(L*R)-log(K3)+log(K4);
if (K3>0 && K4<=0)
    f[3]=x[0]*rp/(L*R)-log(K3);
if (K3<=0 && K4>0)
    f[3]=x[0]*rp/(L*R)+log(K4);
if (K3<=0 && K4<=0)
    f[3]=x[0]*rp/(L*R);
if (K7>0)
    f[4]=x[0]*rp/(L*R)-x[0]*rp/L+log(K7);
else
    f[4]=x[0]*rp/(L*R)-x[0]*rp/L;
if (K8>0)
    f[5]=x[0]*rp/(L*R)-log(K8);
else
    f[5]=x[0]*rp/(L*R);
f[6]=x[4]-1+x[7];
f[7]=x[1]+x[5]-1+x[6];
for (i=0; i<8; i++){
    dx[i]=0;
    y[i]=0;
}

```

```

/*Gauss-Seidel*/
do {
    for (i=0; i<8; i++){
        dx[i]=(1/d[i][i])*(f[i]-d[i][0]*dx[0]-d[i][1]*dx[1]-d[i][2]*
        *dx[2]-d[i][3]*dx[3]-d[i][4]*dx[4]-d[i][5]*dx[5]-d[i][6]*dx[6]
        -d[i][7]*dx[7]+d[i][i]*dx[i]);
    }
    err=0;
    for (i=0; i<8; i++){
        if (dx[i]!=0)
            e=fabs((dx[i]-y[i])/dx[i]);
        if (y[i]!=0 && dx[i]==0)
            e=1;
        if (y[i]==0 && dx[i]==0)
            e=0;
        if (e>err)
            err=e;
    }
    for (i=0; i<8; i++){
        y[i]=dx[i];
    }
} while (err>0.01);
M=dx[0]/x[0];
for (i=1; i<8; i++){
    if (fabs(dx[i]/x[i])>M)
        M=fabs(dx[i]/x[i]);
}
} while (M>0.01);
if (cont==0){
    fprintf(arq, "G    mO2,f To Tf mCO,o mCO2,f    mN2,f mN2,o");
    fprintf(arq, "\n");
}
for (i=0; i<8; i++){
    fprintf(arq, "%lf ", x[i]);
}
fprintf(arq, "\n");
dr=-dt*x[0]/roC;
rp=rp+dr;
cont=cont+1;
}while (rp>0.000001 && x[3]<1870);
t=cont*dt;
fprintf(arq, "O tempo de queima da partícula é de %lf\n", t);
fprintf(arq, "A temperatura final na chama é de %lf\n", x[3]);
fclose (arq);
}

```