

(3)
AZ - 07

Universidade de São Paulo
Escola Politécnica
Departamento de Engenharia Mecânica

*Modelagem e Simulação da Evaporação e Combustão de
uma Gota de Combustível Líquido*

Elaborado por:
Ricardo José Barbosa

Orientador:
Euryale J. G. de Jesus Zerbini

São Paulo
1997

Agradecimentos

Ao meu orientador, Prof. Dr. Euryale J. G. de Jesus Zerbini, por ter me reconduzido ao caminho da engenharia, pelo constante incentivo e por ter me mostrado o quanto pode ser interessante o desenvolvimento de um trabalho sério na área de combustão. Além disso, pela amizade e pelos inúmeros "bate-papos", sempre muito proveitosos.

À toda equipe do Laboratório de Combustão Industrial do IPT, em especial ao Prof. Dr. Márcio L. de Souza-Santos, pelo apoio e pela oportunidade de acompanhar o trabalho de uma equipe que, como poucas, de fato desenvolve tecnologia na área de combustão.

Aos meus Pais, Kléber e Rosa, pelo constante apoio e incentivo e pelo esforço para que esse ponto fosse alcançado.

Ao meu irmão, Kléber José Barbosa, pelo apoio e amizade e, especialmente nesses últimos tempos, pela retaguarda que permitiu a realização deste trabalho.

À Gabriela, pela paciência e compreensão nesses anos difíceis, além da criteriosa revisão gramatical deste texto.

Ao Viriato, Maria e Alexandre, pelo apoio e suporte nesses longos anos de estudo.

Ao Eng. Roberto Barbosa, que apesar do nosso curto tempo de convivência, foi um dos primeiros a me mostrar o gosto de "sujar a mão de graxa", e que, em algum lugar deve estar contente com este resultado.

ÍNDICE

I. INTRODUÇÃO	2
I.1. O PROCESSO DE COMBUSTÃO	2
I.2. SISTEMAS DE NEBULIZAÇÃO	3
I.2.1. TIPOS DE NEBULIZADORES	4
I.2.2. PROCESSOS BÁSICOS NA NEBULIZAÇÃO	5
I.2.3. DISTRIBUIÇÃO DE TAMANHO DE GOTAS NUM SPRAY	6
I.3. MECANISMOS DE FORMAÇÃO DE POLUENTES	7
I.3.1. MATERIAL PARTICULADO	7
I.3.2. COMPOSTOS GASOSOS	10
II. SECAGEM	13
II.1 CONDIÇÕES DO PROCESSO E DISCUSSÃO DE HIPÓTESES ADOTADAS	14
II.2. RESUMO DAS HIPÓTESES ADOTADAS	17
II.3. MODELO CONDUTIVO PURO	18
II.4. MODELO FAETH	21
II.5. MODELO SPALDING	22
II.6. RESULTADOS E DADOS EXPERIMENTAIS	23
II.7. CRÍTICA	30
III. COMBUSTÃO	33
III.1. MODELO SPALDING	35
III.2. RESULTADOS E DADOS EXPERIMENTAIS	38
III.3. CRÍTICA	39
IV. CONCLUSÕES	40
V. BIBLIOGRAFIA	41
APÊNDICE 1: O PROGRAMA PARA EVAPORAÇÃO	43
APÊNDICE 2: O PROGRAMA PARA COMBUSTÃO	50

I. Introdução

O início da utilização da nebulização como forma de queimar líquidos de baixa volatilidade data da segunda metade do século passado e permanece, até hoje, como o método mais comum na aplicação de combustíveis líquidos, principalmente com a crescente aplicação, por questões de custo, de óleos combustíveis cada vez mais viscosos.

O processo de nebulização permite quebrar uma gota de 1 cm de diâmetro em 10^6 gotas de 100 μm , com consequente aumento de área superficial da ordem de 10^4 , o que facilita a difusão de vapor de combustível no meio, possibilitando taxas de reação muito mais elevadas.

A combustão de combustíveis líquidos através de spray é responsável por aproximadamente 25% (1988) do suprimento mundial de energia. É utilizada em sistemas como turbinas a gás, foguetes de propelente líquido, motores diesel, pós-queimadores (*afterburners*) de jatos militares e fornalhas industriais, entre outros. Isto deixa evidente a importância do estudo detalhado dos processos envolvidos, bem como a sua modelagem e simulação, como forma de prever o comportamento desses sistemas.

O presente trabalho pretende realizar uma análise crítica dos principais modelos dos processos de vaporização e combustão existentes, comparando as hipóteses e resultados de cada um, através de simulação, utilizando uma implementação em linguagem Pascal, e promovendo a validação dos resultados frente a dados experimentais encontrados na literatura. Toma-se, para isso, uma gota de líquido isolada, de onde se pretende tirar conclusões aplicáveis - pelo menos em uma primeira aproximação - aos processos em um spray.

I.1. O Processo de Combustão

Para a maioria das aplicações industriais, o processo de combustão é caracterizado por uma chama de difusão, onde combustível e oxidante encontram-se inicialmente separados. Na queima de uma gota de combustível líquido numa atmosfera oxidante, o combustível evapora da superfície da gota e se difunde até a frente de chama, enquanto o oxigênio se difunde do meio envolvente para a chama. Esta pode ser esférica ou não, dependendo da

situação da gota em relação ao meio. A deformação da chama é decorrente do movimento relativo entre a gota e o meio, bem como dos efeitos de convecção. Porém, como normalmente as gotas são tão pequenas quanto possível, a transferência de momento do meio para a gota faz com que as velocidades relativas sejam muito baixas. Dessa forma, a hipótese da chama possuir forma esférica torna-se aceitável.

A taxa de vaporização - da qual decorre a queima da gota - é determinada pela transferência de calor da frente de chama para a superfície da gota. Admite-se, aqui, que as reações químicas são muito rápidas, sendo a cinética química desprezível e a velocidade das reações é determinada pelas transferências de calor e massa. Dessa forma, a frente de chama possui espessura infinitesimal e as concentrações de combustível e oxidante na chama é zero. O chamado "modelo de duplo-filme" esquematiza a situação. Um filme separa a superfície da gota da frente de chama, e um segundo filme separa a chama da atmosfera.

No primeiro filme, calor é difundido da chama até a superfície da gota; e vapor de combustível é difundido da superfície até a zona de reação. No segundo, oxigênio se difunde da atmosfera circundante para a chama, enquanto os produtos de combustão caminham em sentido contrário.

O mais comum, na prática, é a ocorrência de uma chama turbulenta, na qual a mistura dos fluxos de ar e combustível não ocorre em uma posição fixa. Tem-se uma superposição das concentrações de ar e combustível, sendo a frente de chama mais espessa e com uma distribuição de temperaturas mais aberta.

I.2. Sistemas de Nebulização

A transformação de um volume de líquido em um *spray* de gotículas numa atmosfera gasosa é de fundamental importância em inúmeros processos industriais e em muitas outras aplicações, tais como a agricultura e a meteorologia. Os equipamentos que realizam este processo são chamados bocais ou "atomizadores". O processo de atomização - ou mais corretamente nebulização - consiste na desintegração de um jato de líquido pela sua própria energia cinética, submetendo-o à uma corrente de ar ou gás com altas velocidades relativas ou, ainda, como resultado da aplicação de energia mecânica, através de um equipamento dotado de rotação ou vibração.

Dada a natureza randômica do processo de nebulização, o spray resultante é usualmente caracterizado por uma larga faixa de diâmetros de gotas. Assim, o conhecimento dessa distribuição de tamanhos é de fundamental importância na avaliação dos processos, especialmente no que diz respeito aos cálculos de transferências de calor e massa entre o líquido disperso e a atmosfera circundante.

Não foi desenvolvido, no entanto, nenhum modelo teórico que descrevesse totalmente os processos hidro e aerodinâmicos envolvidos na desintegração de um jato num spray. Estão disponíveis apenas correlações empíricas, ainda muito deficientes, de modo que não se pode predizer com precisão as características dos sprays, tais como diâmetro médio das gotas e distribuição de tamanhos.

I.2.1. Tipos de Nebulizadores

A nebulização pode ser realizada de várias maneiras. Essencialmente, é necessário que haja uma alta velocidade relativa entre o líquido a ser atomizado e o meio envolvente. Alguns nebulizadores o fazem descarregando o líquido a alta velocidade numa atmosfera estagnante ou a baixa velocidade. Este é o caso dos nebulizadores por pressão e dos rotativos. Uma outra configuração é obtida, submetendo-se um fluxo de líquido de baixa velocidade a um escoamento de ar de altas velocidades. É o caso dos nebulizadores de duplo fluido.

Os bocais de nebulização podem produzir vários tipos de jatos: *full cone*, onde o spray forma um cone cheio; o *hollow cone*, onde o spray é caracterizado por uma seção anular, não havendo gotículas na região próxima ao eixo do bocal; e também um jato plano, na forma de leque ou abertos em 360°.

Os nebulizadores por pressão consistem geralmente de uma descarga de líquido a alta pressão, através de um orifício, convertendo a energia de pressão em energia cinética. Podem ser: de um simples orifício, orifício com câmara de *swirl*, *spill return* e *fan spray*.

Já os nebulizadores de duplo fluido podem ser de mistura interna ou externa, de acordo com a posição do contato entre os fluidos. Do ponto de vista da qualidade da nebulização, o de mistura interna consegue diâmetros de

gota inferiores, produzindo um spray mais fino. No caso de mistura externa, não há problemas de contato entre o fluido de nebulização e o combustível no interior do queimador, evitando-se que haja um início da reação de combustão ainda no interior do injetor. Porém, para que se atinja a mesma qualidade de nebulização, é necessária uma quantidade maior de fluido de nebulização. Há diferenças quanto à quantidade e velocidade do fluido de nebulização, podendo ser de pequena quantidade a altas velocidades (*air-assist*), ou de baixa velocidade com uma maior quantidade (*airblast*).

Além disso, há os nebulizadores rotativos, onde o líquido é descarregado no centro de um disco ou copo dotados de movimento de rotação, descarregando-o pela periferia a altas velocidades.

I.2.2. Processos Básicos na Nebulização

Basicamente, o que promove a quebra do líquido em gotas é a superação da influência da tensão superficial pela ação de forças internas e/ou externas. Na ausência dessas forças, a tensão superficial tende a fazer com que o líquido assuma a forma de esfera, uma vez que esta apresenta menor energia de superfície possível ($E_{\text{sup}} = \sigma \cdot S$). A viscosidade assume papel estabilizador, impondo restrições a qualquer modificação na geometria da gota. Por outro lado, as forças aerodinâmicas que agem na superfície do líquido colaboram para a desintegração através da desestabilização da massa líquida.

Uma solução rigorosa do processo de quebra da gota dependeria do conhecimento da distribuição de pressões externas sobre a superfície da gota. Essas pressões, no entanto, provocam deformações e, como consequência, quebra da gota e posterior alteração em sua distribuição de pressões, até que seja atingido o equilíbrio entre as forças aerodinâmicas e as forças internas, devido à tensão superficial e viscosidade. Do contrário, as deformações levarão a uma nova quebra.

Sob condições de equilíbrio, a pressão interna, em qualquer ponto da superfície, é igual à soma das pressões aerodinâmicas e as pressões devido à tensão superficial:

$$P_I = P_A + P_\sigma \quad (I)$$

e para uma gota esférica:

$$P_g = \frac{4\sigma}{D} \quad (\text{II})$$

onde D = Diâmetro da gota.

Dessa forma, a gota permanece estável se uma mudança na pressão do ar a qualquer ponto puder ser compensada por uma alteração correspondente em P_g , tal que P_l permaneça constante. Entretanto, se P_A é muito maior que P_g , então uma mudança significativa em P_A , devido ao escoamento, não poderá ser compensada por P_g de forma a manter P_l constante. Nessa situação, a pressão externa, P_A , poderá deformar a gota, de forma a reduzir P_g , provocando, assim, a quebra da gota. Pela equação II, verifica-se que para um diâmetro menor, P_g será maior, podendo ser suficiente para acomodar variações de P_A devido ao meio. Do contrário, divisões subsequentes irão ocorrer, até que P_g seja suficiente para manter P_l constante em todos os pontos da superfície. Quando essa condição é atingida, não há mais quebra.

Isto também leva a um conceito de tamanho crítico da gota. Para gotas de diâmetro pouco superior ao crítico, o tempo de quebra é crescente para diâmetros decrescentes, até que uma gota estável tenha tempo de quebra infinito ao atingir o diâmetro crítico. A influência da viscosidade neste processo é de restrição à deformação da gota, o que, portanto, provoca um aumento no tempo de quebra.

I.2.3. Distribuição de Tamanho de gotas num spray

A análise de sprays requer o conhecimento da distribuição de tamanhos de gota e velocidades proporcionadas pelo injetor. O processo de nebulização, entretanto, possui uma natureza randômica, o que complica bastante essa análise, já que envolve quebra primária do jato, quebra secundária, colisão e coalescência de gotas, resultando numa distribuição que deve ser analisada a partir de uma certa distância do bico injetor. Porém, a completa caracterização da distribuição de tamanhos e velocidade do spray é raramente disponível e é necessária a definição de grandezas médias que permitam aproximar o comportamento do spray.

Uma representação usual da distribuição de tamanhos de gotas é a definição de um tamanho médio, dos quais um dos mais utilizados é o Sauter

mean diameter (SMD), definido como o diâmetro da gota cuja razão volume/superfície é igual àquela de todo spray. Este tipo de análise é comumente utilizado para representar o tamanho do spray monodisperso equivalente, para uma aproximação no estudo dos processos de evaporação e combustão.

I.3. Mecanismos de Formação de Poluentes

Os principais poluentes formados durante o processo de combustão de líquidos nebulizados são material particulado - coque, fuligem, gotículas de combustível não queimado - e poluentes gasosos - CO, NO_x, SO_x, e vapores de hidrocarbonetos não queimados. A produção desses componentes depende de condições de operação e projeto dos equipamentos envolvidos. Além disso, a queima de qualquer combustível fóssil produz CO₂, responsável pelo chamado "efeito estufa".

Atualmente, grande esforço tem sido feito no sentido de se minimizar a emissão de poluentes, de forma a adequar os equipamentos e processos aos níveis de poluentes exigidos pela legislação.

A seguir serão discutidos de forma resumida os processos de formação dos principais poluentes produzidos na combustão de líquidos.

I.3.1. Material Particulado

Consiste basicamente de fuligem, coque e partículas de inorgânicos na forma de cinzas.

A fuligem é formada por reações na fase gasosa. Seu processo de formação consiste na aglomeração de alguns compostos formados na cadeia da reação de combustão, tais como o acetileno, que se polimeriza formando o polietileno, que, em conjunto com cadeias poliaromáticas, forma a partícula de fuligem. A sua forma final depende da composição do combustível, sua concentração de aromáticos e asfaltenos. As propriedades e a quantidade da fuligem emitida depende das condições de operação, do tempo de residência e da temperatura da câmara. A forma das partículas é aproximadamente esférica

e possui diâmetro médio na faixa de 200 a 400 Å, sendo constituídas basicamente por carbono e hidrogênio, na proporção de 9:1.

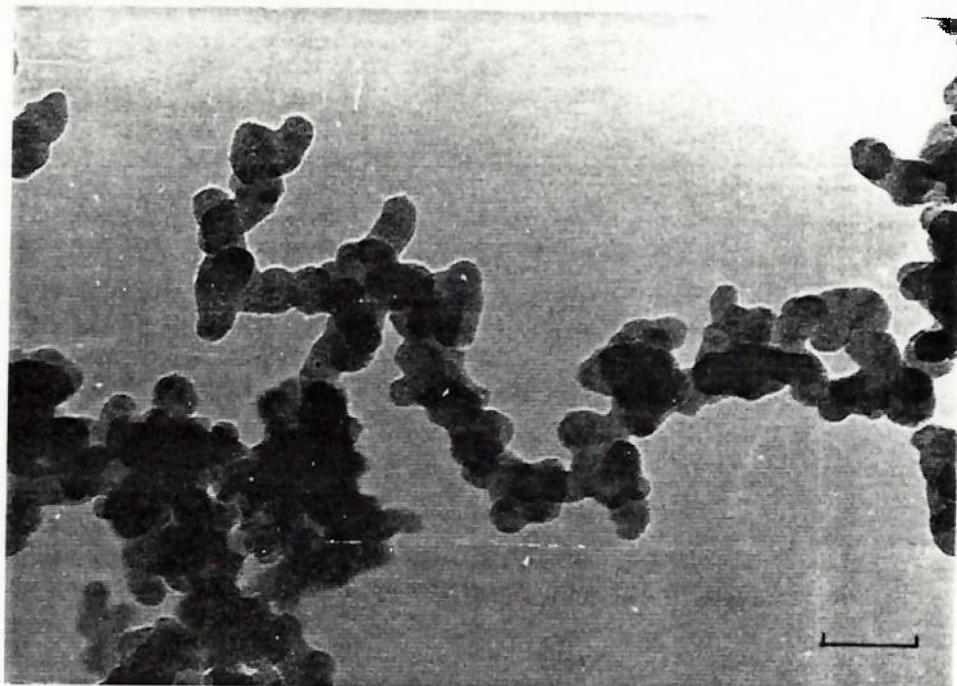


Figura I.1: Fotografia mostrando um aglomerado de partículas de fuligem , Williams [22]

A formação de fuligem pode ser interessante quando o processo requer transferência de calor por radiação da chama, uma vez que a fuligem possui alta emissividade e absorvidade em toda faixa espectral, ao contrário do CO₂ e do vapor d'água, que só emitem em determinados comprimentos de onda. Esse fato explica a coloração amarelada notada em chamas de difusão. Porém, quando emitida para o ambiente - fumaça preta - tem efeitos danosos, tanto para o meio ambiente, quanto do aspecto conservação de energia, uma vez que é constituída de material combustível. Além disso, pode conter hidrocarbonetos aromáticos policíclicos, de potencial carcinogênico.

Com relação ao coque, sua ocorrência está relacionada a óleos médios e pesados. No caso de combustíveis mais leves, a emissão de particulado está predominantemente relacionada à fuligem.

A partícula de coque é resultante do processo de devolatilização da gota, ou seja, das frações mais leves do combustível. Com a eliminação da parte leve do óleo, pelo fato das frações mais pesadas possuírem temperatura de ebulição mais alta, ocorre um aumento da temperatura da fase líquida, provocando a coqueificação do óleo, restando uma partícula sólida de carbono. A partir desse ponto, a reação de combustão passa a ser uma reação

gás-sólido, fortemente limitada pela velocidade de difusão dos gases no sólido. Dessa forma, ao final da câmara de combustão, as partículas que não foram totalmente consumidas serão emitidas na forma de particulado. Sua massa é normalmente em torno de 3% da massa inicial da gota, podendo, em alguns casos, ser superior a 10%. As dimensões da partícula emitida é função da composição do combustível, das condições de operação do sistema e do diâmetro das gotas de combustível produzidas pelo sistema de nebulização.

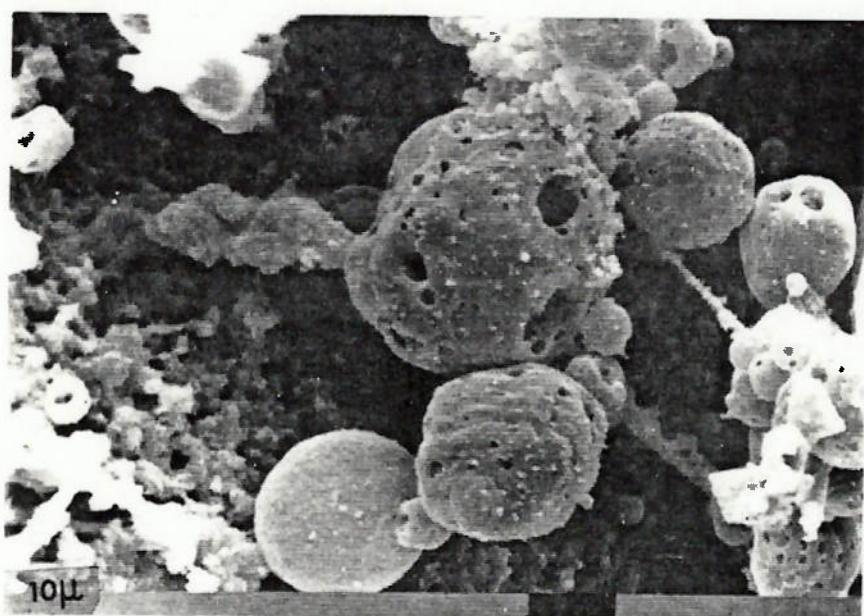


Figura I.2: Fotografia de partícula de coque , Williams [22]

Por último, consideram-se as cinzas. Constituem-se de componentes inorgânicos presentes no combustível e que não participam da reação de combustão. Os elementos mais comuns são sódio, vanádio, cálcio, magnésio, ferro, níquel e sílica. Parte desse material é concentrado e eliminado para o ambiente associado à partícula de coque. Porém, o principal prejuízo à operação dos equipamentos se deve à deposição das cinzas sobre superfícies de troca de calor, como em superaquecedores, sob a forma de óxidos, reduzindo o coeficiente de película, prejudicando o escoamento de gases e as trocas de calor. Esses óxidos, além disso, podem atuar como catalisadores nas reações envolvendo óxidos de enxofre, favorecendo a formação de SO₃ e contribuindo para a corrosão das partes do equipamento submetidas a altas temperaturas.

I.3.2. Compostos Gasosos

- Monóxido de Carbono

O monóxido de Carbono - CO - é encontrado nos produtos de combustão de todos os combustíveis carbonáceos. Sua concentração depende da temperatura e do excesso de ar. É formado pela rápida oxidação dos hidrocarbonetos pelo oxigênio na zona de reação e, em seguida e de forma mais lenta, oxidado a CO₂. Como essa segunda etapa é mais lenta, o escoamento pode levar os gases ainda não reagidos para uma região de temperatura mais baixa, mudando a condição de equilíbrio da reação, interrompendo-a e fazendo com que o CO seja lançado para a atmosfera junto com os gases de combustão. Observa-se que a concentração de CO nos gases de combustão de unidades pequenas é muito maior que para as grandes unidades, reflexo de que, nas últimas, o tempo de permanência na câmara de combustão é maior, permitindo que a reação ocorra de maneira mais completa.

- Óxidos de enxofre

Os combustíveis derivados de petróleo contêm, em sua maioria, compostos organo-sulfúricos, presentes na forma de sulfetos, dissulfetos ou compostos cíclicos. Sua natureza e concentração são dependentes da origem do óleo cru; maiores concentrações são encontradas nos óleos residuais.

Na combustão, os compostos de enxofre, que são termicamente instáveis, são rapidamente convertidos a SO₂ na zona da chama. A principal preocupação em relação ao SO₂ é quanto a formação de subprodutos, tais como o SO₃, que reage com o vapor de água, formando ácido sulfúrico, H₂SO₄, que ao ser eliminado para a atmosfera se torna um dos componentes da chuva ácida, causando grande prejuízo à saúde e ao meio ambiente. Além disso, pode se condensar nas partes onde ocorrem baixas temperaturas nos equipamentos, tais como economizadores e aquecedores de ar, provocando corrosão das partes metálicas.

O controle desse tipo de emissão se dá na tentativa de eliminar os compostos de enxofre do combustível ou em técnicas de remoção do SO_x dos gases de combustão.

- Óxidos de Nitrogênio

Durante o processo de combustão, uma parte do nitrogênio presente no ar ou no próprio combustível reage com o oxigênio, formando óxidos, NO (óxido nítrico) e NO₂ (dióxido de nitrogênio), representados por NO_x.

A formação do NO na combustão pode ocorrer de três formas: NO térmico, NO combustível e o *prompt*-NO.

Inicialmente, o NO térmico é formado nas regiões de altas temperaturas, pela reação do nitrogênio do ar com o oxigênio. A temperatura elevada faz com que o oxigênio molecular se dissocie em átomos muito reativos, que atacam o nitrogênio, formando o NO. Esse processo é conhecido também por mecanismo de Zeldovich.

Já o NO combustível é formado pela reação do oxigênio com compostos nitrogenados contidos no próprio combustível. Estes compostos sofrem decomposição térmica na zona de pré-aquecimento, resultando produtos de baixo peso molecular, tais como NH₃, HCN, CN, entre outros, que são oxidados posteriormente. A quantidade desses compostos convertida a NO é dependente, principalmente, do excesso de ar, sendo pouco dependente da temperatura. O teor de nitrogênio nos combustíveis fósseis varia desde 0,2% (em massa) para destilados leves, até 2% em frações asfálticas.

No caso do *Prompt NO* ou NO ativo, as reações que resultam na sua produção ocorrem na frente de chama, onde ocorrem a maior parte das reações de combustão. A reação consiste da combinação do nitrogênio molecular com radicais hidrocarbonados, tais como CH, C₂, C, etc, que geram produtos como os radicais CN e HCN, que posteriormente são oxidados a NO. Esse fato é comprovado por medidas experimentais mostrando altas concentrações de HCN próximo à frente de chama, e, ao se distanciar da mesma, uma queda na concentração de HCN associada a um aumento na concentração de NO, Vernhanini e Ushima [19]. Este tipo de reação ocorre somente com hidrocarbonetos e apresenta fraca dependência da temperatura.

Com relação ao NO₂, este normalmente apresenta concentrações muito inferiores ao NO. Sua formação se dá principalmente nas proximidades da frente de chama, sendo em seguida, porém, grande parte convertida a NO.

As principais formas de se reduzir as quantidades de NO_x emitidas são: a redução do teor de nitrogênio nas altas temperaturas, redução da

concentração de oxigênio nas altas temperaturas, redução das temperaturas de pico e redução do tempo de permanência dos gases a altas temperaturas. Além disso, podem-se aplicar processos de tratamento dos gases efluentes.

II. Secagem

A evaporação ou secagem ocorre em muitos processos importantes, tais como secagem de leite em pó, aplicações em de-superaquecedores de plantas de vapor; ademais é um pré-requisito básico para o processo de combustão de líquidos através da nebulização.

Durante a combustão num spray, as gotas, no período inicial, normalmente se evaporam numa mistura gasosa com pouca concentração de oxigênio. Sob estas condições, os efeitos de decomposição do combustível no campo do escoamento que envolve a gota é relativamente pequeno, e o processo pode ser aproximado por uma evaporação, na ausência de combustão.

Um esboço do processo de aquecimento e evaporação pode ser visualizado na figura II.1 abaixo, para a hipótese de uma gota de combustível injetada numa atmosfera de gás a altas temperaturas.

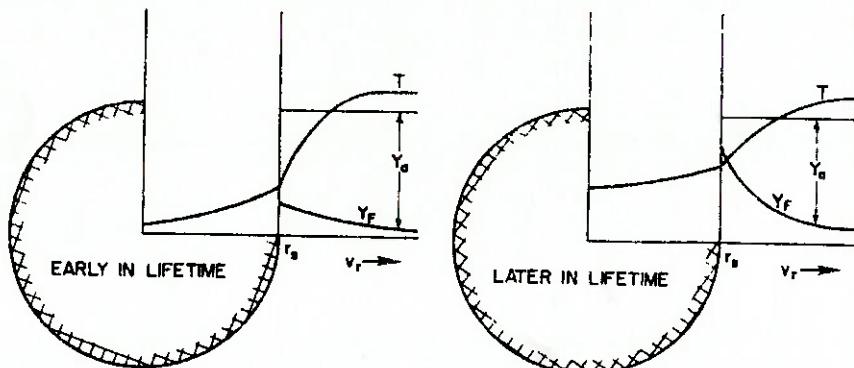


Figura II.1: Esboço do processo de aquecimento e vaporização de uma gota , Faeth [3]

Normalmente, nas temperaturas em que as gotas são injetadas na câmara, a concentração de vapor de combustível junto à superfície da gota é pequena e há pouca difusão de massa, devido ao pequeno gradiente de concentração. A gota é, então, aquecida. Geralmente, a gota não apresenta temperatura uniforme em seu interior, sendo que a máxima ocorre em sua superfície.

Com o aumento da temperatura, ocorre um aumento da concentração de vapor junto à superfície, devido ao equilíbrio de fases, o que provoca um aumento da transferência de massa do combustível para o meio envolvente. Disso decorrem dois fatos: uma fração crescente da energia que atinge a gota deve suprir a entalpia de vaporização do líquido; por outro lado, o fluxo de vapor de combustível, saindo da superfície da gota em direção ao ambiente, reduz a transferência de calor para a gota. Isso faz com que a taxa de aumento de temperatura da gota diminua, tornando-se uniforme para toda a fase líquida. Após algum tempo, é atingido um estágio no qual todo o calor que atinge a superfície da gota é utilizado para vaporizá-la, permanecendo a temperatura estabilizada, na chamada Temperatura de Bulbo Úmido. A partir desse ponto, se os efeitos de convecção natural e/ou forçada puderem ser desprezados, será observado um decréscimo linear de D^2 com o tempo.

$$\frac{dD^2}{dt} = -k$$

onde k é uma constante de vaporização, que é função das propriedades do líquido e das condições ambientes. Isso será verificado posteriormente pelos resultados da simulação.

II.1 Condições do processo e discussão de hipóteses adotadas

Realizam-se, a seguir, a apresentação e discussão de alguns aspectos envolvidos no processo de vaporização de um líquido.

Para combustíveis muito voláteis, a temperatura de injeção é, normalmente, próxima da T_{BU} ; e se pode admitir que, para este caso, as propriedades permanecem praticamente constantes durante todo o processo. Porém, há casos em que uma análise com propriedades variáveis é necessária, como aqui estudado, de forma a garantir um melhor resultado.

Inicialmente, eram utilizadas apenas variações de propriedades com a temperatura. Mais recentemente, concluiu-se que os efeitos da variação de concentrações das espécies envolvidas no cálculo das propriedades também eram importantes, sendo esses efeitos significativos, principalmente no caso de hidrocarbonetos pesados, que possuem propriedades muito distintas dos gases leves que geralmente compõem o ambiente de uma gota em vaporização.

Para analisar esses efeitos, no caso do presente trabalho, foram utilizadas temperaturas e frações em massa de referência tomadas na condição de filme, conforme as expressões abaixo.

$$T_R = T_S + \frac{1}{2}(T_\infty - T_S)$$

$$Y_{F_R} = Y_{F_s} + \frac{1}{2}(Y_{F_\infty} - Y_{F_s})$$

Foi testada, também, a regra de 1/3 proposta na literatura, Faeth [3], sendo que os resultados obtidos na simulação foram menos satisfatórios em relação aos dados experimentais.

Passa-se, agora, a discutir as condições da fronteira líquido-gás. Para que a solução do problema seja possível, é necessário que se conheça bem as condições de interface líquido-gás. São necessárias relações entre a temperatura do líquido e a concentração de combustível na fase gasosa adjacente à superfície, bem como estimativas do fluxo radial de massa do gás ambiente nesta posição. A pressões moderadas, onde a hipótese de fase gasosa quase-estática é válida, os gases possuem baixa solubilidade na fase líquida. A hipótese sugerida por Spalding, Spalding [16], para condição de insolubilidade é adotada como condição de contorno, resultando no fluxo de massa do gás ambiente ser nulo na superfície do líquido.

A relação entre temperatura do líquido e a concentração de vapor junto à superfície é obtida da pressão de vapor de equilíbrio, como função da temperatura. Para que isso seja válido, é necessária a hipótese de que a presença de outros gases junto à superfície não afete o equilíbrio líquido-vapor do combustível. Isso é válido para gases com baixa solubilidade na fase líquida e a pressões moderadas, ou seja, onde é possível utilizar o modelo de gás perfeito junto à superfície do líquido. Outra hipótese é que a existência de uma transferência de massa não afete significativamente a pressão de vapor para uma dada temperatura do líquido.

Esta hipótese implica que o processo de vaporização, representado por $F(l) \leftrightarrow F(g)$,

deva ter taxas de reação rápidas o bastante para que a remoção de moléculas por difusão seja pequena em comparação com a razão de troca entre as fases.

Estudos demonstram que a divergência do equilíbrio por influência das taxas de transferência de calor e massa é pequena para pressões próximas a 1 bar e temperaturas abaixo da T_{BU} .

A tensão superficial também influencia a condição de equilíbrio de fases, já que, como mostrado anteriormente, a pressão interna da gota é dada pela soma da pressão aerodinâmica com a pressão devida a tensão superficial. Esse efeito, entretanto, pode ser desprezado em condições de pressão superiores a 1 bar e diâmetro de gotas superior a 1 μm , que é o caso da maior parte dos sistemas de combustão.

Analisa-se, a seguir, os efeitos do gradiente radial de pressão. Modelos de evaporação com simetria esférica usualmente ignoram a equação da quantidade de movimento e admitem a pressão uniforme. Este é o caso dos modelos aqui apresentados. O escoamento radial, entretanto, causa um gradiente radial de pressão, já que a velocidade radial média cai com o distanciamento em relação à superfície. A pior situação possível ocorre durante a evaporação em "regime permanente" - à temperatura constante -, onde as velocidades radiais são maiores. Estudos demonstram, porém, que a pressão pode ser admitida constante para gotas maiores que 1 μm e pressões maiores que 1 bar, sem maiores prejuízos no resultado, Faeth [3].

Analisa-se, a seguir, a influência da transferência de calor por radiação. Estudos demonstram que hidrocarbonetos combustíveis típicos absorvem radiação principalmente na faixa em torno de 3,5 μm , sendo que a chama de um bico de bunsen estudado possui emissividade muito baixa nesta faixa, do que se pode concluir que em combustores onde não ocorrem chamas luminosas, como nas turbinas a gás, os combustíveis absorvem pequena energia radiativa das regiões de combustão, Faeth [3].

No caso de fornalhas industriais, são freqüentemente queimados óleos residuais, cuja chama possui grande potencial emissivo, devido à alta emissividade do material particulado formado, especialmente a fuligem. Neste caso, considera-se que a gota recebe calor de uma fonte - a chama - que pode ser tratada como corpo negro. Avaliações experimentais indicam que, para uma gota no período de aquecimento, onde a taxa de evaporação ainda é pequena e não há combustão, a relação entre o calor trocado por radiação e por convecção fica na faixa de 0,02 a 0,2. Esses experimentos, no entanto, foram realizados analisando-se uma gota que, individualmente, atravessava a

fornalha. Isso indica que, em se tratando de uma gota no centro frio de um spray envolvido por uma chama luminosa - com alta concentração de fuligem -, os resultados podem ser muito mais expressivos que os do teste apresentado.

Analisa-se agora os fluxos de massa e calor ocorridos durante o processo. A evaporação da gota envolve trocas de calor e massa, na presença de gradiente de temperatura e misturas multicomponentes com gradientes de concentração para as várias espécies envolvidas. O fluxo de massa contém termos de: concentração, térmicos, de pressão e de difusão forçada. Este último ocorre somente para espécies carregadas eletricamente na presença de um campo elétrico - o que não será considerado aqui. A difusão devida a gradientes de pressão é normalmente desprezível para as condições de escoamento do processo e é ausente num campo de pressão constante e de simetria esférica, como o adotado para a modelagem aqui apresentada. A difusão mássica devida ao gradiente de temperatura - *Efeito Soret* - é mais importante, mas, mesmo assim, equivale a menos de 10% da difusão devida à variação de concentração. Disso tudo, conclui-se que a difusão mássica devida ao gradiente de concentração se constitui no principal *driving-force* do fluxo de massa. Assim, é possível considerar-se apenas a Lei de Fick, admitindo um sistema binário. Uma aproximação desse tipo é adequada quando a difusividade binária de todas as espécies é a mesma, ou quando todas as espécies se movem com a mesma velocidade, à exceção de uma.

Já o fluxo de energia contém o termo condutivo, de contribuição das espécies se difundindo e o *Efeito Dufour*. Este último corresponde ao fluxo térmico gerado pelo gradiente de concentração. É recíproco em relação ao efeito *Soret*, descrito acima. O erro causado pela não consideração do efeito *Dufour* é da ordem de 10% do modelo de transferência de calor. Porém, sua computação é excessivamente complicada e de resultados ainda não satisfatórios. O termo de interdifusão é considerado no modelo Spalding, descrito abaixo. No modelo Faeth, é adotada a simplificação do Número de Lewis unitário.

II.2. Resumo das hipóteses adotadas

A seguir, coloca-se um resumo das hipóteses comuns aos 3 modelos analisados.

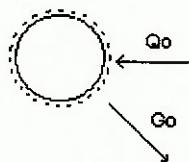
1. O processo é esfericamente simétrico, com possibilidade de aplicação de correção para a existência de convecção
2. A fase gasosa é admitida como quase-estática e contínua.
3. As gotas estão distanciadas ao ponto de uma não interferir com outra.
4. Trabalho de eixo e variações da energia cinética, desprezíveis.
5. O líquido é monocomponente.
6. A relação entre a concentração de vapor junto à superfície e a temperatura do líquido é dada por correlação, para se determinar a pressão de vapor. Despreza-se a influência da tensão superficial.
7. O gás ambiente tem solubilidade desprezível na fase líquida; e somente combustível difunde da superfície em direção ao meio.
8. O movimento radial da superfície do líquido é admitido desprezível.
9. A pressão interna, em todos os pontos da superfície do líquido, é igual a pressão ambiente.
10. Transferência de calor por radiação desprezível.
11. Desprezam-se os efeitos de *Dufour* na transferência de calor, e de *Soret*, na transferência de massa.
12. A difusão de massa é representada por uma lei de difusão binária. É válida a Lei de Fick.
13. Efeitos de reação, tais como decomposição do combustível, são desprezados

É previsível que essas hipóteses tornem-se inválidas, Faeth [3], para condições de pressão inferiores a 1 bar, gotas de diâmetro inferior a $1\mu\text{m}$, a pressões próximas à pressão crítica do combustível e na presença de chamas de alta emissividade.

II.3. Modelo Condutivo Puro

O primeiro e mais simples modelo utilizado para o processo de vaporização da gota foi o condutivo puro. Esse modelo não leva em consideração os efeitos da difusão de massa na composição do fluxo de calor.

Considerando um volume de controle envolvendo a gota junto a sua superfície, resulta que o calor que atinge a superfície da gota é inicialmente utilizado para aquecê-la e, posteriormente, para suprir a entalpia de vaporização do líquido.



onde G_0 = taxa de mudança de fase por unidade de área = fluxo de massa por unidade de área.

Q_0 = fluxo de calor que atinge a superfície.

O índice 0 refere-se à superfície da gota.

Pela conservação da massa:

$$G \cdot r^2 = G_0 \cdot r_0^2$$

Da Lei de Fick:

$$\left(Y_{vap} \cdot G - \Gamma_{vap} \cdot \frac{dY_{vap}}{dt} \right) \cdot r^2 = G_0 \cdot r_0^2$$

onde $\Gamma = \rho \cdot D_{AB}$

cuja integração leva a:

$$G_0 = \frac{\Gamma_{vap}}{r_0} \cdot L n \left[1 + \frac{Y_{vap,0} - Y_{vap,\infty}}{1 - Y_{vap,0}} \right] \quad (\text{II.1})$$

que é o fluxo de massa que sai da gota por unidade de área.

Por outro lado, a massa que deixa a gota promove uma redução em seu diâmetro, de tal modo que:

$$4.\pi.r^2.G_0 = -\frac{d\rho.V}{dt} = -\rho \cdot \frac{dV}{dt} = -\rho \cdot \frac{d^4/3 \cdot \pi \cdot r^3}{dt}$$

$$4.\pi.r^2.G_0 = -\rho \cdot 4.\pi.r^2 \cdot \frac{dr}{dt}$$

que após simplificação, resulta:

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{G_0}{\rho} \quad (\text{II.2})$$

Aplicando a primeira Lei da Termodinâmica ao volume de controle em questão, resulta:

$$Q_0 = m.c_p \cdot \frac{dT_0}{dt} + 4.\pi.r^2.G_0.h_{LV} \quad (\text{II.3})$$

mas

$$Q_0 = h.A.(T_\infty - T_0) \quad (\text{II.4})$$

onde h = coeficiente de película para a transferência de calor

A = área superficial da gota

Para a hipótese de efeito da transferência de massa desprezível na transferência de calor, tem-se que o número de Nusselt é igual a 2. Disso se obtém o coeficiente de película:

$$Nu = \frac{h.D}{k} = \frac{h.2.r_0}{k} = 2$$

$$h = \frac{k}{r_s}$$

Substituindo esses resultados na equação II.4 em seguida II.3 e rearranjando, obtém-se:

$$\rho.c_p.r \cdot \frac{dT_0}{dt} = k.(T_\infty - T_0) - G_0.h_{LV} \quad (\text{II.5})$$

Resolvendo-se o sistema formado pelas equações II.2 e II.5, através do método numérico de Euler, obteve-se a solução do problema. Os resultados serão apresentados na seção II.6, abaixo.

II.4. Modelo Faeth

Neste modelo, Faeth [3], passa-se a considerar os efeitos da transferência de massa no fluxo de calor, sendo, porém, adotada a hipótese simplificadora de Número de Lewis igual a um.

Como no caso anterior, a conservação da massa fornece:

$$G_0 = \frac{\Gamma_{vap}}{r_0} \cdot \ln \left[1 + \frac{Y_{vap,0} - Y_{vap,\infty}}{1 - Y_{vap,0}} \right] \quad (\text{II.1})$$

e

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{G_0}{\rho} \quad (\text{II.2})$$

A aplicação da Primeira Lei da Termodinâmica, da mesma forma que na modelagem anterior, fornece:

$$Q_0 = m \cdot c_p \cdot \frac{dT_0}{dt} + 4 \cdot \pi \cdot r^2 \cdot G_0 \cdot h_{LV} \quad (\text{II.3})$$

mas,

$$Q_0 = h \cdot A \cdot (T_\infty - T_0) \quad (\text{II.4})$$

Porém, para o caso atual, onde efeitos do transporte de massa são considerados, o número de Nusselt é dado pela seguinte expressão:

$$Nu = 2 \cdot \frac{\ln(1 + B_y)}{B_y}$$

onde

$$B_y = \frac{Y_{vap,0} - Y_{vap,\infty}}{1 - Y_{vap,0}}$$

e

$$Nu = \frac{h \cdot 2 \cdot r}{k}$$

e, portanto,

$$h = \frac{k}{r} \cdot \frac{\ln(1 + B_y)}{B_y} \quad (\text{II.6})$$

Substituindo (II.6) na equação do calor que atinge a gota (II.4), e, em seguida, na equação da primeira lei (II.3), resulta, após rearranjo:

$$\frac{1}{3} \cdot \rho \cdot c_p \cdot r \frac{dT_0}{dt} = \frac{k}{r} \cdot \frac{\ln(1+B_Y)}{B_Y} \cdot (T_\infty - T_0) - G_0 \cdot h_{LV} \quad (\text{II.7})$$

Resolvendo-se o sistema formado pelas equações (II.2) e (II.7) através do método numérico de Euler, obteve-se a solução do problema. Os resultados serão apresentados na seção II.6, abaixo.

II.5. Modelo Spalding

A abordagem sugerida por D. B. Spalding, Spalding [16], relaxa a hipótese colocada no item anterior, de Número de Lewis igual a um. Dessa forma, é possível uma avaliação mais exata do processo de transferência de calor, do meio envolvente para a gota, levando-se em consideração os efeitos do transporte de massa.

O resultado da conservação da massa é o mesmo obtido para os dois casos anteriores, reproduzido abaixo.

$$G_0 = \frac{\Gamma_{vap}}{r_0} \cdot \ln \left[1 + \frac{Y_{vap,0} - Y_{vap,\infty}}{1 - Y_{vap,0}} \right] \quad (\text{II.1})$$

e

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{G_0}{\rho} \quad (\text{II.2})$$

A aplicação da primeira lei da termodinâmica ao volume de controle em questão resulta:

$$r^2 \cdot k \cdot \frac{dT}{dr} = G_0 \cdot r_0^2 \left[c_{p,vap} \cdot (T_\infty - T_0) - \frac{Q_0}{G_0} \right]$$

que após integração, resulta:

$$\ln \left[1 - \frac{G_0 \cdot c_p \cdot (T_\infty - T_0)}{Q_0} \right] = \frac{G_0 \cdot r_0 \cdot c_p}{k}$$

Explicitando Q_0 :

$$Q_0 = \frac{c_p \cdot G_0 \cdot (T_\infty - T_0)}{1 - \exp \left[\frac{G_0 \cdot r_0 \cdot c_p}{k} \right]} \quad (\text{II.8})$$

Mas, como visto anteriormente, para a gota vale:

$$Q_0 = m \cdot c_p \cdot \frac{dT_0}{dt} + 4 \cdot \pi \cdot r^2 \cdot G_0 \cdot h_{LV} \quad (\text{II.3})$$

Rearranjando, tem-se:

$$r \cdot \rho \cdot c_p \cdot \frac{dT_0}{dt} = 3 \cdot \left\{ \frac{c_p \cdot G_0 \cdot (T_\infty - T_0)}{1 - \exp \left[\frac{G_0 \cdot r_0 \cdot c_p}{k} \right]} - G_0 \cdot h_{LV} \right\} \quad (\text{II.9})$$

Resolvendo-se o sistema formado pelas equações (II.2) e (II.9) através do método numérico de Euler, obteve-se a solução do problema. Os resultados serão apresentados na seção II.6, abaixo.

II.6. Resultados e dados experimentais

As simulações realizadas com água foram realizadas com temperatura de injeção de 298 K, temperatura da câmara 893 K e a pressão de 1 bar. Para o caso do n-heptano, foram feitas duas simulações: a primeira com temperatura de entrada de 298 K e temperatura da câmara, 2000K; uma segunda, com temperatura de entrada de 305 K e temperatura da câmara de 373 K, ambas com pressão ambiente de 1 bar.

Colocam-se, aqui, os resultados obtidos por simulação (gráficos II.1 a II.13), utilizando-se implementação dos modelos descritos acima em linguagem pascal. Estão mostrados, aqui, os resultados para os três modelos, no que se refere a tempo de vida da gota, decréscimo do raio em função do tempo, temperatura na superfície do líquido, número de Lewis em função do tempo e evolução da taxa de transferência de massa por unidade de área com o tempo.

Em seguida, estão colocados os dados experimentais obtidos na literatura para o tempo de vida da gota de água (gráfico II.14) e n-heptano (gráfico II.15), que serviram de referência para a aferição do modelo.

Evaporação da água

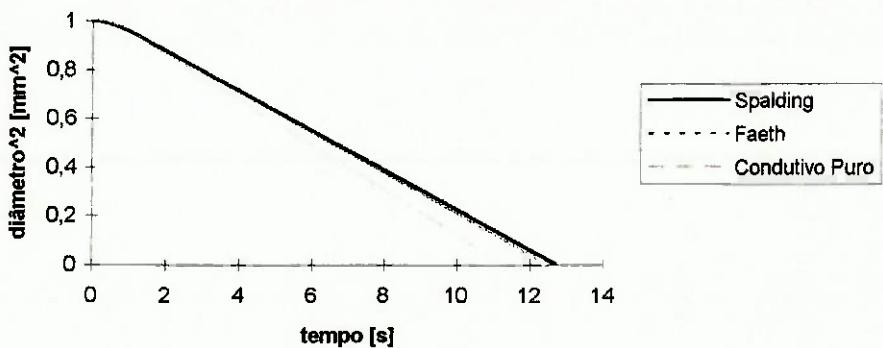


Gráfico II.1: Decréscimo do raio em função do tempo para água

Temperatura - Água

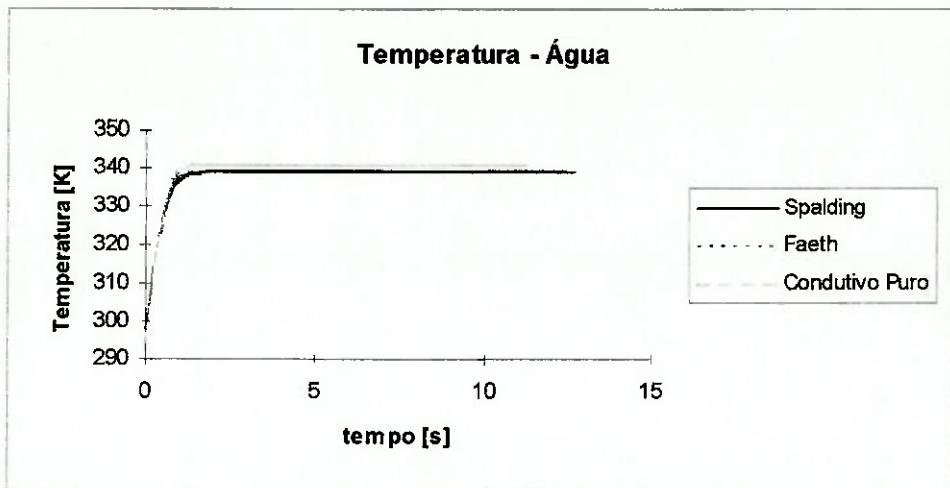


Gráfico II.2: Evolução da temperatura da superfície da gota para água

No. de Lewis - Água

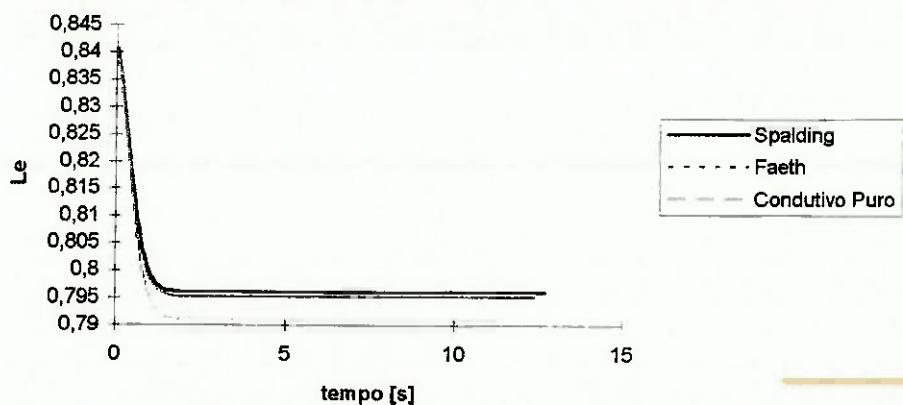


Gráfico II.3: Número de Lewis em função do tempo para a água

Taxa de Transferência de Massa - Água

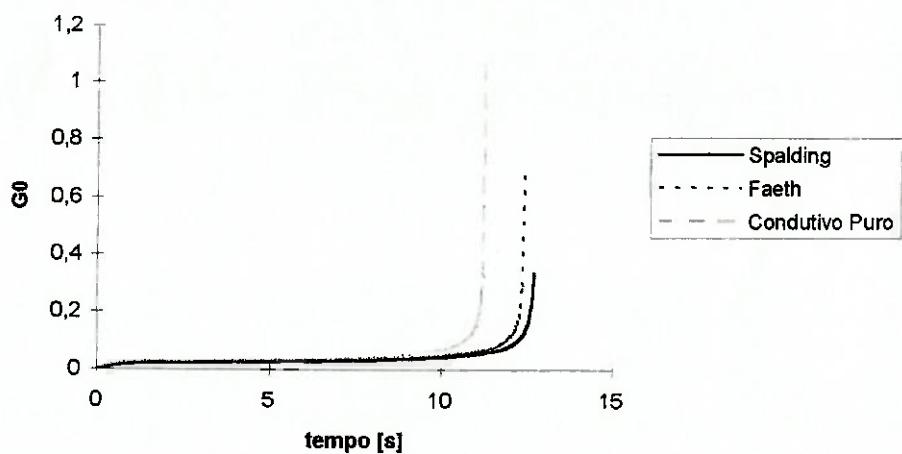


Gráfico II.4: Evolução da taxa de transferência de Massa para a água

Resultados da Evaporação - n-Heptano

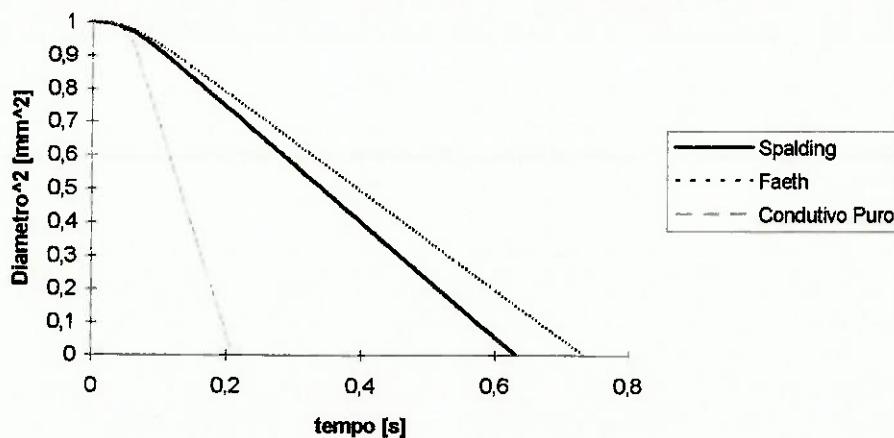


Gráfico II.5: Decréscimo do raio em função do tempo para o n-heptano

Temperaturas/evaporação - n-Heptano

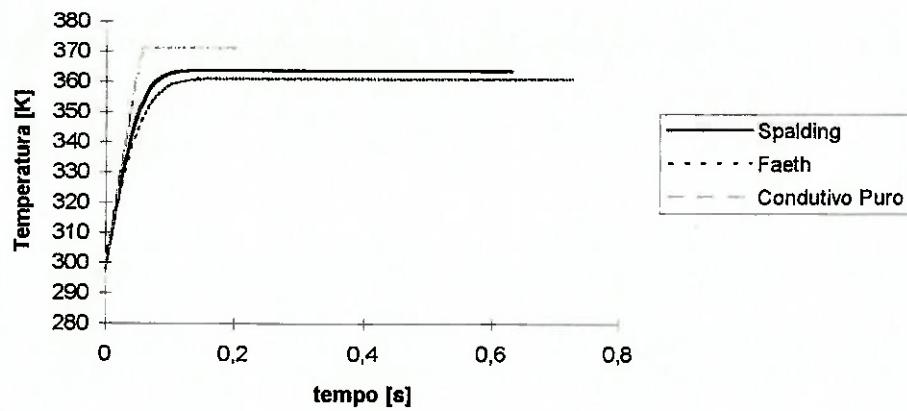


Gráfico II.6: Evolução da temperatura da superfície da gota para o n-heptano

No. de Lewis - n-Heptano

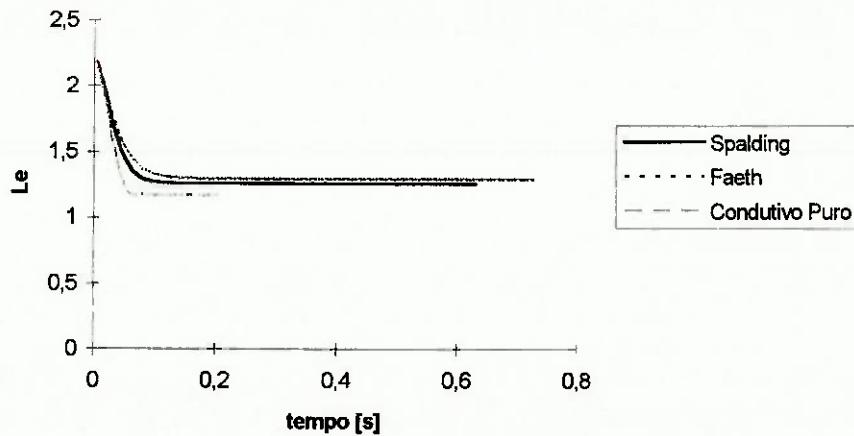


Gráfico II.7: Número de Lewis em função do tempo para o n-heptano

Taxa de transferência de Massa - N-Heptano

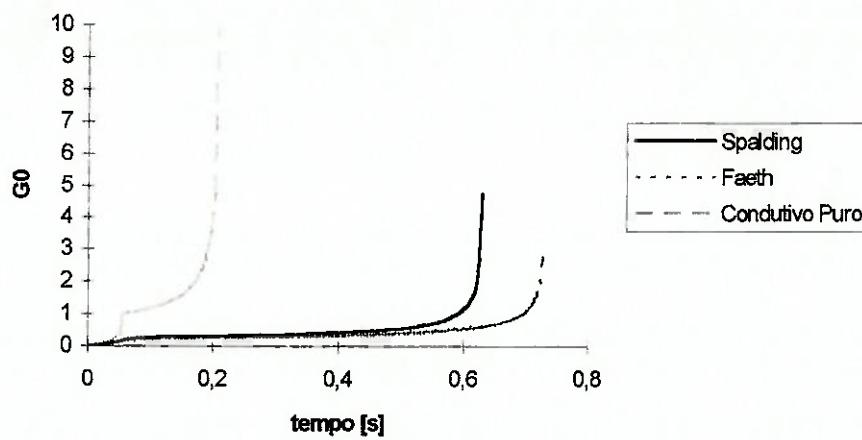


Gráfico II.8: Evolução da taxa de transferência de Massa para o n-heptano

Resultados de evaporação - n-Heptano

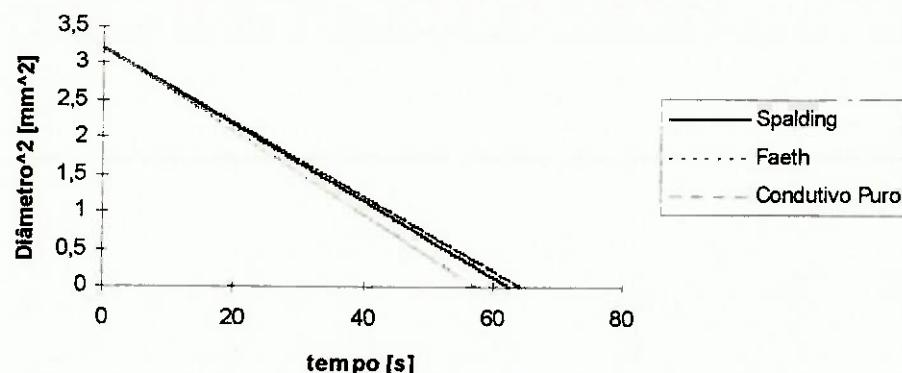


Gráfico II.10: Decréscimo do raio em função do tempo para o n-heptano - simul. 2

Temperatura na evaporação do n-heptano

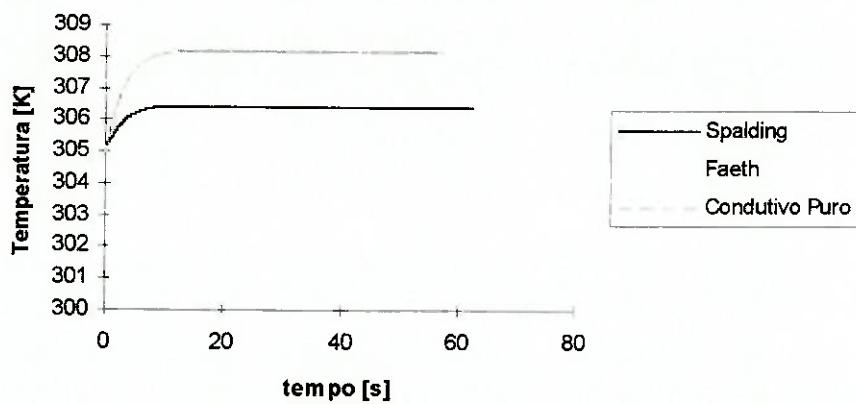


Gráfico II.11 Evolução da temperatura da superfície da gota para o n-heptano - simul. 2

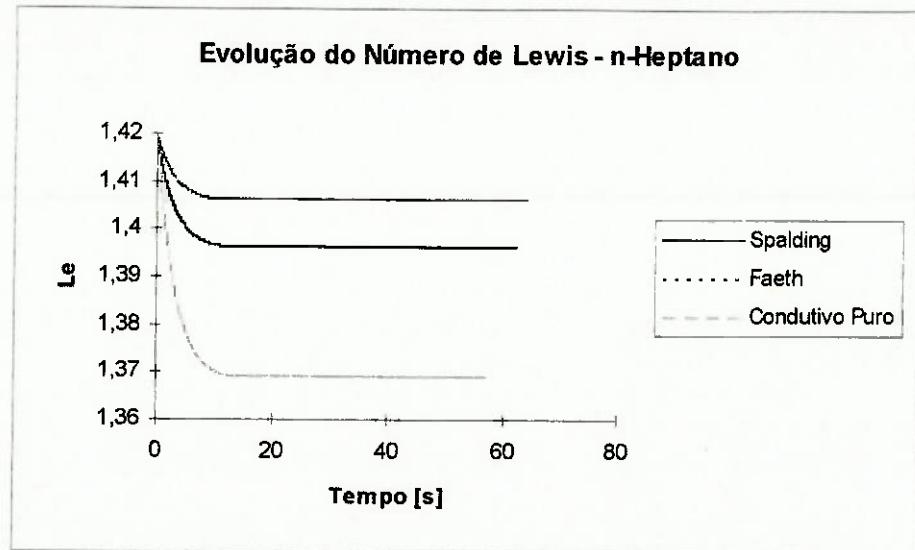


Gráfico II.12: Número de Lewis em função do tempo para o n-heptano - simul. 2

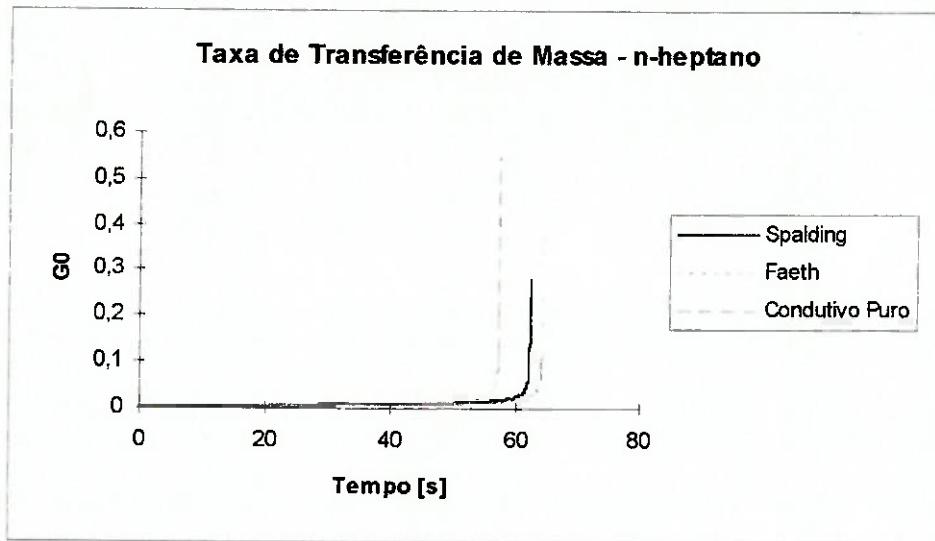


Gráfico II.13: Evolução da taxa de transferência de Massa para o n-heptano - simul.2

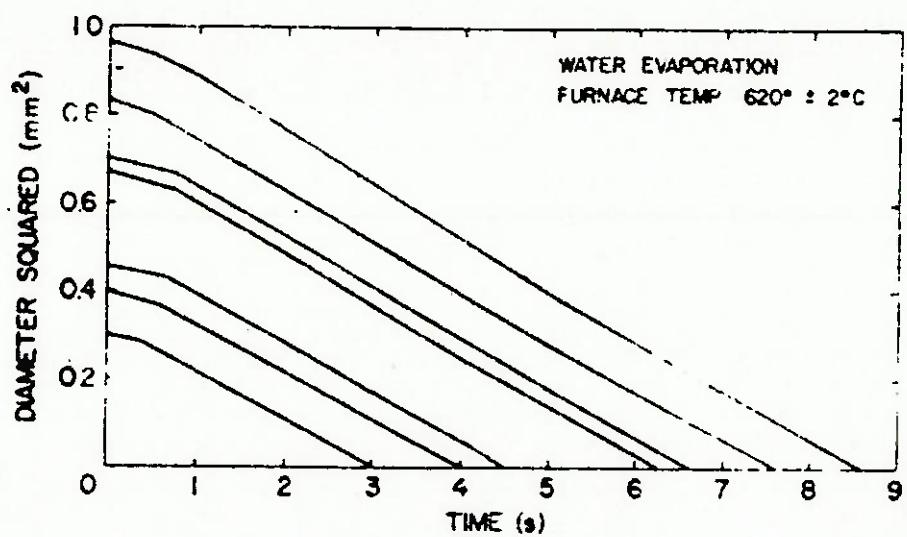


Gráfico II.14: Dados experimentais para vaporização da água , Faeth [3]

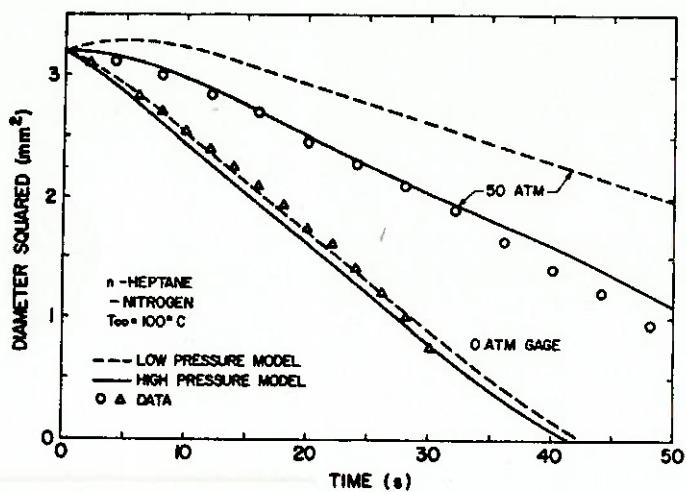


Gráfico II.15: Dados experimentais para vaporização do n-heptano , Faeth [3]

II.7. Crítica

Com relação aos dados experimentais utilizados como referência, não são especificadas com precisão as condições em que foram desenvolvidos os experimentos. Não são claras as condições de velocidade relativa da gota, temperatura de injeção e condições de convecção natural. Observa-se que, pela aplicação da correção do coeficiente de película devido à ocorrência de

velocidade relativa não nula, os tempos de vaporização caem drasticamente com o aumento da velocidade. O gráfico II.16 mostra esse efeito, aplicando-se a correção para um caso de vaporização com temperatura estabilizada. Nota-se, especialmente no início da curva, um decréscimo bastante acentuado do tempo de vaporização.

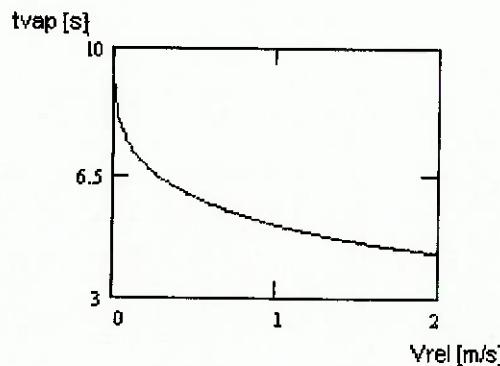


Gráfico II.16: Tempo de vaporização em função da velocidade da gota, para água

Com base nisso, os resultados obtidos para evaporação da água são bastante satisfatórios, uma vez que apresentam valor um pouco superior ao experimental que, por outro lado, podem estar subestimados em função de, na realização do experimento haver a possibilidade da presença de algum movimento relativo entre a gota e o meio.

Os resultados obtidos pelos três modelos para água são bastante próximos, o que indica que, para condições de vaporização com a temperatura da câmara não muito elevada, como para os dados acima, 893 K, qualquer um dos modelos podem apresentar uma aproximação satisfatória. Foi observado, porém, que as diferenças entre os modelos aumenta bastante para temperaturas mais elevadas, sendo que, para essas condições, o modelo Spalding, por ser o mais fiel ao processo, se sobressai em termos de resultados.

Para o caso do n-heptano, cuja simulação foi realizada com temperatura na câmara de 2000 K, os resultados são nitidamente melhores no modelo Spalding, sendo que, para o modelo condutivo puro, os resultados divergem significativamente do esperado.

Observa-se claramente, também, o efeito do Número de Lewis na comparação entre os modelos de Spalding e Faeth. No caso da água, a simulação indicou um número de Lewis em torno de 0,79. Pela definição do

número de Lewis, conclui-se que o coeficiente de difusão de massa é maior que o de difusão térmica. Isso se reflete no nível em que a temperatura se estabiliza e, como consequência, no tempo de vaporização da gota. Para o modelo de Faeth, que utiliza a hipótese de $Le = 1$, a temperatura estabilizada para a simulação descrita fica em 339 K. No caso do modelo Spalding, que não faz essa hipótese, trabalhando de forma mais próxima ao fenômeno real, essa temperatura ficou em torno de 337 K. Para o caso do modelo condutivo puro, a temperatura ficou em 341 K.

A temperatura de bulbo úmido, para as condições do experimento ficou em torno de 341 K. Observa-se, assim, que o resultado previsto pelo modelo condutivo puro foi o mais próximo dos três modelos analisados. Isto ocorre por ser esse o modelo que considera a maior transferência de calor entre os modelos, compensando dessa forma a possível existência de convecção na realização dos experimentos.

Já no caso do n-heptano, cujo Lewis é próximo a 1,3, ocorre, como esperado, da temperatura para o modelo Spalding ser mais elevada, 363 K , contra 360 K do modelo Faeth, uma vez que, para esse líquido, a difusão térmica é maior que a mássica.

III. Combustão

Quando uma gota é submetida a um meio oxidante de alta temperatura, pode ocorrer a ignição da mistura vapor de combustível - oxidante, dando origem à chama. Para altas taxas de reação, essa região - chama - tem espessura muito fina e envolve toda a gota. A reação, neste caso, é controlada pela difusão, ocorrendo com velocidade infinita assim que o vapor do combustível encontre uma concentração suficiente de oxigênio para reagir, podendo ser desprezados os efeitos da cinética química. Para estas condições, o processo guarda muitas semelhanças com a evaporação em atmosfera inerte, sem combustão. Aqui, as maiores dificuldades ocorrem devido a maiores variações nas propriedades e na determinação do ponto onde ocorre a ignição. Critérios são também necessários para definir: quando a região da chama é suficientemente estreita para caracterizar o processo como sendo o de uma chama de difusão, e quais as condições para que ocorra a estabilização da chama ao redor da gota.

Aqui será considerado o período pós-ignição e será admitido que ocorrerá uma chama de difusão estabilizada ao redor da gota. Um modelo esquemático da combustão, na ausência de convecção, é mostrado na figura III.1, onde é possível observar os perfis de temperatura e concentrações de vapor de combustível e de oxidante. Os produtos de combustão se difundem da região de reação em direção ao ambiente. O calor liberado pela reação é trocado com a gota - promovendo seu aquecimento e vaporização - e com o ambiente externo. O combustível se difunde da gota em direção à chama, através de uma mistura de produtos de combustão e gases inertes e o oxigênio difunde-se do ambiente em direção à zona de reação, contra o fluxo de gases de combustão. Na região de combustão, as concentrações de combustível e oxigênio são reduzidas a zero instantaneamente, devido às altas taxas da reação de combustão.

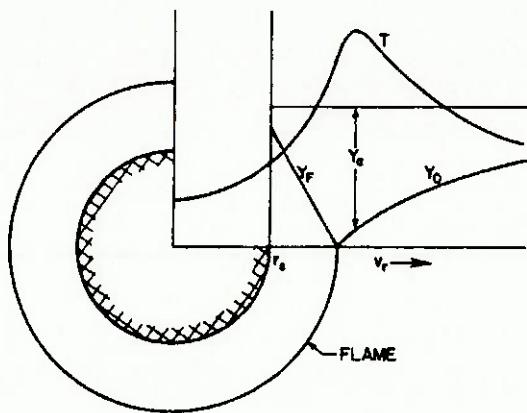


Figura III.1: Modelo esquemático de uma chama de difusão para gotas , Faeth [3]

Estudos encontrados na bibliografia, Faeth [3] e Williams [22], demonstram, através de avaliações experimentais, algumas diferenças em relação a este modelo básico. Para a combustão de n-heptano, sob efeitos de convecção natural e simulando-se uma gota através de alimentação do combustível numa esfera de cerâmica porosa, foram obtidas as curvas mostradas na figura III.2, de onde se pode tirar algumas conclusões.

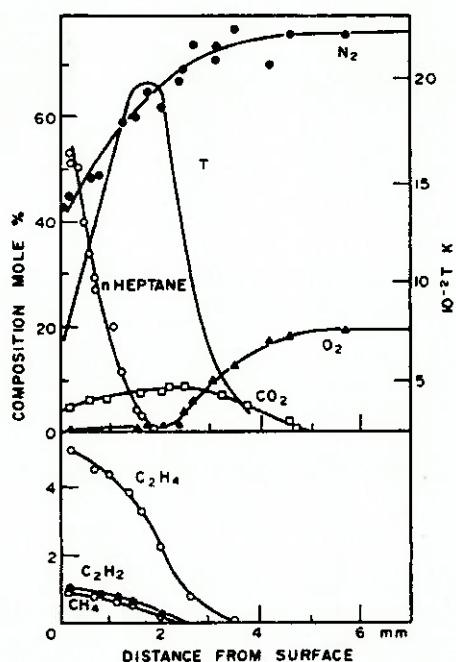


Figura III.2: Perfis de temperatura e concentração de uma esfera porosa queimando n-heptano , Faeth [3]

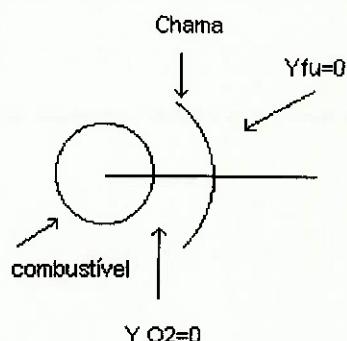
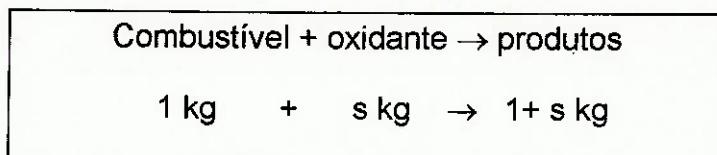
As concentrações de combustível e oxidante caem na região onde ocorre a temperatura máxima. Porém, a concentração de oxigênio é baixa, mas não nula entre a chama e a superfície da gota. Isso demonstra que a ocorrência de dissociação e taxas de reação finitas permitem que a concentração de oxigênio seja maior que zero na região da chama. Esse fato, somado às baixas taxas de reação que ocorrem na zona de aquecimento, entre a chama e superfície da gota, faz com que o oxigênio se difunda em direção à superfície da gota, da mesma forma que os componentes inertes, tais como o nitrogênio. Observa-se a presença de hidrocarbonetos intermediários - produtos da pirólise do combustível - entre a gota e a chama. Hidrocarbonetos pesados, como fuligem são também observados. Além disso, medidas demostram a ocorrência de uma região onde calor é consumido, sendo também indicativo da presença da pirólise.

III.1. Modelo Spalding

Passa-se, agora, a descrever o modelo proposto por D. B. Spalding, Spalding [16], para o processo de combustão de uma gota de combustível líquido. Inicia-se com a apresentação das hipóteses utilizadas nesta modelagem:

1. Simetria esférica, desprezando qualquer movimento não radial na fase gasosa.
2. Fase gasosa quase-estática, como já adotado para o processo de vaporização.
3. A distância entre as gotas é muito maior que seu diâmetro.
4. As propriedades de transporte (Γ) são independentes do raio. Tendo-se em vista as grandes variações de temperatura, isto é uma aproximação grosseira, que no entanto, pode ser adotada se forem definidos valores médios de referência.
5. As taxas de reação são grandes o suficiente para garantir que nem oxigênio nem o vapor de combustível penetrem na zona de reação em quantidades significativas.
6. A reação de combustão ocorre entre dois reagentes formando apenas um produto.

É tomada, dessa forma, a seguinte simplificação da reação:



A conservação da massa fornece:

$$G \cdot r^2 = G_0 \cdot r_0^2$$

No espaço entre a chama e o líquido, tem-se:

$$G = G_{tot,fu}$$

e do lado externo da chama:

$$G = G_{tot,prod} + G_{tot,ox}$$

Neste caso, $G_{tot,ox}$ é negativo, pois o oxigênio é transferido do ambiente para a chama.

Passa-se, agora, à definição da expressão para conservação de qualquer propriedade conservada ϕ , definida por Spalding, Spalding [16], onde o fluxo líquido de ϕ dividido por 4π é igual à soma dos fluxos convectivo e difusivo em qualquer posição radial, inclusive $r=r_0$.

$$\left[G \cdot \phi - \Gamma_\phi \cdot \frac{d\phi}{dr} \right] \cdot r^2 = \left[G_0 \cdot \phi_0 - \Gamma_\phi \cdot \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_0 \right] \cdot r_0^2 \quad (\text{III.1})$$

onde ϕ pode assumir o papel de qualquer propriedade conservada, e Γ_ϕ é uma propriedade de transporte da propriedade conservada.

Ao se integrar a equação III.1, supondo Γ_ϕ constante, tem-se:

$$\frac{G_0 \cdot r_0}{\Gamma_\phi} = \ln \left[1 + \frac{(\phi_0 - \phi_\infty)}{-\Gamma_\phi \cdot \left(\frac{d\phi}{dr} \right)_0 / G_0} \right] \quad (\text{III.2})$$

Substituindo a propriedade ϕ de forma a obter um resultado útil, segue-se com:

$$\phi = Y_{fu} - \frac{Y_{ox}}{s}$$

e disto, pelas hipóteses adotadas de concentração de combustível ao longe e de a concentração de oxidante na superfície serem nulas - taxas de reação infinitas, resulta:

$$\phi_\infty = -\frac{Y_{ox}}{s}$$

e

$$\phi_0 = Y_{fu,0}$$

Dessa forma, da equação III.2, tem-se:

$$G_0 = \frac{\Gamma_{fu,ox}}{r_0} \cdot \ln \left[1 + \frac{Y_{fu,0} + \frac{Y_{ox,\infty}}{s}}{1 - Y_{fu,0}} \right] \quad (\text{III.4})$$

Da mesma forma que no caso da evaporação, a redução do raio da gota provocada pela vaporização do líquido pode ser expressa pela seguinte equação:

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{G_0}{\rho} \quad (\text{III.5})$$

Também de forma análoga ao caso da evaporação, a aplicação da Primeira Lei da Termodinâmica resulta em:

$$Q_0 = \frac{c_p \cdot G_0 \cdot (T_\infty - T_0)}{1 - \exp \left[\frac{G_0 \cdot r_0 \cdot c_p}{k} \right]} \quad (\text{III.6})$$

Mas, como visto anteriormente, para a gota vale:

$$Q_0 = m \cdot c_p \cdot \frac{dT_0}{dt} + 4 \cdot \pi \cdot r^2 \cdot G_0 \cdot h_{LV} \quad (\text{III.7})$$

Rearranjando, tem-se

$$r \cdot \rho \cdot c_p \cdot \frac{dT_0}{dt} = 3 \cdot \left\{ \frac{c_p \cdot G_0 \cdot (T_\infty - T_0)}{\left[1 - \exp \left(\frac{G_0 \cdot r_0 \cdot c_p}{k} \right) \right]} - G_0 \cdot h_{LV} \right\} \quad (\text{III.8})$$

Resolvendo-se o sistema formado pelas equações (III.5) e (III.8) através do método numérico de Euler, obteve-se a solução do problema. Os resultados serão apresentados na seção III.2, abaixo.

III.2. Resultados e Dados Experimentais

Serão apresentados, aqui, os resultados obtidos por simulação e os dados experimentais encontrados na bibliografia, Chomiak [2], para a combustão do n-heptano.

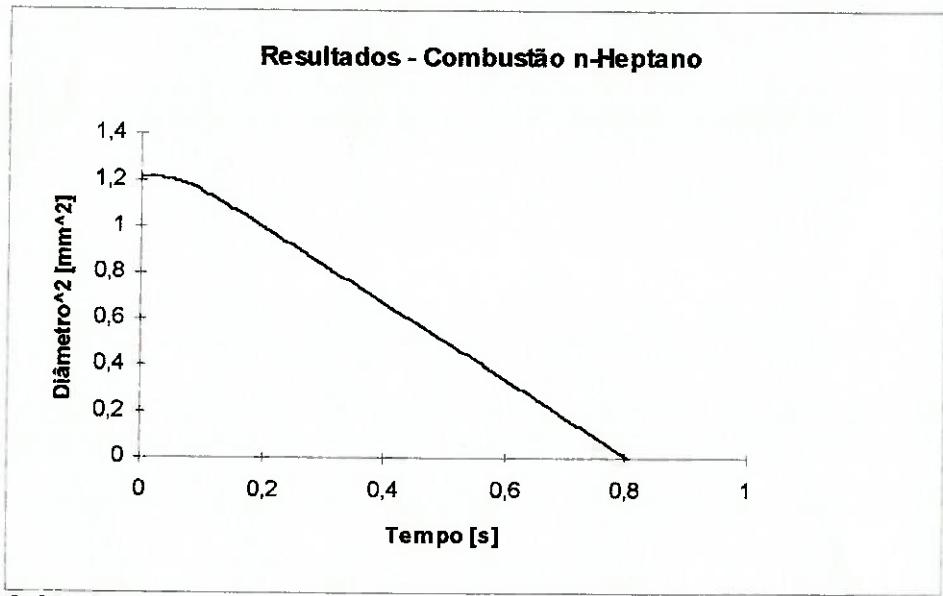


Gráfico III.1: Curva de redução do diâmetro - simulação da combustão do n-Heptano

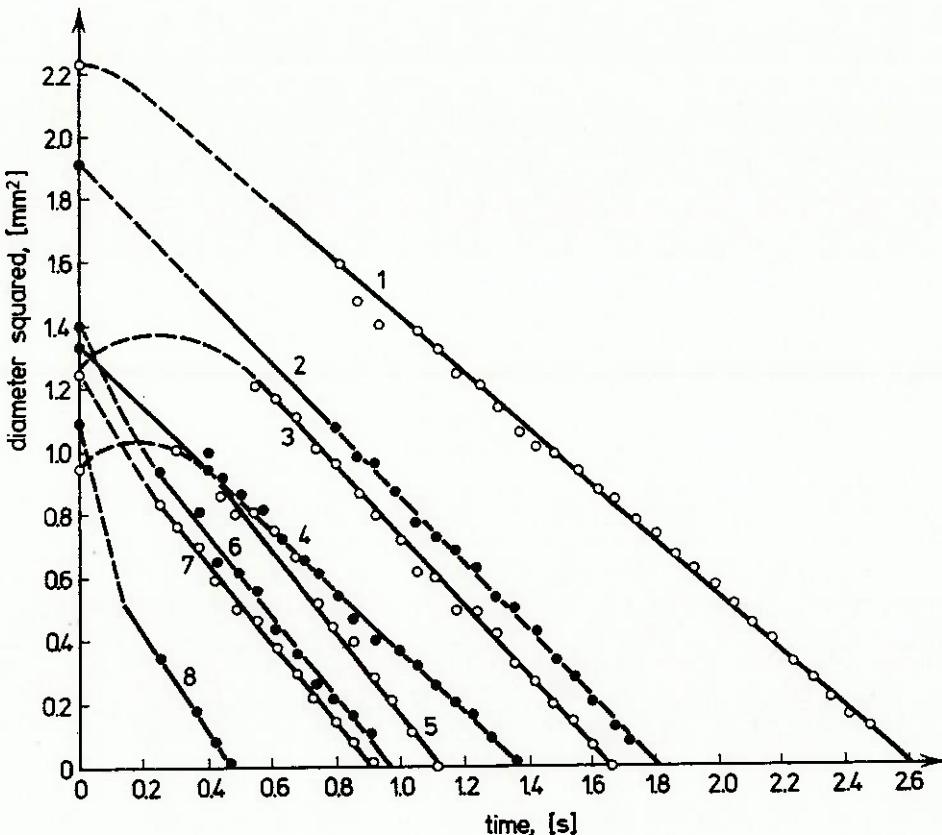


Gráfico III.2: Curva experimental para variação do diâmetro da gota (n-Heptano - curva nº 7) , Chomiak [2]

III.3. Crítica

O resultado obtido na simulação da combustão pelo modelo Spalding foi bastante satisfatório, como pode ser observado nos gráficos da seção anterior. Os dados experimentais referem-se a uma gota de 1,1 mm de diâmetro, e o tempo de vaporização de aproximadamente 0,9 segundos. A simulação forneceu, para o mesmo diâmetro de gota, um tempo de 0,81 segundos, o que equivale a um desvio em relação ao dado experimental de 10%, valor bastante razoável, considerando-se as hipóteses adotadas.

Para a simulação, foi adotada a temperatura da chama como sendo de 1900 K, valor este encontrado na bibliografia, Faeth [3] e Williams [22]. O cálculo da temperatura adiabática de chama, porém, revelou um valor bem maior, em torno de 2500 K para a combustão estequiométrica. Essa diferença de valores pode ser explicada pela ocorrência de dissociações na região da chama, bem como transferência de calor da chama para o meio externo.

IV. Conclusões

O processo numérico utilizado para a solução dos sistemas de equações foi o método de Euler. Porém, foi feita uma experiência com a implementação do método preditor-corretor, para o caso da evaporação da água e constatou-se que o resultado foi praticamente o mesmo. Houve, porém, um aumento no tempo de processamento. Este fato confirmou a aplicação do método de Euler pelo seu resultado e simplicidade de implementação.

Com relação às simulações com o n-heptano, observou-se que quando a temperatura da câmara, no caso da evaporação, e temperatura da chama, no caso da combustão são supostas iguais, os resultados para os dois casos são muito próximos, o que confirma a semelhança no comportamento dos processos.

Com relação aos dados experimentais encontrados na literatura, o maior problema encontrado foi a não especificação das condições nas quais os experimentos haviam sido desenvolvidos. Para os dados referentes à evaporação, em nenhum dos casos estavam disponíveis a temperatura do líquido na injeção, bem como dados referentes à velocidade relativa gota-meio envolvente, e às condições de convecção. Foi também demonstrada a relevância desses dados, pela a forte influência nos tempos de vaporização (gráfico II.16). Ficou, dessa forma, comprometida a validação dos resultados para evaporação.

Pode ser sugerida, como forma de se contornar esse problema, a aferição do coeficiente de transferência de calor por convecção, de forma a se obter a temperatura estabilizada igual à temperatura de bulbo úmido para as condições do experimento.

V. Bibliografia

1. Annamalai, K. Ryan, W., *Interactive Processes in Gasification and Combustion. Part 1: Liquid Drop Arrays and Clouds.* Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 18, 1992
2. Chomiak, J, *Combustion; A Study in Theory, Fact and Application.* Gordon & Breach Science Publishers, 1990
3. Faeth, G. M., *Current Status of Droplet and Liquid Combustion.* Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 3, 1977
4. Faeth, G. M., *Evaporation and Combustion of Sprays.* Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 9, 1983
5. Himmelblau, D. M., *Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering.* Prentice-Hall, 1996
6. Incropera, F. P., de Witt, D. P., *Fundamentos da Transferência de Calor e Massa.* Editora Guanabara Koogan, 1992
7. Kuo, Kenneth K., *Principles of Combustion.* Jonh Wiley & Sons, 1986
8. Lefebvre, A. H., *Atomization and Sprays.* Hemisphere Publishing Corporation, 1989
9. Madooglu, K., Karagozian, *A Simplified Approach to Transient Convective Droplet Evaporation and Burning.* Combustion and Flame No. 87, 1994
10. Messias, L. S., *Combustão de Líquidos.* Instituto de Pesquisas Tecnológicas - Agrupamento de Engenharia Térmica (mimeo), 1996
11. Perry; R. H., Green, D. W., *Perry's Chemical Engineers' Handbook.* Mc Graw Hill, 1984
12. Prakash, S., Sirignano, W. A., *Liquid Fuel Droplet Heating with Internal Circulation.* International Journal of Heat and Mass Transfer, Pergamon Press, 1978
13. Prakash, S.; Sirignano, W.A., *Theory of Convective Droplet Vaporization with Unsteady Heat Transfer in the Circulating Liquid Phase.* International Journal of Heat and Mass Transfer, Pergamon Press, 1980

14. Reid, R. C., Prausnitz, J. M., Poling, B. E., *The Properties of Gases and Liquids*. McGraw-Hill Company, 1987
15. Sirignano, W. A., *Fuel Droplet Vaporization and Spray Combustion Theory*. Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 9, 1983
16. Spalding, D. B., *Combustion and Mass Transfer*. Pergamon Press, 1979
17. Spalding, D.B., *Convective Mass Transfer*. McGraw-Hill Company, 1963
18. Van Wylen, G., Sonntag, R., Borgnakke, C., *Fundamentos da Termodinâmica Clássica*. Editora Edgar Blücher Ltda, 1995
19. Vergnhanini, R. F., Ushima, A. H., *Formação de Poluentes em Processos Industriais de Combustão*. Instituto de Pesquisas Tecnológicas - Agrupamento de Engenharia Térmica (mimeo), 1996
20. Welty, James R., Wicks, Charles E., Wilson, Robert E. *Fundamentals of Momentum Heat and Mass Transfer*. Jonh Wiley & Sons, 1984
21. Williams, A, *Combustion of Liquid Fuel Spray*. Butterworths, 1990
22. Williams, A., *Fundamentals of Oil Combustion*. Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 3, 1977
23. Williams, F. A., *Combustion Theory*. The Benjamin/Cummings, 1985
24. Zerbini, E. J. G. J., *Notas de Aula do Curso: Processos e Sistemas de Combustão*. Escola Politécnica da Universidade de São Paulo (mimeo), 1996

Apêndice 1: O Programa para evaporação

```
program evap;
uses crt;

type vetor = array [0..10] of real;
    vetor1 = array [0..10] of char;

var A,B,C,D,Tc,Pc,ki,
    $v,Mm,
    Pp,Pp2,PvpA,PvpB,PvpC,PvpD,Li,Xi,Yiref,XiRef,Xi2,Yi,Yi2:vetor;
    comp,i,j,n,ncomp,icomp,natm,iatm,verif,indcomp,io,
    teste,teste2,por:integer;
    aux1,aux2,aux3,aux4,aux5,aux6,Ti,Tr,Tinf,Taquec,Ttot,Tbp,
    aux7,aux8,aux9,aux10,aux11,AuxTemp,Pparc,
    Svi,Mmi,Pin,Dab,Mab,k,km,kar,kag,khep,
    Tc1,Tc2,Hlv,Q0,G0,
    Dt,Tn,Tn1,di,ri,rn,rn1,mn,mn1,cp,cpmist,cpvap,cpar,db,Le,
    roliq,romist,raquec,rfinal,tfinal,constevap,teste3:real;
    compdif,fim:char;
    tipocomp,comp1:vetor1;
    arq:text;

{calculo de potenciação}

function YelevX(X,Y:real):real;
begin
  YelevX:=exp(X*Ln(Y));
end;

{associação de constantes para cálculo de Pressão de Vapor}

procedure AssociaConst(comp:vetor1;io:integer;var aux1,aux2,aux3,
    aux4,aux5,aux6,aux11:real);

begin
  case upcase (Comp[io]) of
    'G':begin
      aux5:=647.3;
      aux6:=221.2;
      aux7:=-7.76451;
      aux8:=1.45838;
      aux9:=-2.77580;
      aux10:=-1.23303;
    end;
    'N':begin
      aux1:=3.919E-4;
      aux2:=9.816E-5;
      aux3:=-5.067E-8;
      aux4:=1.504E-11;
      aux5:=126.2;
      aux6:=33.9;
    end;
  end;
end;
```

```

    aux11:=28;
  end;
'O':begin
  aux1:=-3.273E-4;
  aux2:=9.966E-5;
  aux3:=-3.743E-8;
  aux4:=9.732E-12;
  aux5:=154.6;
  aux6:=50.4;
  aux11:=32;
end;
'H':begin
  aux5:=540.3;
  aux6:=27.4;
  aux7:=-7.67468;
  aux8:=1.37068;
  aux9:=-3.53620;
  aux10:=-3.20243;
end;
else
begin
  writeln('Composto nao cadastrado');
end;
end;

```

{Calculo de propriedades: Massa específica, calor específico}
{Entalpia, difusividade }

```

procedure MolecDef(compdef:vetor1;i:integer;T,Tliq:real;
  var hlv1,cpvap1,cpar1,roliq1,Dab1:real);

var bum,auxhlv,auxt1,cpo2,cpn2:real;

begin
  auxt1:=T/100;
  case upcase (compdef[i]) of
    'A':begin
      Svi:=19.7;
      Mmi:=28.84;
      kar:=0.026*YelevX(0.83,T/293);
      hlv1:=0;
      cpn2:=(39.060-512.79*YelevX(-1.5,auxt1)+1072.7*YelevX(-2,auxt1)-
        820.4*YelevX(-3,auxt1))*1000/28;
      cpo2:=(37.432+0.020102*YelevX(1.5,auxt1)-178.57*YelevX(-1.5,auxt1)-
        236.88*YelevX(-2,auxt1))*1000/32;
      cpar1:=0.232*cpo2+0.768*cpn2;
      roliq1:=0;
    end;
    'G':begin
      Svi:=13.1;
      Mmi:=18;
      kag:=0.024*YelevX(1.45,(T/373.15));
      cp:=4187;
      auxhlv:=((1-Tliq/647.3)/0.439);
      hlv1:=2283200*YelevX(0.37,auxhlv);
    end;
  end;
end;

```

```

cpvap1:=(143.05-183.54*YelevX(0.25,{T/100})+82.751*YelevX(0.5,{T/100})
-3.6989*{T/100})*1000/18;
roliq1:=997-0.45*(Tliq-298);
Dab1:=2.9e-5*YelevX(1.75,{T/313});

end;
'H':begin
Svi:=148.26;
Mmi:=100.16;
bum:=2-0.0372*sqr(T/371.4);
khep:=0.01012*YelevX(bum,T/273);
cp:=(760+3.35*Tliq)/sqrt(0.6878);
auxhlv:=((1-Tliq/540.17)/0.312);
hlv1:=371800*YelevX(0.375,auxhlv);
cpvap1:=(363+0.467*T)*(5-0.001*687.8);
roliq1:=687.8*(1-1.8*7.5*0.0001*(Tliq-288.6)-0.09
*sqr((Tliq-288.6)/(540.17-288.6)));
Dab1:=0.00001*YelevX(1.75,{T/298});

end;

end;

```

{procedimento para cálculo de pressão parcial}

```

procedure CalcPressParc(var Pp:vetor;Tc,Pc,PvpA,PvpB,PvpC,PvpD:vetor;T:real);

var TT:real;
begin
TT:=1-(T/Tc[2]);
Pp[2]:=Pc[2]*exp((PvpA[2]*TT+PvpB[2]*YelevX(1.5,TT)+PvpC[2]*YelevX(3,TT)
+PvpD[2]*YelevX(6,TT))/(1-TT));
Pp[1]:=1-Pp[2];

```

end;

{procedimento para calculo de fração molar}

```

Procedure CalcFr(Pp,Mm:vetor;Pt:real; var X,Y:vetor);

var indc:integer;

begin
for indc:=1 to 2 do
  X[indc]:=Pp[indc]/Pt;
  Y[2]:=X[2]*Mm[2]/(X[2]*Mm[2]+X[1]*Mm[1]);
  Y[1]:=1-Y[2];
end;

```

{procedimento para cálculo de condutividade da mistura ar-vapor}

```

procedure CalcCondMist(ki,x,Mm:vetor;T:real;var km:real);

var ind:integer;
den,aijf:real;

```

```

begin
  km:={(X[1]*YelevX(3,Mm[1])*ki[1]+(X[2]*YelevX(3,Mm[2])*ki[2]))/
    (X[1]*yelevx(3,Mm[1])+X[2]*yelevx(3,Mm[2]))};

end;

{procedimento para cálculo do calor específico da mistura ar-vapor}

procedure CalcCpMist(xiref1:vetor;cpvap2,cpar2:real;var cpmist2:real);

begin
  cpmist2:=xiref1*cpar2+xiref2*cpvap2;
end;

{função que lendo as massas moleculares dos componentes, retorna a }
{massa molecular da mistura } }

function MMmist(X,Mm:vetor):real;

begin
  MMmist:=(X[1]*Mm[1]+X[2]*Mm[2]);
end;

{corpo do Programa}

begin
repeat
  clrscr;
  Assign(arq, 'c:\poli\evap.out');
  Rewrite(arq);
  writeln;
  writeln;
  Writeln('Coleta de dados');
  writeln;
  writeln;
  writeln('Digite o Diametro inicial da gota (m)');
  readln(Di);
  Writeln('Digite a temperatura inicial do Líquido (K)');
  readln(Ti);
  writeln('Digite a temperatura da Cfmaria (K)');
  readln(Tinf);
  Writeln('Digite a Pressão total da mistura (bar)');
  readln(Pin);
  writeln('Entre com o passo de integração');
  readln(Dt);
  for indcomp:=1 to 2 do
  begin
    Writeln('Componentes (A)r, A(G)ua , (H)eptano ou (O)utros');
    Readln(TipoComp[indcomp]);
  end;
  writeln('Modelo Utilizado: (1 - Spalding)');

```

```

writeln('          (2) - Faeth');
writeln('          (3) - Condutivo Puro');
readln(teste4);
Tn:=Ti;
rn:=di/2;
Ttot:=0;
teste:=0;
teste3:=0;
taquec:=0;

Repeat
  Tr:=Tn+(Tinf-Tn)/2;
  teste:=teste+1;

  if teste3 <> 1
  then
    begin
      for i:=1 to 2 do
        begin
          if upcase (tipocomp[i])='A'
          then
            begin
              verif:=0;
              MolecDef(tipocomp,i,Tr,Tn,hlv,cpvap,cpar,roliq,Dab);
              ki[1]:=kar;
              Sv[1]:=Svi;
              Mm[1]:=Mmi;
              aux5:=131.3;
              aux6:=33.9;
            end
          else
            if upcase (tipocomp[i]) = 'G'
            then
              begin
                MolecDef(tipocomp,i,Tr,Tn,hlv,cpvap,cpar,roliq,Dab);
                associaconst(tipocomp,i,aux1,aux2,aux3,aux4,
                             aux5,aux6,aux11);
                verif:=1;
                ki[2]:=kag;
              end
            else
              if upcase (tipocomp[i]) = 'H'
              then
                begin
                  MolecDef(tipocomp,i,Tr,Tn,hlv,cpvap,cpar,roliq,Dab);
                  associaconst(tipocomp,i,aux1,aux2,aux3,aux4,
                               aux5,aux6,aux11);
                  verif:=1;
                  ki[2]:=khcp;
                end;
              Tc[i]:=aux5;
              Pc[i]:=aux6;
              PvpA[i]:=aux7;
              PvpB[i]:=aux8;
              PvpC[i]:=aux9;
              PvpD[i]:=aux10;

```

```

Sv[i]:=Svi;
Mm[i]:=Mmi;
if verif=1
  then
    begin
      CalcPressParc(Pp,Tc,Pc,PvpA,PvpB,PvpC,PvpD,Tn);
      CalcFr(Pp,Mm,Pin,Xi,Yi);
    end;
  end;
Yiref[2]:=(1/2)*Yi[2];
Yiref[1]:= 1-Yiref[2];
Xiref[2]:=(Yiref[2]/Mm[2])/(Yiref[2]/Mm[2]+Yiref[1]/Mm[1]);
Xiref[1]:=1-Xiref[2];

CalcCondMist(ki,Xiref,Mm,Tr,km);
CalcCpMist(xiref,cpvap,cpar,cmist);
romist:=Pin*1e5*MmMist(Xiref,Mm)/(8314.4*Tr);

if teste4=1
then
begin
  G0:=(-1)*romist*Dab*Ln(1-Yi[2])/rn;
  rn1:=rn-(Dt*G0/roliq);
  Q0:=cmist*G0*(Tinf-Tn)/(exp(G0*cmist*rn/km)-1);
  AuxTemp:=Q0-G0*Hlv;
  Tn1:=Tn+(3*Dt)/(rn*roliq*cp)*AuxTemp;
end
else
if teste4=2
then
begin
  G0:=romist*Dab*Ln(1+(Yi[2]/(1-Yi[2])))/rn;
  rn1:=rn-(Dt*G0/roliq);
  Q0:=km*(Tinf-Tn)*Ln(1+(Yi[2]/(1-Yi[2])))/
    (rn*(Yi[2]/(1-Yi[2])));
  AuxTemp:=Q0-G0*Hlv;
  Tn1:=Tn+(3*Dt)/(rn*roliq*cp)*AuxTemp;
end
else
if teste4=3
then
begin
  G0:=romist*Dab*Ln(1+(Yi[2]/(1-Yi[2])))/rn;
  rn1:=rn-(Dt*G0/roliq);
  Q0:=km*(Tinf-Tn)/rn;
  AuxTemp:=Q0-G0*Hlv;
  Tn1:=Tn+(3*Dt)/(rn*roliq*cp)*AuxTemp;
end;
IF Tn1-Tn<0.00001
then
begin
  teste3:=1;
  Taquec:=Ttot;
  raquec:=rn1;
  writeln;

```

```

writeln;
writeln('Temperatura estabilizada= ',Tn1:3:2);
writeln('Raio ao final do Aquecimento= ',raquec:5:6);
end;
Tn:=Tn1;
Rn:=Rn1;
teste2:=Teste mod 50;
end
else
begin
  G0:=(-1)*romist*Dab*Ln(1-Yi[2])/rn;
  rn1:=rn-(Dt*G0/roliq);
  rn:=rn1;
  teste2:=Teste mod 50;
end;
Ttot:=Ttot+Dt;
Le:=km/(romist*cpmist*dab);

if teste2=0
  then WriteLn(arq,Ttot,Rn,Le,Tn);
if rn>0.000001
  then
    begin
      rfinal:=rn;
      tfinal:=ttot;
    end;
Until rn<=0;
constevap:=((sqr(2*raquec*1000)sqr(2*rfinal*1000))/(
(Tfinal-Taquec));
close(arq);
writeln;
writeln;
writeln('Tempo total= ',ttot:3:2);
writeln('Tempo de Aquecimento= ',taquec:3:2);
writeln;
writeln('K= ',constevap:3:3);
writeln;
writeln('(F)inaliza ou (N)ova simula o');
readln(fim);
until upcase (fim)='F'
end.

```

Apêndice 2: O Programa para combustão

```
program comb;
uses crt;

type vetor = array [0..10] of real;
    vetor1 = array [0..10] of char;

var A,B,C,D,Tc,Pc,ki,
    Sv,Mm,
    Pp,Pp2,PvpA,PvpB,PvpC,PvpD,Li,Xi,Yiref,XiRef,Xi2,Yi,Yi2:vetor;
    comp,i,j,n,ncomp,icomp,natm,iatm,verif,indcomp,io,
    teste,teste2,por:integer;
    aux1,aux2,aux3,aux4,aux5,aux6,Ti,Tr,Tinf,Taquec,Ttot,Tbp,
    aux7,aux8,aux9,aux10,aux11,AuxTemp,Pparc,
    Svi,Mmi,Pin,Dab,Mab,k,km,kar,kag,khep,
    Tc1,Tc2,Hlv,Q0,G0,
    Dt,Tn,Tn1,di,ri,mn,mn1,mn,mn1,cp,cpmist,cpvap,cpar,db,Le,
    roliq,romist,raquec,rfinal,tffinal,constevap,teste3:real;
    compdif,fim:char;
    tipocomp,comp1:vetor1;
    arq:text;

{calculo de potenciação}

function YelevX(X,Y:real):real;

begin
    YelevX:=exp(X*Ln(Y));
end;

{associação de constantes para cálculo de Pressão de Vapor}

procedure AssociaConst(comp:vetor1;io:integer;var aux1,aux2,aux3,
    aux4,aux5,aux6,aux11:real);

begin
case upcase (Comp[io]) of
    'G':begin
        aux5:=647.3;
        aux6:=221.2;
        aux7:=-7.76451;
        aux8:=1.45838;
        aux9:=-2.77580;
        aux10:=-1.23303;
    end;
    'N':begin
        aux1:=3.919E-4;
        aux2:=9.816E-5;
        aux3:=-5.067E-8;
        aux4:=1.504E-11;
        aux5:=126.2;
        aux6:=33.9;
    end;
end;
```

```

    aux11:=28;
  end;
'O':begin
  aux1:=-3.273E-4;
  aux2:=9.966E-5;
  aux3:=-3.743E-8;
  aux4:=9.732E-12;
  aux5:=154.6;
  aux6:=50.4;
  aux11:=32;
end;
'H':begin
  aux5:=540.3;
  aux6:=27.4;
  aux7:=-7.67468;
  aux8:=1.37068;
  aux9:=-3.53620;
  aux10:=-3.20243;
end;
else
begin
  writeln('Composto nao cadastrado');
end;
end;

```

{Calculo de propriedades: Massa específica, calor específico}
{Entalpia, difusividade }

```

procedure MolecDef(compdef:vetor1;i:integer;T,Tliq:real;
  var hlv1,cpvap1,cpar1,roliq1,Dab1:real);

var bum,auxhlv,auxt1,cpo2,cpn2:real;

begin
  auxt1:=T/100;
  case upcase (compdef[i]) of
    'A':begin
      Svi:=19.7;
      Mmi:=28.84;
      kar:=0.026*YelevX(0.83,T/293);
      hlv1:=0;
      cpn2:=(39.060-512.79*YelevX(-1.5,auxt1)+1072.7*YelevX(-2,auxt1)-
        820.4*YelevX(-3,auxt1))*1000/28;
      cpo2:=(37.432+0.020102*YelevX(1.5,auxt1)-178.57*YelevX(-1.5,auxt1)-
        236.88*YelevX(-2,auxt1))*1000/32;
      cpar1:=0.232*cpo2+0.768*cpn2;
      roliq1:=0;
    end;
    'G':begin
      Svi:=13.1;
      Mmi:=18;
      kag:=0.024*YelevX(1.45,(T/373.15));
      cp:=4187;
      auxhlv:=((1-Tliq/647.3)/0.439);
      hlv1:=2283200*YelevX(0.37,auxhlv);
    end;
  end;
end;

```

```

cpvap1:=(143.05-183.54*YelevX(0.25,(T/100))+82.751*YelevX(0.5,(T/100))
         -3.6989*(T/100))*1000/18;
roliq1:=997-0.45*(Tliq-298);
Dab1:=2.9e-5*YelevX(1.75,(T/313));

end;
'H':begin
Svi:=148.26;
Mmi:=100.16;
bum:=2-0.0372*sqr(T/371.4);
khep:=0.01012*YelevX(bum,T/273);
cp:=(760+3.35*Tliq)/sqrt(0.6878);
auxhlv:=((1-Tliq/540.17)/0.312);
hlv1:=371800*YelevX(0.375,auxhlv);
cpvap1:=(363+0.467*T)*(5-0.001*687.8);
roliq1:=687.8*(1-1.8*7.5*0.0001*(Tliq-288.6)-0.09
               *sqr((Tliq-288.6)/(540.17-288.6)));
Dab1:=0.00001*YelevX(1.75,(T/298));

end;

end;

```

{procedimento para cálculo de pressão parcial}

```

procedure CalcPressParc(var Pp:vetor;Tc,Pc,PvpA,PvpB,PvpC,PvpD:vetor;T:real);

var TT:real;
begin
TT:=1-(T/Tc[2]);
Pp[2]:=Pc[2]*exp((PvpA[2]*TT+PvpB[2]*YelevX(1.5,TT)+PvpC[2]*YelevX(3,TT)
                  +PvpD[2]*YelevX(6,TT))/(1-TT));
Pp[1]:=1-Pp[2];
end;

```

{procedimento para calculo de fração molar}

```

Procedure CalcFr(Pp,Mm:vetor;Pt:real; var X,Y:vetor);

var indc:integer;

begin
for indc:=1 to 2 do
  X[indc]:=Pp[indc]/Pt;
  Y[2]:=X[2]*Mm[2]/(X[2]*Mm[2]+X[1]*Mm[1]);
  Y[1]:=1-Y[2];
end;

```

{procedimento para cálculo de condutividade da mistura ar-vapor}

```

procedure CalcCondMist(ki,x,Mm:vetor;T:real;var km:real);

var ind:integer;
den,aijf:real;

```

```

begin
  km:=((X[1]*YelevX(3,Mm[1])*ki[1])+(X[2]*YelevX(3,Mm[2])*ki[2]))/
    (X[1]*yelevx(3,Mm[1])+X[2]*yelevx(3,Mm[2]));
end;

{procedimento para cálculo do calor específico da mistura ar-vapor}

procedure CalcCpMist(xiref1:vetor;cpvap2,cpar2:real;var cpmist2:real);
begin
  cpmist2:=xiref1*cpar2+xiref2*cpvap2;
end;

{função que lendo as massas moleculares dos componentes, retorna a }
{massa molecular da mistura } }

function MMmist(X,Mm:vetor):real;
begin
  MMmist:=(X[1]*Mm[1]+X[2]*Mm[2]);
end;

{corpo do Programa}

begin
repeat
  clrscr;
  Assign(arq, 'c:\poli\evap.out');
  Rewrite(arq);
  writeln;
  writeln;
  Writeln('      Coleta de dados');
  writeln;
  writeln;
  writeln('Digite o Diametro inicial da gota (m)');
  readln(Di);
  Writeln('Digite a temperatura inicial do Liquido (K)');
  readln(Ti);
  Writeln('Digite a temperatura da Chama (K)');
  readln(Tinf);
  Writeln('Digite a Pressão total da mistura (bar)');
  readln(Pin);
  writeln('Entre com o passo de integração');
  readln(Dt);
  for indcomp:=1 to 2 do
  begin
    Writeln('Componentes (A)r, A(G)ua , (H)eptano ou (O)utros');
    Readln(TipoComp[indcomp]);
  end;
  Tn:=Ti;

```

```

rn:=di/2;
Ttot:=0;
teste:=0;
teste3:=0;
taquec:=0;
Hcomb:=44922000;
fbp:=352.6;
Repeat
  Tr:=Tn+(Tinf-Tn)/2;
  teste:=teste+1;

  if teste3 <> 1
    then
      begin
        for i:=1 to 2 do
          begin
            if upcase (tipocomp[i])='A'
              then
                begin
                  verif:=0;
                  MolecDef(tipocomp,i,Tr,Tn,hlv,cpvap,cpar,roliq,Dab);
                  ki[1]:=kar;
                  Sv[1]:=Svi;
                  Mm[1]:=Mmi;
                  aux5:=131.3;
                  aux6:=33.9;
                end
            else
              if upcase (tipocomp[i]) = 'G'
                then
                  begin
                    MolecDef(tipocomp,i,Tr,Tn,hlv,cpvap,cpar,roliq,Dab);
                    associaconst(tipocomp,i,aux1,aux2,aux3,aux4,
                                 aux5,aux6,aux11);
                    verif:=1;
                    ki[2]:=kag;
                  end
            else
              if upcase (tipocomp[i]) = 'H'
                then
                  begin
                    MolecDef(tipocomp,i,Tr,Tn,hlv,cpvap,cpar,roliq,Dab);
                    associaconst(tipocomp,i,aux1,aux2,aux3,aux4,
                                 aux5,aux6,aux11);
                    verif:=1;
                    ki[2]:=khep;
                  end;
            Tc[i]:=aux5;
            Pc[i]:=aux6;
            PvpA[i]:=aux7;
            PvpB[i]:=aux8;
            PvpC[i]:=aux9;
            PvpD[i]:=aux10;
            Sv[i]:=Svi;
            Mm[i]:=Mmi;
            if verif=1

```

```

    then
      begin
        CalcPressParc(Pp,Tc,Pc,PvpA,PvpB,PvpC,PvpD,Tn);
        CalcFr(Pp,Mm,Pin,Xi,Yi);
      end;
    end;
  Yiref[2]:=(1/2)*Yi[2];
  Yiref[1]:= 1-Yiref[2];
  Xiref[2]:=(Yiref[2]/Mm[2])/(Yiref[2]/Mm[2]+Yiref[1]/Mm[1]);
  Xiref[1]:=1-Xiref[2];
  CalcCondMist(ki,Xiref,Mm,Tr,km);
  CalcCpMist(xiref,cpvap,cpar,cmist);
  romist:=Pin*1e5*MmMist(Xiref,Mm)/(8314.4*Tr);

  G0:=romist*Dab*Ln(1+((Yi[2]+0.0154)/(1-Yi[2])))/rn;
  rn1:=rn-(Dt*G0/roliq);
  Q0:=cmist*G0*(Tinf-Tn)/(exp(G0*cmist*rn/km)-1);
  AuxTemp:=Q0-G0*Hlv;
  Tn1:=Tn+(3*Dt)/(rn*roliq*cp)*AuxTemp;

  IF Tn1-Tn<0.00001
    then
      begin
        teste3:=1;
        Taquec:=Ttot;
        raquec:=rn1;
        writeln;
        writeln;
        writeln('Temperatura estabilizada= ',Tn1:3:2);
        writeln('Raio ao final do Aquecimento= ',raquec:5:6);
      end;
    Tn:=Tn1;
    Rn:=Rn1;
    teste2:=Teste mod 50;
  end
  else
    begin
      G0:=romist*Dab*Ln(1+((Yi[2]+0.0154)/(1-Yi[2])))/rn;
      Q0:=cmist*G0*(Tinf-Tn)/(exp(G0*cmist*rn/km)-1);
      By:=(cmist*(Tinf-Tn)+Hcomb*0.0154)/(q0/g0);
      rn1:=rn-(Dt*G0/roliq);
      rn:=rn1;
      teste2:=Teste mod 50;
    end;
  Ttot:=Ttot+Dt;
  Le:=km/(romist*cmist*dab);

  if teste2=0
    then WriteLn(arq,Ttot,Rn,Le);
  if rn>0.000001
    then
      begin
        rfinal:=rn;
        tfinal:=ttot;
      end;
  Until rn<=0;

```

```
constevap:=(sqr(2*raquec*1000)-sqr(2*rfinal*1000))/(Tfinal-Taquec));
close(arq);
writeln;
writeln;
writeln;
writeln('Tempo total= ',ttotal:3:2);
writeln('Tempo de Aquecimento= ',taquec:3:2);
writeln;
writeln('K= ',constevap:3:3);
writeln;
writeln('(F)inaliza ou (N)oova simula&Eacuteo');
readln(fim);
until uppercase (fim)='F'
end.
```