

Escola Politécnica da Universidade de São Paulo
Departamento de Engenharia Metalúrgica e de
Materiais.



**Construção do Modelo Matemático para Estudo da
Redução na Pelota Auto-Redutora.**

Nome: Daniel de Souza Huallem. N°USP: 443359

Orientador: Profº Dr. Marcelo Breda Mourão

São Paulo
Dezembro
2000

AGRADECIMENTOS

O autor deste trabalho deseja agradecer às seguintes pessoas:

Ao Professor Doutor Marcelo Breda Mourão pelos ensinamentos transmitidos e pela tranquilidade e habilidade para encontrar as soluções nos momentos delicados do trabalho.

Ao Professor Antonio Sergio Munhoz pela ajuda na elaboração do modelo matemático, paciência e suporte em todas as horas de valiosas discussões.

Aos meus irmãos, Renata e Gustavo, pelo apoio e incentivo.

Ao amor da minha vida, Silvia Iara Cassiano Ribeiro, pela paciência, ajuda no trabalho de digitação e confiança transmitida durante a realização deste trabalho.

E, principalmente, aos meus pais, Alfredo Huallem e Maria Eduarda de Souza Huallem, pelos ensinamentos e valores de vida transmitidos.

RESUMO

Neste trabalho estudou-se a redução carbotérmica do minério de ferro por meio de pelotas auto-redutoras, onde foi proposto um modelo matemático para simular o perfil térmico das temperaturas do centro e da superfície da pelota em função do tempo. Desta forma, analisou-se o comportamento do modelo ao alterarmos alguns parâmetros, como temperatura do forno e raio da pelota. A análise do trabalho indicou que o aumento do raio da pelota acarreta um aumento do gradiente de temperatura (centro-superfície) e um aumento da temperatura do forno implica, novamente, em aumento do gradiente de temperatura (centro-superfície). Além desta análise do modelo, foi feita uma comparação com os dados experimentais obtidos por Mourão {01}, onde o modelo comprovou ser consistente ao apresentar comportamento semelhante aos dados experimentais. Contudo, quando comparamos os gráficos obtidos pelo modelo e pelos dados experimentais {01}, na mesma temperatura do forno e mesmo tempo de processo, observamos que há uma diferença considerável no gradiente de temperatura, explicada pelo fato do modelo ter estimado um valor para o coeficiente de transferência de calor e condutividade térmica específica não muito exata. Por isso, foi inserida no capítulo de Resultados e Discussão a análise da variação do valor do coeficiente de transferência de calor e condutividade térmica específica, que mostra o forte impacto da variação destes parâmetros sobre o gradiente de temperatura apresentado pelo modelo. Apesar deste trabalho apresentar apenas o perfil de temperatura, vale ressaltar que o modelo matemático descrito no capítulo 8.3 (ver listagem) contempla outros parâmetros e têm como objetivo transformar-se em um modelo matemático completo para o estudo da redução de pelotas auto-redutoras.

Lista de Figuras

Fig4.1–Barra Delgada isolada termicamente.....	19
Fig 5.1 – A Tarefa do Método Numérico.....	21
Fig 6.1 – Região Contínua e Discretizada.....	22
Fig 7.1- Discretização Unidimensional.....	24
Fig 7.2 – Malhara para o problema unidimensional transiente.....	27
Fig 7.3- Comportamento da Solução Transiente.....	29
Fig 7.4- Tipo de Conexões nas formulações estudadas.....	33
Fig 9.1- Dados experimentais elaborados por Mourão {01} para pelota de raio $R_p = 8$ mm e temperaturas de forno igual a 1223 K e 1373 K.....	57

Lista de Tabelas

Tab 7.1- Solução Numérica da Eq. 3.1.....	29
---	----

Lista de Gráficos

Graf. 9.1 Resultado gráfico do modelo (temperatura da superfície e centro vs. tempo) para pelota de raio 8 mm e temperatura do forno 1223 K.....	49
Graf. 9.2 Resultado gráfico do modelo (temperatura da superfície e centro vs. tempo) para pelota de raio 12 mm e temperatura do forno 1223 K.....	50
Graf 9.3- Referência ao gradiente de temperatura no início do processo de redução para a pelota de $R = 12$ mm e $T_F = 1223$ K (temperatura do forno)...	51
Graf 9.4 – Comportamento da temperatura do centro e da superfície da pelota de raio 12mm e Temperatura do forno 1623K, incluindo alterações no h_g e K_e	52

Graf 9.5 – Comportamento da temperatura do centro e da superfície da pelota de raio 12mm e Temperatura do forno 1623K.....	53
Graf 9.6 – Comportamento da temperatura do centro e da superfície da pelota de raio 8mm e Temperatura do forno 1623K, incluindo alterações no hg e Ke.....	54
Graf 9.7 – Comportamento da temperatura do centro e da superfície da pelota de raio 8mm e Temperatura do forno 1623K.....	55

Sumário

1- Introdução.....	7
1.1- Modelos Matemáticos.....	9
1.2- Diferenças Finitas, Volumes Finitos e Elementos Finitos.....	10
2- Objetivos.....	11
3- Modelo Físico.....	12
3.1 Transferência de Calor e Reações Químicas.....	12
3.2 Cinética e Mecanismos.....	13
3.3 Balanço de Massa.....	14
4- Equações Diferenciais.....	15
4.1 Estado Estacionário.....	17
4.2 Problemas Transientes.....	18
4.3 Equações Parabólicas.....	18
5- A Tarefa do Método Numérico.....	20
6- Aproximação por Diferenças Finitas.....	21
7- Discretização em Métodos de Diferenças Finitas.....	24
7.1- Formulação Explícita.....	26
7.2- Formulação Totalmente Implícita.....	29
7.3- Formulação Implícita.....	32
8- Simulação Matemática.....	33
8.1- Parâmetros e Fórmulas Aplicadas ao Programa.....	34
8.2- Scilab (Software).....	40
8.3- Programação.....	41
9- Resultados e Discussão.....	48
9.1 Efeito do Diâmetro da pelota.....	49

9.2 Gradiente de Temperatura no Início do Processo de Redução.....	51
9.3 Variação do Coeficiente de Transferência de Calor e Condutividade Térmica Específica.....	52
9.4 Comparação com Dados Experimentais.....	56
10- Conclusão.....	57
11- Anexos.....	58
12-Referências Bibliográficas	69

Construção do Modelo Matemático para Estudo da Redução na Pelota Auto-Redutora.

1- INTRODUÇÃO

A mistura de minério oxidado com uma fonte de carbono, que pode ser vegetal ou fóssil e subsequente aquecimento desta mistura, em geral pela queima de parte do próprio carbono, provavelmente é o mais antigo processo empregado para obtenção de metais. Em linhas gerais, este processo continua até hoje como o mais importante na metalurgia extrativa e na siderurgia.

No longo período de tempo em que o processo de obtenção de metais por redução de óxidos por carbono foi sistematicamente empregado e estudado, juntou-se uma quantidade enorme de informações e conhecimentos, que tornaram possível fazer com que os processos industriais, principalmente os modernos alto-fornos para produção de ferro gusa, chegassem a níveis de desempenho considerados excepcionais.

Entretanto, existem limitações de ordem econômica e estratégica que recomendam a busca de processos alternativos aos modernos altos-fornos. Entre estas limitações podem-se citar: reservas limitadas de carvões coqueificáveis, essenciais para os modernos altos-fornos; localização destas reservas não distribuídas igualmente entre as nações; e investimentos muito elevado na construção de modernos altos-fornos.

Os processos alternativos existentes aos altos-fornos são classificados sob a designação geral de processos de redução direta; baseia-se na redução do minério por redutor sólido ou gasoso, sem a fusão do produto, obtendo-se o chamado ferro-esponja. Processos mais modernos, com uso de plasma, prevêm a obtenção de produto líquido.

No caso do Brasil, pobre em carvões coqueificáveis de boa qualidade, com necessidade de expandir rapidamente a produção de ferro e aço, com reservas apreciáveis de carvões fósseis impróprios para coqueificação, e ainda com vasto território propício à produção de carvão vegetal, os processos de redução direta baseados em redutor sólido tem atrativo especial.

O processo de obtenção de ferro e aço por meio de pelotas auto-redutoras é importante especialmente quanto ao caráter econômico. Isto se deve ao fato de representar uma alternativa a implantação de novas usinas siderúrgicas ou de instalações de grande porte, bem como à necessidade de coqueificação do carvão. A própria limitação das reservas de carvão coqueificável, já citado anteriormente, também justificaria o estudo de processos alternativos.

Além disso, através deste processo consegue-se aproveitar o material particulado, proveniente da extração e moagem (tanto em relação ao minério de ferro quanto ao carvão). Ressalta-se ainda o caráter de preocupação ambiental, uma vez que os processos atuais são extremamente poluentes, em que pesem os métodos de tratamento de resíduos.

Extensivas pesquisas vêm sendo conduzidas para o estudo da cinética e dos mecanismos do sistema minério de ferro/carbono.

Na maioria destes estudos reportados na literatura, a mistura de óxido de ferro (hematita ou magnetita)/ carbono (carvão) foi preparada na forma de pelotas. E o método de perda de massa foi usado com freqüência como medida da taxa de reação.

Esses experimentos baseiam-se num entendimento qualitativo do sistema de reações. Contudo, informações quantitativas, particularmente com relação à variação de temperatura e mudança na composição da mistura em função do tempo de reação não foram consideradas nestas investigações. Assim, só era possível obter um modelo matemático isotérmico simples. (Mourão {1})

1.1 Modelos Matemáticos

Ferramentas numéricas vem sendo cada vez mais aplicadas na solução de problemas das mais diversas áreas do conhecimento humano devido, em grande parte, ao rápido crescimento dos suportes computacionais em termos de velocidade de processamento e capacidade de armazenamento de dados.

Na engenharia o uso destas ferramentas tem sido de fundamental importância para o entendimento e solução de diversos problemas que antes só eram possíveis através de experimentos em laboratório. A experimentação em laboratório, tem como principal vantagem lidar com o problema real, entretanto, na maioria dos casos, o entendimento dos diversos parâmetros de um determinado problema é bastante demorado. Isto sem considerarmos os custos envolvidos na realização de um experimento em laboratório. Salienta-se que em muitas situações de engenharia nem sempre é possível a realização de experimentos em laboratório como acontece, por exemplo, com o escoamento supersônico a grandes altitudes ou na recuperação de petróleo. Nestas situações a simulação numérica passa a ser a principal ferramenta disponível ao engenheiro.

Atualmente a simulação numérica consegue resolver os mais diversos problemas da engenharia, onde geralmente envolvem modelos matemáticos complexos aliados a geometrias também complexas. Quando os modelos matemáticos não são bem estabelecidos a simulação numérica deve caminhar lado a lado com a experimentação na busca de modelos matemáticos que representem de forma adequada um determinado problema. Quando estes modelos estão bem estabelecidos a tarefa repetitiva de analisar o efeito dos diversos parâmetros de um determinado problema deve ser deixada a cargo da simulação numérica.

Um dos objetivos deste trabalho é apresentar o método de diferenças finitas aplicados a problemas de transferência de calor e mecânica dos fluidos. Assim, a preocupação é apresentar os esquemas de discretização, integração das equações, linearização e procedimentos iterativos aplicados às equações de mecânica dos fluidos e transferência de calor empregando malhas cartesianas.

Os modelos matemáticos baseiam-se em três métodos básicos: Diferenças Finitas, Volumes Finitos e Elementos Finitos.

1.2 Diferenças Finitas, Volumes Finitos e Elementos Finitos.

A validação dos modelos e métodos matemáticos levam à discussões fervorosas a respeito da eficiência do método das diferenças finitas (MDF) e elementos finitos (MEF). O MDF sempre foi empregado pelos analistas da área de escoamento de fluídos, enquanto o MEF o foi para área estrutural, na resolução de problemas de elasticidade. Os problemas do ponto de vista físico são completamente diferentes. Os de escoamento são altamente não-lineares, enquanto os da elasticidade não possuem os termos convectivos, não-lineares, e assemelha-se a problemas puramente difusivos de transferência de calor. Assim, de forma natural, os pesquisadores do MDF se concentraram em desenvolver e dominar as não-linearidades dos termos convectivos e no problema do difícil acoplamento entre as equações, sendo estas dificuldades não encontradas nos problemas de elasticidade.

O tratamento de geometrias complexas foi deixado de lado e o MDF teve seu desenvolvimento baseado no sistema de coordenadas ortogonais, como o cartesiano, o cilíndrico e o esférico. Por este motivo, muitas pessoas confundem o MDF com malhas cartesianas, onde na verdade pode ser aplicado a qualquer tipo de malha, mesmo a não-estruturada usada em elementos finitos. Por outro lado, o MEF sempre teve a vantagem de usar malhas não-estruturadas, possibilitando assim a resolução de problemas de engenharia que envolva geometrias complexas.

Diante deste quadro, onde o MDF se apresentava como um método com grande experiência na área de fluídos, mas limitado no tratamento de geometrias complexas; e o MEF, hábil no tratamento de geometrias, mas sem ferramentas para tratar os termos convectivos presentes nas equações do movimento.

O MEF não teve sucesso imediato em problemas de fluídos, uma vez que é adequado apenas para problemas puramente difusivos. Estes e outros problemas similares, que possuem a adequada interpretação física pelo não funcionamento, motivaram pesquisas para o aprimoramento do método dos volumes finitos (MVF), no

qual as equações aproximadas são obtidas através de balanços de conservação da propriedade envolvida (massa, quantidade de movimento, entalpia, etc) no volume elementar. A observação do caráter físico de cada termo da equação diferencial permitiu que métodos mais robustos fossem desenvolvidos. A possibilidade de associar a interpretação física com a matemática influi de modo considerável para que praticamente todos os analistas envolvidos com o MDF passassem a usar o MVF, visto que ambos, por serem equivalentes para uma série de problemas, levam muitas pessoas a confundí-los. Posteriormente desenvolveu-se em demasia o MVF, mas ainda em coordenadas ortogonais, principalmente cartesianas.

Uma grande transformação, motivada pelo aparecimento de equipamentos mais velozes, processou-se na década de 70. Em meados dessa década, os sistemas coordenados ortogonais convencionais começaram a ceder espaço para os sistemas coordenados generalizados coincidentes com a fronteira do domínio, e o MVF passou a resolver problemas de fluidos em geometrias irregulares. Nos últimos 15 anos, foi espantoso o crescimento experimentado pelo MVF em coordenadas coincidentes com a fronteira. Praticamente todos os grandes pacotes hoje disponíveis no mercado para a solução de problemas de escoamento de fluidos com transferência de calor empregam coordenadas generalizadas no âmbito do MVF.

Atualmente, um grande esforço de pesquisa está sendo dedicado ao desenvolvimento de métodos em volumes finitos, usando malhas não estruturadas, semelhantes, portanto, àsquelas usadas em elementos finitos. (Maliska {14})

2 - OBJETIVOS

Este trabalho tem como objetivo estudar e simular o processo de redução de pelotas auto-redutoras de minério de ferro e carvão mineral desvolatizado através de um modelo matemático.

3- Modelo Físico

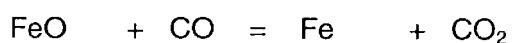
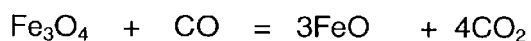
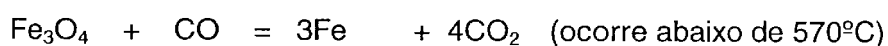
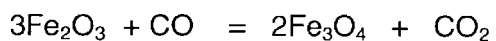
3.1 Transferência de Calor e Reações Químicas

Neste trabalho será estudada a transferência de calor em pelotas auto-redutoras, compostas inicialmente pelo minério de ferro (hematita) e carbono. As equações químicas envolvidas neste modelo são:

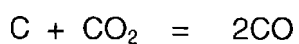
Reação Química	Faixa de Validade (K)
$C + CO_2 = 2CO$	298-2000
$FeO + CO = Fe + CO_2$	298-1642
$Fe_3O_4 + CO = 3FeO + 4CO_2$	298-1642
$3Fe_2O_3 + CO = 2Fe_3O_4 + CO_2$	298-1460

Tab. 3.1 Faixa de Validade de Reação- {09}

Reações de Redução:



Equação de Bourdoudard:



As variáveis e parâmetros envolvidos na transferência de calor serão descritos detalhadamente na seção 8.1 (Parâmetros e Fórmulas Aplicadas no Programa) deste trabalho.

Baseado nas evidências experimentais de que o processo não é isotérmico, que a velocidade tem grande aumento com o aumento da temperatura, e levando em conta que o processo é fortemente endotérmico, pode-se levantar a hipótese do processo ser controlado por transporte de calor. Assim, podemos tirar algumas conclusões:

- A redução de pelotas de hematita e magnetita com carbono sólido é um processo não-isotérmico.
- O estágio inicial do processo tem alta velocidade, a qualquer temperatura, durante o qual grande parte da reação ocorre. No segundo estágio, a velocidade de reação diminui com o tempo, e a conversão da wustita a ferro é lenta.
- O processo ocorre através de intermediários gasosos; a reação de redução dos óxidos de ferro é controlada pela velocidade de geração de monóxido de carbono pela reação de gaseificação do carvão, mas isto não quer necessariamente dizer que o processo global seja quimicamente controlado, sendo que a etapa mais lenta pode ser o suprimento de energia necessário para o sistema manter uma velocidade significativa da reação de Boudouard.

3.2 Cinética e Mecanismos ({1})

A cinética de redução de óxidos metálicos por redutores gasosos, de maneira geral, e a redução de óxidos de ferro por misturas CO-CO₂, em particular, tem sido extensivamente estudadas nas últimas décadas. Existem várias revisões sobre os diversos modelos propostos, dentre as quais as de Bogdandy et al { 13}, Villegas et al{12}, Turkdogan {14} , Martins {15} e D'Abreu {16} .

Os modelos de reação evoluíram desde os que consideravam a reação química como a principal controladora do processo global, até modelos complexos levando em conta transformações estruturais durante a redução, passando por várias abordagens do problema de transporte de massa e do modo de redução.

Segundo Turkdogan {18}, na redução de uma partícula porosa de um óxido metálico por um gás redutor, tem-se no caso mais geral a formação de três zonas

distintas, a saber: camada de metal junto à interface com o gás; camada de óxido e metal, correspondendo à região onde houve redução interna; e núcleo de óxido. Para partículas pequenas, menores que 1 mm, reduzidas a temperaturas relativamente baixas, ocorre apenas uma zona, composta de mistura metal-óxido, ocorrendo redução interna em todas as secções da partícula. Para temperaturas maiores, a velocidade da reação química é maior e pode haver um núcleo de óxido, mas não há formação de camada contínua de metal devido às dimensões da partícula.

Trushenski et al {21} determinaram as energias de ativação para a redução de Fe₂O₃, Fe₃O₄ e "FeO" por CO, obtendo os valores de 69.0, 78.2 e 116 kJ/mol, respectivamente.

Outros autores obtiveram valores diferentes, menores, e estas diferenças são devidas a influências de fenômenos de transporte.

El-Geassy et al { 19} estudaram a redução de wustita por H₂, CO e misturas CO-H₂; mostraram que na redução por CO a velocidade é determinada por decomposição de um composto intermediário que pode formar-se durante a redução (Fe (CO₂)), e/ou pela velocidade de dessorção do CO₂; mostraram ainda que o mecanismo de redução da wustita pelo CO é bastante influenciado pela pressão total do sistema, fazendo com que a ordem de reação não seja unitária. Ainda segundo estes autores, a adição de pequenas quantidades de hidrogênio ao CO aumenta muito a velocidade de reação, devido à maior formação de núcleos de ferro na wustita, que crescem em seguida sob o efeito combinado dos dois gases.

Hayes{17} fez uma revisão dos trabalhos prévios sobre o assunto e mostrou que o controle por reação química só pode ocorrer a baixas pressões parciais do gás ou para misturas gasosas próximas do equilíbrio com o óxido, ou seja, quando a velocidade da interface de reação é pequena comparada com transporte de massa. Segundo este autor, a reação química é controlada pela reação entre oxigênio adsorvido e monóxido de carbono gasoso, produzindo dióxido de carbono.

Rao {20} chamou a atenção para o efeito das etapas de nucleação e crescimento do produto metálico sobre as características cinéticas da reação; outros autores

abordaram este aspecto, e fica claro que estas etapas têm importantes implicações sobre a cinética e as transformações estruturais que ocorrem durante a redução.

3.3 Balanço de Massa

As espécies gasosas presentes no modelo representam o produto das reações de redução e a reação de Boudouard. Este produto forma o fluxo gasoso do sistema, que é composto pelos gases CO e CO₂.

O fluxo gasoso no interior da pelota se dá pela difusão porosa, ao assumirmos perfil de pressão uniforme.

O balanço de massa pode ser representado segundo a equação:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Phi \rho_j) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\Phi}{\tau} D_{eff} \frac{\partial \rho_j}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (\rho_j v_o) - \sum N_{ij} M_j$$

onde:

M_j – representa o peso molecular da espécie gasosa j

N_{ij} -consumo de j / gerado i.

ϕ - porosidade da pelota.

V_o - velocidade superficial do gás.

τ -fator de tortuosidade.

D_{eff} -difusividade efetiva da espécie j na fase gasosa.

ρ_j -densidade da espécie gasosa j.

4- EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

Este capítulo apresenta os principais conceitos referentes às equações diferenciais parciais (EDP's), salientando a diferença entre elas, tanto do ponto de vista físico quanto matemático.

Considerando que a forma mais geral para representar uma equação diferencial parcial de segunda ordem com duas variáveis independentes é:

$$Lw = aw_{xx} + 2bw_{xy} + cw_{yy} + dw_x + ew_y + fw = g; \quad (\text{Eq. 4.1})$$

onde a,b,c,d,e,f,g são funções de variáveis independentes e subscrevem derivadas parciais. O principal termo do operador L é:

$$a \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2b \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad (\text{Eq. 4.2})$$

A equação parcial diferencial pode ser representada pela equação $Lw = g$; onde se pode fazer a classificação:

- Hiperbólica
- Parabólica
- Elíptica

Esta classificação deve obedecer a seguinte condição:

$$b^2 - ac > 0$$

$$b^2 - ac = 0$$

$$b^2 - ac < 0$$

O $b^2 - ac$ é chamado de discriminante de L. O procedimento para resolver cada tipo de equação diferencial parcial é diferente. Alguns exemplos de equações:

$w_{xx} + w_{yy} = 0$, Equação de Laplace, tipo elíptica.

$w_{xx} - c^2 w_{yy} = 0$, Equação de onda, tipo hiperbólica.

$w_x - Dw_{yy} = 0$, Equação de difusão, tipo parabólica.

A resolução da equação parcial diferencial na forma geral deve recorrer às condições iniciais e/ou de superfície, com a finalidade de entender o significado do problema proposto. Estas condições determinam os domínios onde será resolvida a equação.

Esta classificação das equações diferencial vai de encontro aos fenômenos físicos associados. Além disso, métodos numéricos que funcionam para uma categoria de equações podem não funcionar para as demais.

Na natureza pode-se distinguir dois tipos básicos de fenômenos físicos: aqueles que evoluem no tempo, chamados de transientes, e os que estão sujeitos a um estado de equilíbrio, chamados de estacionários. Contudo, estes processos freqüentemente aparecem juntos. Um exemplo é quando uma xícara de café quente esfria. Esse é um fenômeno transiente, pois o café perde calor, ou seja, reduz a sua temperatura com o tempo. Quando o café atinge o equilíbrio térmico com o ambiente, ou seja, não havendo mais troca de calor, a temperatura não mais se altera: é o estado estacionário. Existem métodos numéricos apropriados para simular cada um dos dois tipos de processos.

4.1 Estado Estacionário

Problemas de equilíbrio (estacionários) são aqueles nos quais a propriedade de interesse não se altera com o passar do tempo. Matematicamente, esses problemas são, em geral, representados por equações diferenciais parciais elípticas, cuja equação modelo é a equação de Laplace. Em coordenadas cartesianas bidimensionais, essa equação pode ser escrita como:

$$\nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (\text{Eq. 4.3})$$

em que Φ é a variável dependente e ∇^2 é o operador laplaciano que, em coordenadas cartesianas bidimensionais, é dado por:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad (\text{Eq. 4.4})$$

4.2 Problemas Transientes

Os problemas transientes, ou de propagação, envolvem a variação temporal das grandezas físicas de interesse. A partir dos valores iniciais dessas grandezas em um certo tempo t_0 , calculam-se, pela solução numérica da equação diferencial parcial (quando não se dispõe da solução analítica), seus novos valores em sucessivos intervalos de tempo Δt , até alcançarmos o instante final t_f :

$$t_0 + \Delta t, t_0 + 2\Delta t, t_0 + 3\Delta t, \dots, t_f - \Delta t, t_f \quad (\text{Eq. 4.5})$$

Note-se que estamos caminhando (marchando) na direção temporal em “passos” de comprimento Δt , desde t_0 até t_f . Por isso, problemas transientes são também denominados “problemas de marcha” (marching problems). O valor de Δt deve ser escolhido conforme o problema tratado e o método numérico empregado.

Quando se resolve um problema transiente, busca-se a evolução temporal efetiva da grandeza física. Para que essa evolução seja representativa do problema estudado, é necessário ter-se uma condição inicial fisicamente correta. Assim, deve-se tomar cuidado ao inserir os dados de entrada do problema, especialmente as condições iniciais e de contorno.

Os fenômenos transientes são modelados por equações diferenciais parabólicas ou hiperbólicas. Quando apresentam mecanismos de dissipação de energia (por exemplo, na difusão de calor e no escoamento de fluidos viscosos), os fenômenos ditos dissipativos são descritos por equações parabólicas. Caso contrário, são representados por equações hiperbólicas.

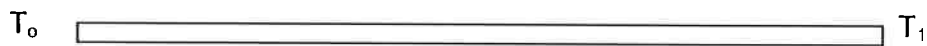
4.3 Equações Parabólicas

A equação modelo para problemas parabólicos é a equação transiente de difusão de calor:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (\text{Eq. 4.6})$$

na qual T é a temperatura e α é o coeficiente de difusividade térmica do material. Como exemplo, considere-se a barra delgada de comprimento 10 cm, mostrada na figura abaixo, isolada termicamente ao longo de seu comprimento, mas que tem suas extremidades mantidas às temperaturas $T_0 = T_1 = 50^\circ\text{C}$

Fig 4.1 – Barra Delgada isolada termicamente



Supondo a barra inicialmente à temperatura de $T = 0^\circ\text{C}$, queremos conhecer sua evolução temporal ao longo da barra. A partir do estado inicial, passamos por uma sucessão de distribuições de temperaturas transientes. Após um tempo suficientemente longo, o equilíbrio térmico (estado estacionário) é alcançado e a temperatura da barra não mais varia. Obtemos, então, uma distribuição uniforme de temperatura.

Para podermos estudar a evolução temporal da temperatura na barra, é necessário que o valor inicial da temperatura ao longo da mesma seja especificado. Com essa informação, e sabendo que a temperatura nos extremos da barra é mantida a 50°C (condição de fronteira), obtemos a distribuição de temperatura ao longo da barra para diferentes instantes de tempo. As condições de fronteira, combinadas com condições iniciais, serão denominadas de condições auxiliares.

Aqui podemos observar uma diferença fundamental entre problemas transientes e de equilíbrio. Quando procuramos a distribuição estacionária de temperatura na barra, a temperatura inicial da chapa não foi levada em consideração. Isso porque a distribuição de temperatura no equilíbrio térmico não depende da temperatura; só depende das condições de fronteira (no caso, da temperatura nas bordas da chapa). Obviamente,

quanto mais “diferente” a distribuição inicial de temperatura da chapa for da distribuição estacionária de temperatura, mais tempo a chapa demorará a atingir o equilíbrio térmico.

Assim, ao contrário dos problemas de equilíbrio, os problemas transientes necessitam de valores para a variável dependente.

5- A Tarefa do Método Numérico

A tarefa de um método numérico é resolver uma ou mais equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes na equação por expressões algébricas que envolvem a função incógnita. Um método analítico que tivesse habilidade de resolver tais equações nos daria a solução em uma forma fechada e seria possível, então, calcular os valores das variáveis dependentes em nível infinitesimal, isto é, para um número infinito de pontos.

Por outro lado, quando decidimos fazer uma aproximação numérica da equação diferencial, aceitamos ter a solução para um número discreto de pontos, esperando que, quanto maior for este número de pontos, mais próxima da solução exata será a nossa solução aproximada (ou numérica). É fácil entender então que, se decidirmos calcular 100 valores da variável no domínio, teremos 100 incógnitas, sendo necessária 100 equações algébricas para o fechamento, formando um sistema de 100 equações a 100 incógnitas. Se quisermos tornar mais precisos nossos cálculos, aumentando o número de incógnitas, o sistema linear a ser resolvido, logicamente, também vai aumentando, proporcionalmente, em número de equações. O esforço computacional também cresce e de forma não-linear.

A figura abaixo exemplifica a tarefa do método numérico, na qual uma equação diferencial escrita em nível infinitesimal e definida para o domínio D é transformada em um sistema de equações algébricas. Para isto, as derivadas da função existente na equação diferencial devem ser substituídas pelos valores discretos da função. A maneira de se obter essas equações algébricas é que caracteriza o método numérico.

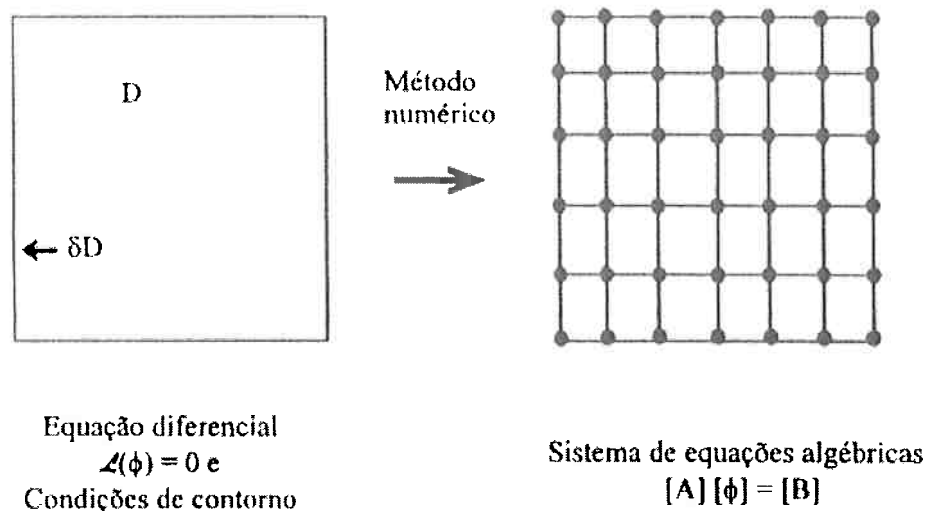


Fig 5.1 – A Tarefa do Método Numérico {14}

6- Aproximação por Diferenças Finitas

O modelo matemático proposto neste trabalho baseia-se no método de Diferenças Finitas. Assim, será explorada neste capítulo a aproximação por Diferenças Finitas.

A solução de uma EDP (Equação Diferencial Parcial) em uma região R implica a obtenção dos valores para a variável dependente em cada ponto de R . Computacionalmente, somente podemos lidar com uma região contínua se determinarmos uma fórmula analítica para a solução do problema. O computador pode então, ser utilizado para calcular a solução em qualquer ponto desejado da região, com o uso dessa fórmula. No caso de técnicas numéricas de solução, porém, não é possível tratar a região R como contínua, já que o método numérico obtém a solução em pontos (x, t) , por exemplo, por cálculos como adição e multiplicação. Nada nos impede, no entanto, de escolher alguns pontos dentro de R e somente neles calcular a solução do problema, sendo chamado este procedimento de discretização e os pontos discretos recebem o nome de malha. Um exemplo deste procedimento pode ser obtido como:

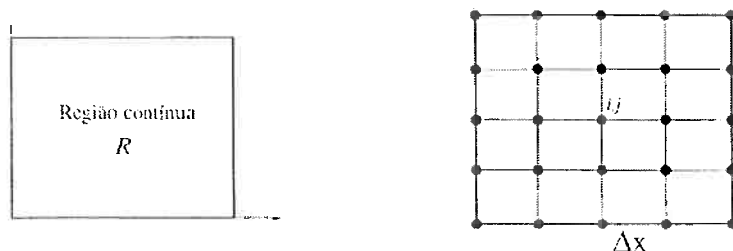


Fig 6.1 – Região Contínua e Discretizada {06}

Inicialmente, observa-se que os pontos da malha localizam-se na intersecção das linhas horizontais com as verticais, estando separados entre si por uma distância Δx e Δy , respectivamente, não necessariamente iguais. Os índices i e j identificam um ponto na i -ésima coluna e na j -ésima linha, respectivamente. Assim, um dado ponto (i,j) possui coordenadas $(x_0 + i \Delta x, y_0 + j \Delta y)$, em que o ponto (x_0, y_0) representa a origem do sistema de coordenadas, tomando aqui como igual a $(0,0)$. O número de pontos nas dimensões x e y são dados por $IM + 1$ e $JM + 1$, respectivamente.

Para que seja possível tratar numericamente as equações diferenciais parciais, elas devem ser expressas na forma de operações aritméticas que o computador possa executar. Essencialmente, devemos representar os diferenciais da EDP (Equação Diferencial Parcial) por expressões algébricas, ou seja, discretizar a EDP. Essas expressões podem ser manipuladas pelo computador, relacionando entre si os valores das grandezas nos pontos discretos $(i\Delta x, j\Delta y)$ de R . Portanto, antes de resolvermos a equação diferencial parcial de forma numérica, precisamos encontrar, para os termos que nela aparecem, as respectivas expressões escritas em função dos pontos da malha. Essas expressões são denominadas de aproximações por diferenças finitas. O resultado final desse processo é uma equação algébrica, denominada equação de diferenças finitas (EDF). A EDF é escrita para cada ponto da região da região discretizada em que se deseja calcular a solução do problema. Resolvendo-se as EDF's, encontra-se a solução aproximada do problema, não sendo exata devido:

- inerentes ao processo de discretização das equações (ver a seguir).
- de arredondamento nos cálculos feitos no computador
- na aproximação numérica das condições auxiliares.

Pode-se pensar nas aproximações de diferenças finitas com o inverso do processo de determinação do limite, utilizado para obter a derivada de uma função f . Considere-se a definição da derivada de uma função f contínua:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (\text{Eq. 6.1})$$

Uma aproximação de diferenças finitas para df/dx é dada pelo lado direito da equação acima, sem tomarmos o limite da expressão. Utilizando-se dois valores de f separados por uma distância (finita) h , a expressão acima representa uma aproximação algébrica para a primeira derivada de f .

Os pontos mostrados na figura 6.1 representam coordenadas x e y nas quais serão calculados os valores de uma função f . Esses valores serão utilizados na aproximação das derivadas presentes na equação diferencial. Portanto, aproximações de diferenças finitas efetivamente substituem o operador diferencial contínuo (por exemplo, d/dx) por uma aproximação discreta, calculada a partir dos valores de f um número finito de pontos.

As aproximações de diferenças finitas podem ser obtidas de várias formas. As mais comuns são: expansão em Série de Taylor e interpolação polinomial. A seguir será abordado de maneira mais detalhada a discretização em métodos de diferenças finitas.

7- Discretização em Métodos de Diferenças Finitas

O primeiro passo para a obtenção das equações aproximadas é promover a discretização do domínio de interesse, isto é, dividi-lo em células elementares. Apesar de não ser necessário, é comum no MDF usar discretização estruturada (construída usando um sistema coordenado) através de coordenadas ortogonais, como cartesianas, cilíndricas, esféricas, conforme a mostrado na fig 3.1 para o caso bidimensional. A fig 7.1 mostra uma discretização unidimensional que será discutida a frente.

Considere a seguinte equação diferencial do problema de condução transiente unidimensional:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (\text{Eq. 7.1})$$

onde T é a temperatura, t o tempo e α a difusividade térmica. A tarefa é representar as derivadas espacial e temporal por expressões algébricas. Usando séries de Taylor em torno de P , os valores da temperatura em E e W podem ser calculados por:

$$T_E = T_P + \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_P \Delta x + \left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_P \frac{\Delta x^2}{2} + \left. \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} \right|_P \frac{\Delta x^3}{6} + \dots + \dots \quad (\text{Eq. 7.2})$$

$$T_W = T_P - \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_P \Delta x + \left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_P \frac{\Delta x^2}{2} - \left. \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} \right|_P \frac{\Delta x^3}{6} + \dots - \dots \quad (\text{Eq. 7.3})$$

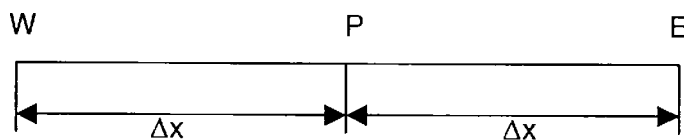


Fig 7.1- Discretização Unidimensional

Dessas equações podemos encontrar as aproximações numéricas das derivadas parciais. Usando as equações 7.2 e 7.3, encontramos, respectivamente,

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_P = \frac{T_E - T_P}{\Delta x} + \varphi(\Delta x) \quad (\text{Eq. 7.4})$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_P = \frac{T_P - T_W}{\Delta x} + \varphi(\Delta x) \quad (\text{Eq. 7.5})$$

que são as aproximações numéricas, para a frente e para trás, da derivada de primeira ordem. Observe que os erros de truncamento são da ordem de Δx . Somando as equações 7.3 e 7.2, obtém-se:

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_P = \frac{T_E + T_W - 2T_P}{\Delta x^2} + \varphi(\Delta x)^2 \quad (\text{Eq. 7.6})$$

que é a aproximação numérica para a derivada de segunda ordem em diferenças centrais. Neste caso, o erro de truncamento é da ordem de $(\Delta x)^2$. Trabalhando com as expansões da função em série de Taylor, é possível, usando mais termos da série, representar derivadas de qualquer ordem. Logicamente, quanto maior for a ordem da derivada, e de acordo com a ordem desejada para o erro de truncamento, mais pontos serão necessários em torno de P. As aproximações dadas pelas equações 7.4 a 7.6 são suficientes para o nosso exemplo.

Formulação Explícita, Totalmente Implícita e Implícita.

Considere-se a equação 7.1 do problema de difusão de calor transiente que deverá ser aproximada numericamente usando as equações 7.4 a 7.6. A aproximação do

termo transiente, de acordo com a Eq. 7.4, onde a variável independente agora é o tempo, é dada por

$$\left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_P = \frac{T_P - T_P^o}{\Delta t} + \varphi(\Delta t) \quad (\text{Eq. 7.7})$$

onde T_P e T_P^o são os valores da temperatura do ponto P no nível de tempo no qual se busca a solução e no anterior, respectivamente. Lembre que as temperaturas no nível de tempo anterior são conhecidas em todos os pontos do domínio.

Uma questão importante surge agora com relação ao nível de tempo no qual será avaliado o lado direito da equação 7.1. Lembrando que este termo representa os fluxos difusivos de calor, e que estamos avançando a solução de um nível de tempo para outro, devemos decidir se vamos avaliar esses fluxos no início, no fim ou em uma posição intermediária do intervalo de tempo. Denotando por θ a posição, no intervalo de tempo, de avaliação do termo difusivo, temos a seguinte aproximação numérica para a equação 7.1:

$$\frac{T_P - T_P^o}{\Delta t} = \alpha \frac{T_E^\theta - T_W^\theta - 2T_P^\theta}{\Delta x^2} \quad (\text{Eq. 7.8})$$

7.1- FORMULAÇÃO EXPLÍCITA

Escolhendo $\theta = 0$, teremos a formulação explícita, onde todas as temperaturas vizinhas de P são avaliadas no instante anterior e, portanto, já são conhecidas. É possível explicar a incógnita da equação (T_P) em função de temperaturas vizinhas, todas conhecidas. Como temos uma equação para cada ponto discreto e, em cada uma destas equações, as temperaturas vizinhas são sempre do instante anterior, a formulação explícita dá origem a um conjunto de equações algébricas que podem ser resolvidas uma a uma, obtendo-se a temperatura em cada ponto do espaço para o novo nível de

tempo. Devemos enfatizar que, pelo fato de as equações não serem acopladas entre si, não existe a necessidade de resolver uma matriz. Por isso a denominação conjunto e não sistemas de equações. Neste ponto, é conveniente apresentarmos um exemplo, empregando a formulação descrita.

Imagine o problema da condução unidimensional transiente sendo resolvido na malha mostrada na figura 7.2. No instante de tempo inicial, a distribuição da temperatura é dada por $T_1 = 0$, $T_2 = 0$, $T_3 = 0$, $T_4 = 0$, $T_5 = 0$, quando, repentinamente, a temperatura T_1 passa para 100 e T_5 mantida em zero. A física deste problema nos ensina que o calor começa a penetrar o domínio aumentando a sua temperatura, até que o regime permanente seja atingido. Os diversos perfis de temperatura como tempo são exponenciais, saindo de 100 (temperatura da face esquerda) e chegando a 0 (temperatura da face direita), conforme mostra esquematicamente a Fig 7.3.

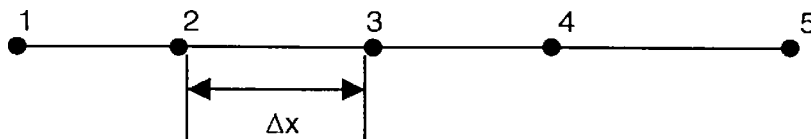


Fig 7.2 - Malha para o problema unidimensional transiente. {06}

A Equação 7.8 considerando a formulação explícita, tem a forma:

$$T_p = (1-2r) T_p^o + rT_E^o + rT_W^o \quad (\text{Eq. 7.9})$$

Considerando $r = \alpha \Delta t / (\Delta x^2) = 0.5$, por simplicidade, temos:

$$T_p = 0.5 (T_E^o + T_W^o) \quad (\text{Eq. 7.10})$$

de onde podemos obter o conjunto de três equações para avançar as temperaturas dos pontos 2, 3 e 4 no tempo. As equações ficam:

$$\begin{aligned}
T_2 &= 0.5 (T_3^o + T_4^o) \\
T_3 &= 0.5 (T_4^o + T_2^o) \\
T_4 &= 0.5 (T_2^o + T_3^o)
\end{aligned}
\quad (\text{Eq. 7.11})$$

Observe-se que essas equações não são acopladas entre si e podem ser resolvidas uma a uma, tantas vezes quantos forem os níveis de tempo desejados. Se for de interesse mudar o Δt ao longo do tempo, basta mudar o valor de r e obter novas equações. A tabela 7.1 mostra os valores da temperatura para alguns intervalos de tempo. Continuando-se a evolução ao longo do tempo, pode-se determinar a solução de regime permanente, dada por 100, 75, 50, 25 e 0. Neste caso, quando o regime é permanente, a equação 7.1 fica reduzida à derivada segunda igual a zero. Como a aproximação numérica dessa derivada reproduz o perfil linear, a solução numérica de regime permanente é a própria solução exata, uma vez que a solução exata é uma reta e, portanto, o número de pontos espaciais não influencia a solução. Ou seja, a solução é independente do tamanho da malha.

A distribuição espacial de temperatura ao longo do tempo, entretanto, não está correta, visto que seu comportamento é exponencial no espaço e no tempo. Para captar adequadamente o transiente, malhas refinadas no espaço e no tempo são necessárias.

A formulação explícita possui uma limitação importante com relação ao tamanho do intervalo de tempo que pode ser adotado para avançar a solução. Para este problema simples que estamos analisando, onde as aproximações numéricas foram de derivadas para a frente no tempo e diferenças centrais no espaço, é possível mostrar, utilizando a análise de von Neumann, que $r \leq 0.5$. Observando a equação 7.9, vemos que isto significa manter o coeficiente de T_p^o positivo. Uma prática importante em esquemas explícitos, portanto, é manter este coeficiente sempre positivo. Conseqüentemente, podemos dizer que o intervalo de tempo em formulações explícitas é limitado pela estabilidade, uma vez que, sendo o mesmo bastante restrito pela estabilidade, a precisão, em geral, fica satisfeita.

Tab 7.1- Solução Numérica da Eq. 3.1 {14}

Tempo	0	1	2	3	4	Regime permanente
Ponto 1	100	100	100	100	100	100
Ponto 2	0	50	50	62,5	62,5	75
Ponto 3	0	0	25	25	37,5	50
Ponto 4	0	0	0	12,5	12,5	25
Ponto 5	0	0	0	0	0	0

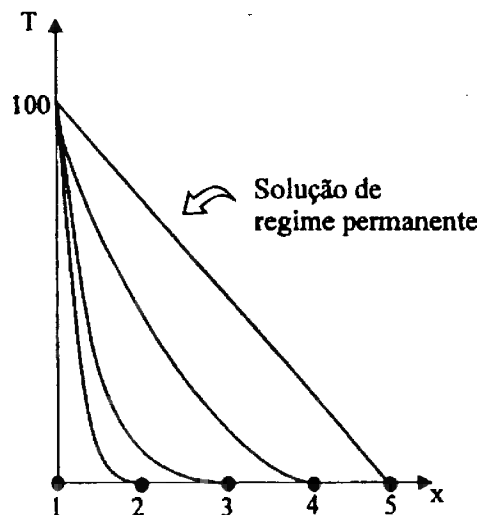


Fig 7.3- Comportamento da Solução Transiente. {14}

7.2- FORMULAÇÃO TOTALMENTE IMPLÍCITA

Se na Eq. 7.8 o valor de θ for feito igual a 1, teremos a formulação totalmente implícita, com a seguinte equação discretizada

$$T_p (1/r + 2) = T_E + T_w + T_p^0 / r \quad (\text{Eq. 7.12})$$

Onde podemos constatar que não existe mais a possibilidade do coeficiente negativo para T_p^0 . Essa formulação dá origem a um sistema de equações, uma vez que as equações estão agora acopladas entre si. Na eq. 7.12, as temperaturas T_E e T_w estão sendo calculadas no mesmo nível de tempo de T_p , o que caracteriza o acoplamento. Para essa equação simples em consideração, tal formulação é incondicionalmente

estável e o intervalo de tempo é limitado por precisão. Observe-se que esta formulação é chamada totalmente implícita, porque os valores das temperaturas que entram no cálculo do fluxo difusivos são feitos iguais aos valores no fim do intervalo de tempo.

Considerando novamente $r = 0.5$, o sistema de equações resultante para esta formulação é dada por:

$$\begin{aligned} T_2 &= 0.25 ((T_3 + T_1) + 2T_2^0) \\ T_3 &= 0.25 ((T_4 + T_2) + 2T_3^0) \\ T_4 &= 0.25 ((T_5 + T_3) + 2T_4^0) \end{aligned} \quad (\text{Eq. 7.13})$$

Observe-se que a eq. 7.12 pode ser escrita na forma:

$$A_p T_P = A_e T_E + A_w T_W + B \quad (\text{Eq. 7.14})$$

Que fazendo $P = 2, 3$ e 4 , origina o sistema de equações dado pelas Eqs. 7.13, reproduzido a seguir como:

$$\begin{aligned} A_p^2 T_2 &= A_e^2 T_3 + B_2 \\ A_p^3 T_3 &= A_e^3 T_4 + A_w^3 T_2 + B_3 \\ A_p^4 T_4 &= A_w^4 T_3 + B_4 \end{aligned} \quad (\text{Eq. 7.15})$$

onde as temperaturas T_1 e T_5 foram incluídas nos termos independentes B_2 e B_4 , respectivamente, pois as mesmas são conhecidas das condições de contorno.

Nessas equações foi adotada uma notação mais rigorosa para os coeficientes, que não será seguida mais adiante, mas merece especial atenção neste momento. Primeiramente, cada uma das equações que formam o sistema 7.15 foi obtida da aplicação do método numérico para um ponto (ou célula) da malha. Portanto, todos os coeficientes que aparecem em uma equação são coeficientes pertencentes àquele ponto para o qual a equação foi escrita. Por exemplo, o coeficiente A_p^3 é o coeficiente central da célula 3, enquanto A_e^3 e A_w^3 são os coeficientes leste e oeste da célula 3, respectivamente. O coeficiente A_e^3 , por exemplo, que é um coeficiente da célula 3, tem a tarefa de conectar a célula 3 com a célula vizinha a leste, que, na numeração que

adotamos, é a célula 4. O sobrescrito indicando a que célula pertence o coeficiente, conforme mencionado, será, doravante, omitido.

A solução do sistema de equações lineares 7.15 fornece-nos as temperaturas T_2 , T_3 e T_4 .

Deve ser também reconhecido que o sistema 7.13 pode ser descrito na forma matricial como:

$$[A] [T] = [B] \quad (\text{Eq. 7.16})$$

ou

$$\begin{vmatrix} 1.00 & -0.25 & 0.00 \\ -0.25 & 1.00 & -0.25 \\ 0.00 & -0.25 & 1.00 \end{vmatrix} * \begin{vmatrix} T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} B_2 \\ B_3 \\ B_4 \end{vmatrix}$$

Note-se que os zeros que aparecem na matriz de coeficientes não existem explicitamente nas Eqs. 7.13, pois a forma de escrever estas equações envolve apenas as temperaturas que estão ligadas à célula em questão. Como T_4 não tem ligação com T_2 , o coeficiente, é, logicamente, zero. O mesmo acontece com T_2 em relação a T_4 . Agora, imagine que nossa malha não tivesse apenas três incógnitas, mas, por exemplo, uma centena. É fácil ver que nossa matriz de coeficientes teria 100 linhas por 100 colunas. Em cada linha, teríamos apenas 3 coeficientes não nulos com os 97 restantes nulos.

Sabe-se que quando usamos métodos iterativos para resolver o sistema linear, trabalha-se apenas com os não-zeros da matriz, ao passo que em soluções diretas, como eliminação de Gauss, por exemplo, todos os elementos da matriz tomam parte nas operações. Como em geral, as matrizes obtidas na aplicação de métodos iterativos para evitar operações com zeros.

Para o caso com três equações e três incógnitas, é fácil resolver o sistema linear por substituição. Quando o número de pontos aumenta consideravelmente, métodos

eficientes de solução de sistemas lineares devem ser empregados. Note que o sistema 7.13 deve ser resolvido para cada intervalo de tempo, pois o problema em consideração é transiente. Se o interesse for a solução de regime permanente, bastará fazer $r \rightarrow \infty$ (infinito avanço no tempo) e resolver o sistema linear resultante. Novamente, a solução de regime permanente é igual à exata, pelas razões já expostas.

7.3 FORMULAÇÃO IMPLÍCITA

Na formulação implícita, os valores das temperaturas que entram no cálculo do fluxo difusivo são tomados como uma média dos valores dessas temperaturas no começo e no fim do intervalo de tempo. O mais conhecido método nesta classe é o Crank-Nicolson, onde a temperatura é tomada como uma média aritmética entre as temperaturas T_p^o e T_p , como:

$$T_p^\theta = \theta T_p + (1 - \theta) T_p^o \quad (\text{Eq. 7.17})$$

É importante observar que basta ser θ diferente de zero para que as equações fiquem acopladas, caracterizando a implicitude entre as mesmas. É comum, na literatura, denominar-se a formulação com $\theta = 1$ de formulação implícita e não totalmente implícita, como aqui denominada. A razão para isto é que a grande maioria dos métodos usa $\theta = 1$, por razões de estabilidade. A figura 7.4 ilustra, para os três tipos de formulações, as conexões existentes entre o ponto P e seus vizinhos, no instante de tempo de cálculo e no instante de tempo anterior. A figura mostra que, quando existem conexões no mesmo nível de tempo de cálculo da solução, as equações são acopladas entre si e é necessária a solução de um sistema linear para obter-se os resultados.

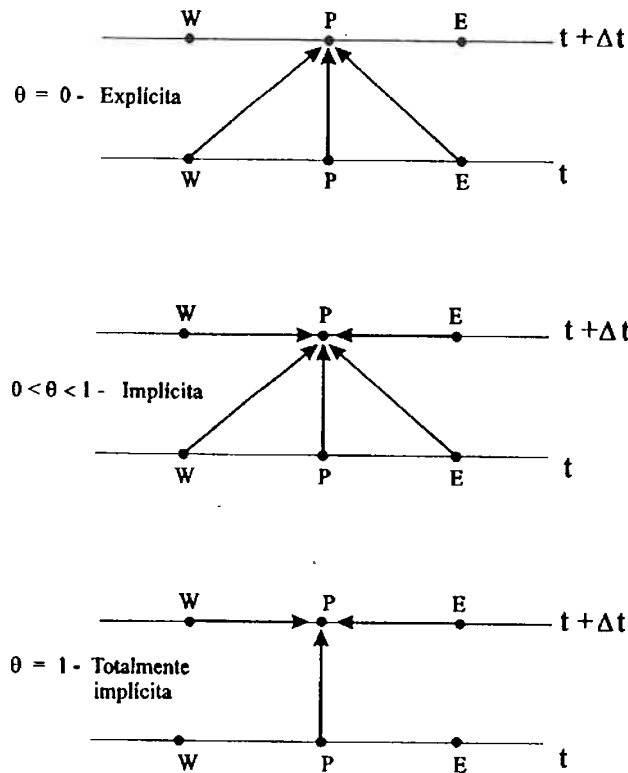


Fig 7.4- Tipo de Conexões nas formulações estudadas {14}

8- Simulação Matemática

A simulação matemática apresentada neste trabalho foi desenvolvida no software Scilab 2.5 (ver anexo), onde foi possível suprir as exigências técnicas requeridas para execução do modelo matemático envolvendo a transferência de calor na redução das pelotas auto-redutoras.

Este modelo baseia-se no método de diferenças finitas, semi-implícita, obtendo uma discretização no espaço, onde o sistema de equações parciais é transformado em problema de valor inicial.

O resultado do modelo irá gerar um gráfico contendo informações referentes à temperatura do centro e da superfície da pelota em função do tempo, sendo comparado

posteriormente com dados experimentais. A análise comparativa dos dados será feita na seção 9. Resultados e Discussão.

8.1- Parâmetros e Fórmulas Aplicadas ao Programa:

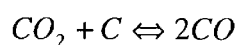
Neste capítulo serão apresentados as fórmulas e parâmetros que estarão presentes no programa apresentado neste trabalho. Assim, serão descritos todos os cálculos detalhadamente e apresentados os valores que servirão de input para o funcionamento do programa. Todos os cálculos que serão apresentados nesta seção referem-se à pelota de raio igual a 8mm. Na seção 9-Resultados e Discussão faremos uma análise do tamanho da pelota, onde o valor do raio será alterado e o resultado obtido será discutido, para isto, o programa tem a função de ajustar todos os cálculos automaticamente quando há alteração do valor do raio da pelota.

Vale ressaltar que o índice I está relacionado com a equação de Bourdoudard e II com a reação de redução do minério.

8.1.1- Cálculo da Velocidade específica:

O cálculo da velocidade específica foi necessário para a reação de Boudouard (8.1.1.1) e para a reação de redução do óxido de ferro (8.1.1.2). Posteriormente esta velocidade será utilizada para o cálculo do Módulo de Thiele e Número de Prater, que são adimensionais calculados para o nosso programa. Os cálculos das velocidades específicas serão apresentados abaixo:

8.1.1.1- Reação de Boudouard:



$$\Delta G^\circ = 40800 - 41,7T = 170544 - 174,3T = -RT \ln K \quad \{12\}$$

$$K = e^{\frac{170544 - 174,3T}{RT}}$$

$$V_I = 1.87 \cdot 10^8 \exp\left(\frac{-221752}{RT}\right) \left(C_{CO_2} - \frac{C_{CO}}{e^{\left(\frac{170544 - 174,3T}{-RT}\right)}} \right)$$

onde:

$P_{CO_2} = 0,3 \text{ atm} - C_{CO_2} = 3 \text{ mol/m}^3$ (concentração)

$P_{CO} = 0,7 \text{ atm} - C_{CO} = 7 \text{ mol/m}^3$ (concentração)

$T = 1223 \text{ K}$ (temperatura do forno)

$R = 8,31 \text{ J/mol.K}$ (constante ideal dos gases)

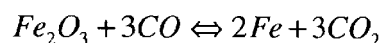
$K_0 = 1,87 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ (constante pré-exponencial) {04}

$\Delta E = 221752 \text{ J/mol}$ (energia de ativação) {04}

Assim,

$$V_I = 0,13 \text{ mol / s.m}$$

8.1.1.2- Redução do Óxido de Ferro



$$\Delta G^\circ = 29761,6 - 38,2T = -RT \ln K$$

$$V_{II} = 16 \exp\left(\frac{-73638}{RT}\right) \left(C_{CO} - \frac{C_{CO_2}}{e^{\left(\frac{29761,6 - 38,2T}{-RT}\right)}} \right)$$

onde:

$P_{CO_2} = 0,3 \text{ atm} - C_{CO_2} = 3 \text{ mol/m}^3$ (concentração)

$P_{CO} = 0,7 \text{ atm} - C_{CO} = 7 \text{ mol/m}^3$ (concentração)

$T = 1223 \text{ K}$ (temperatura do forno)

$R = 8,31 \text{ J/mol.K}$ (constante ideal dos gases)

$K_0 = 16 \text{ m/s}$ (constante pré-exponencial) {04}

$\Delta E = 73638 \text{ J/mol}$ (energia de ativação) {04}

Assim,

$$V_{II} = 0,07 \text{ mol / s.m}$$

8.1.2- Cálculo da Entalpia de Reação:

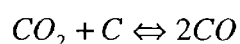
O cálculo da entalpia de reação tem a origem nos valores das entalpias de formação na temperatura ambiente. Sendo assim, o cálculo da entalpia de reação é o

resultado da somatória das reações de formação de cada substância envolvida na reação. O valor de ΔH_I refere-se à reação de Boudouard e ΔH_{II} refere-se à equação de redução do minério.

	$\Delta H^\circ_{298} \text{ (Kcal/mol)}$
FeO	63.2
Fe ₃ O ₄	266.9
Fe ₂ O ₃	196.3
CO	26.4
CO ₂	94.05

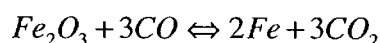
Tab 8.1- Entalpia de Formação na temperatura 25°C {09}

8.1.2.1 Reação de Boudouard:



$$\Delta H_I = -94.05 + 2 (26.04) = - 41.25 \text{ Kcal/mol} = 172425 \text{ J/mol}$$

8.1.2.2 Redução do Óxido de Ferro:



$$\Delta H_{II} = -196.3 - 3 (26.4) = 6.65 \text{ Kcal/mol} = 27797 \text{ J/mol}$$

8.1.3- Relação Área/volume {07}

O modelo considera que o tamanho, forma e o número de partículas não são alterados com o decorrer da reação. É aceitável dizer que a transferência de massa através das camadas de produto não resultará em resistência para o andamento da reação, quando comparado com a reação na interface.

Conhecida a proporção molar de 1 Fe₂O₃ : 3C (balanço estequiométrico) e adotando a porosidade equivalente a $\epsilon = 0,4$, podemos obter a seguinte distribuição volumétrica:

Porosidade	0,40
Fração Volumétrica de C	0,26
Fração Volumétrica de Fe ₂ O ₃	0,34

Assim, podemos calcular o número de grãos por 1cm^3 (07):

$$N_C = \frac{0,26}{\pi/6(4,25 \cdot 10^{-4})^3} = 6,47 \cdot 10^9 \text{ grãos de C / cm}^3$$

$$N_{\text{Fe}_2\text{O}_3} = \frac{0,34}{\pi/6(5,95 \cdot 10^{-4})^3} = 3,08 \cdot 10^9 \text{ grãos de Fe}_2\text{O}_3 / \text{cm}^3$$

Área de 1 grão:

$$\text{Raio do grão de C: } R_c = 2,12 \cdot 10^{-4} \text{ cm} - A_c = 0,56 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2$$

$$\text{Raio do grão de Fe}_2\text{O}_3: R_{\text{Fe}_2\text{O}_3} = 2,97 \cdot 10^{-4} \text{ cm} - A_{\text{Fe}_2\text{O}_3} = 1,10 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2$$

Desta forma, podemos calcular a relação entre área e volume:

3

$$\left(\frac{A}{V}\right)_C = \left(\frac{6,47 \cdot 10^9 \cdot 0,56 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2}{1 \text{ cm}^3}\right) = 1,46 \cdot 10^6 \text{ m}^{-1}$$

$$\left(\frac{A}{V}\right)_{\text{Fe}_2\text{O}_3} = \left(\frac{3,08 \cdot 10^9 \cdot 1,10 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2}{1 \text{ cm}^3}\right) = 1,36 \cdot 10^6 \text{ m}^{-1}$$

8.1.4- Capacidade Térmica

Respeitando a proporção molar da pelota, onde temos aproximadamente 80% de Fe_2O_3 e 20% de C, e contando com os valores de capacidade térmica para C e Fe_2O_3 , é possível obter a capacidade térmica da mistura, ou seja, da pelota, como seguem os cálculos abaixo:

$$\text{Fe}_2\text{O}_3 \rightarrow c_p = 36,0 \text{ cal / mol.K} = 225,0 \text{ cal / Kg.K} \{09\}$$

$$\text{C} \rightarrow c_p = 5,27 \text{ cal / mol.K} = 439 \text{ cal / Kg.K} \{09\}$$

$$C_p = (0,8 \cdot 225 + 0,2 \cdot 439) \cdot 4,18 = 1119 \text{ J / Kg.K}$$

8.1.5 – Adimensionais

A seguir serão calculados os adimensionais que serão utilizados para os cálculos do nosso modelo matemático.

8.1.5.1 Lewis Number

O número de Lewis é usado quando há uma combinação de transferência de calor e de massa nos cálculos.

$$Le = \frac{D_e \rho C_p}{K_e \varepsilon} = 123,5$$

onde:

ρ - densidade do sistema sólido-fluído = 2,06 g/cm³ {01}
De – difusividade efetiva (igual para CO e CO₂) = 3.10⁻⁴ m²/s {05}
Cp- capacidade térmica do sistema = 1119 J/ mol.K
Ke – condutividade térmica efetiva = 14 W/m.K {05}
 ε - porosidade = 0,4 {01}

8.1.5.2 Mass Biot Number (Sherwood)

O número adimensional de Sherwood é proporcional a { (difusividade de massa) / (difusividade molecular) } e é utilizado nos cálculos de transferência de massa

$$B_{im} = \frac{r_p K_g}{De} = 2 + 0,6 Re^{0,5} Sc^{0,33} = 2$$

onde:

r_p – raio da pelota = 8mm
 K_g - coeficiente de transferência de massa
De – difusividade efetiva = 3.10⁻⁴ m²/s {05}

O valor do adimensional Sherwood é igual a 2, pois o número de Reynolds (Re) é próximo de zero, devido a baixa velocidade do gás inserido no sistema, conforme comprova-se nos cálculos abaixo:

$$V = \frac{Q}{S} = \frac{1,6 \cdot 10^{-5} m^3 / s}{2 \cdot 10^{-3} m^2} = 0,0083 m / s \text{ (a } 25^\circ C)$$

Onde:

Q – Vazão do gás pelo tubo = $1,6 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3 / \text{s}$ {01}

S - Área do tubo por onde o gás é expelido = $2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$ {01}

8.1.5.3 Heat Biot Number

O número de Biot é proporcional a {resistência térmica / resistência superficial} e é usado geralmente em problemas de transferência de calor e em particular para casos de cálculos fora do equilíbrio.

$$B_{ih} = \frac{r_p h g}{K_e} = 0,108$$

Onde:

r_p – raio da pelota = 8mm

hg - coeficiente de transferência de calor = $0,216 \text{ cal/ min.cm}^2.\text{K}$ (01)

K_e – condutividade térmica efetiva = 14 W/m.K

8.1.5.4 Módulos de Thiele

$$\phi^2 = \frac{r_p^2 R_i (C_{CO}^o(0), C_{CO_2}^o, T^o(0))}{C_B^o(0) D_e} \left(\frac{A}{V} \right)_i = 5973,3$$

Onde:

R_B – velocidade da reação química i = $0,13 \text{ mol/s.m}^2$;

r_p – raio da pelota = 8mm

D_e – difusividade efetiva = $3 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$

C^o - Concentração de CO = 7 mol/m^3

T^o - Temperatura do forno = 1223K

(A/V)- Relação Área/volume da reação de Bourdoudard = $1,4 \cdot 10^6 \text{ m}^{-1}$;

8.1.4.5 Número de Prater

$$\beta = \frac{D_e (-\Delta H_i) C_i^o(0)}{K_e T^o(0)} = 0,0211$$

onde:

De – difusividade efetiva = $3.10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$ {05}

ΔH_i – entalpia da reação de Boudouard – 172425 J/mol

Ke – condutividade térmica efetiva = 14 W/m.K

C^o - Concentração de CO = 7 mol/m³

T^o- Temperatura do forno = 1223K

8.1.4.6 Tempo Adimensional

O tempo adimensional pode ser tratado como um grupo adimensional, onde a variação se dá apenas com a variável tempo.

$$\tau = \frac{t.r_p^2 \varepsilon}{D_e}$$

onde:

t- duração do processo de redução (em s)

De – difusividade efetiva = $3.10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$ {05}

r_p – raio da pelota = 8mm

ε - porosidade = 0,4 {01}

8.2 SCILAB (Software)

O Scilab é uma linguagem de alto nível para computação numérica em um ambiente de desenvolvimento amigável.

Scilab é um programa de manipulação de matrizes, funções matemáticas e programação semelhante ao Matlab que foi desenvolvido pela INRIA (Institut National de Recherche de Informatique et en Automatique - França) e é distribuído gratuitamente no endereço de downloads da INRIA.

O Scilab foi desenvolvido para várias plataformas como o Linux, Solaris, AIX, Macintosh e Windows 95/NT. A versão para Linux foi desenvolvida antes tornando-se a mais estável delas. As demais estão ainda em fase de desenvolvimento e apresentam alguns problemas.

O Scilab permite que se faça manipulação de matrizes, gráficos, desenhos, animações, programas com as funções embutidas e toolboxes e interfaces gráficas com TK/TCL. Trabalha ainda com linguagens como C, fortran e arquivos .m do matlab.

Atualmente o SCILAB encontra-se na versão 2.5. Essa versão inclui a possibilidade de abrir interfaces gráficas com o TK/TCL (versão 8.0), incluir diretivos do C no meio de um programa em Scilab, conversão de Matlab para Scilab e vice-versa, Processamento paralelo com o PVM e uma gama de novos toolboxes e comandos.

Maiores informações sobre o Scilab podem ser encontradas na seção Anexos.

8. 3 Programação

Nesta seção apresentaremos o programa desenvolvido para o tratamento da redução da pelota auto-redutora. Esta listagem pode ser descrita em arquivo do tipo .txt (bloco de notas) e ser executado a partir da Janela do Scilab. Para melhor entendimento do programa e sua estrutura é aconselhável a leitura de todos os comentários inseridos no programa após o uso de duas barras repetidamente (//.).

O programa descrito abaixo se refere a uma pelota com 8 mm de raio e temperatura do forno igual a 1223K. Estes valores de raio e temperatura serão alterados no capítulo 9-Resultados e Discussão para serem feitas as análises do modelo. Sendo assim, segue abaixo a listagem do programa:

PROGRAMA EM SCILAB 2.5

//Exemplo p.147-154

//Numerical Methods and Modelling for Chemical Engineers

//Mark E.Davis - John Wiley & Sons - New York - 1984

//Implementação em Scilab

//

//Seção 1

//parâmetros e condições iniciais

//entalpias de reação J/mol

//para Bouduard

```

dH1=+172425 ;
//para redução de óxidos J/mol
dH2=-27797 ;
//constante dos gases perfeitos
//em J/mol*K
R=8.31;
//***referencias
//temperatura do forno
T0=1223;
//concentração de CO em mol/m^3
cm0=7;
//concentração de CO2 em mol/m^3
cd0=3;
//raio da pelota em m
rp=0.008;
//difusividade efetiva em m^2/s
De= 3d-4;
//densidade medida da pelota em Kg/m^3
d=2060;
//capacidade térmica em J/mol.K
cp=1119;
//porosidade
e=0.4;
//condutividade térmica específica em W/m.K
ke=14;
//coeficiente de transferência de calor em J/s.m^2.K
hg=150;

//Seção 2
//equações constitutivas:funções para calcular
//relação área/volume
//para o carbono em m^{-1}
AV1=1.4d6 ;
//para o minério

```

```

AV2=1.3695d6 ;
//reação de Boudouard específica: mol/s*m^2
deff('[v]=vbo(x,y,z)',[
'if z*T0<1173 then';
'v=0';
'else';
'v=1.87d8*exp(-221752/(R*T0*z))*(cd0*y-cm0*cm0*x*x/exp((170544-173.4*T0*z)/(-
R*T0*z))))';
'end';
]);
//reação de redução dos óxidos específica: mol/s*m^2
deff('[v]=vox(x,y,z)',[
'if z*T0<1173 then';
'v=0';
'else';
'v=16*exp(-73638/(R*T0*z))*(cm0*x-cd0*y/exp((29761.6-38.2*T0*z)/(-R*T0*z))))';
'end';
]);

***adimensionais
//1=CO e 2=CO2;
deff('[f]=fphi(rp,vbo,AV1,De,cm0)',[
'f=rp*rp*vbo*AV1/(De*cm0)';
]);
deff('[f]=fbeta(dH1,ke,T0,De,cm0)',[
'f=De*(-dH1)*cm0/(ke*T0)';
]);
deff('[f]=fLe(e,ke,cp,De,d)',[
'f=De*d*cp/(ke*e)';
]);
Bim=2;
deff('[f]=fBih(rp,ke,hg)',[
'f=rp*hg/ke';
]);

```

```

//
//***cálculo dos adimensionais
phi=fphi(rp,vbo(1,1,1),AV1,De,cm0);
beta=fbeta(dH1,ke,T0,De,cm0);
Le=fLe(e,ke,cp,De,d);
Bih=fBih(rp,ke,hg);

//passo e coeficientes
N=8;
h=1/N;
h2=1/(h*h);
//
deff('[pi]=p(i)',[
'pi=1+1/(i-1)';
]);
//
deff('[qi]=q(i)',[
'qi=1-1/(i-1)';
]);
//
//Seção 3
//construção do termo de fonte F(t,v)
//equação do problema: dv/dt=F(v)
//para definição da fonte vetor F(v) com componentes
//yco:1,4,7,...3N+1 ;yco2 =2,5,8,...3N+2; T=3,6,...3N+3
//
deff('[F]=F(t,v)',[
'reaction1=vbo(v(1),v(2),v(3))/vbo(1,1,1)';
'reaction2=AV2/AV1*vox(v(1),v(2),v(3))/vbo(1,1,1)';
'F(1)=6*h2*(v(4)-v(1))+ phi*(2*reaction1-3*reaction2)';
'F(2)=6*h2*(v(5)-v(2))+phi*cm0/cd0*(3*reaction2-reaction1)';
'F(3)=1/Le*(6*h2*(v(6)-v(3))+beta*phi*(reaction1+(-dH2)/(-dH1)*reaction2))';
//
'for i=2:N,';

```

```

'reaction1=vbo(v(3*i-2),v(3*i-1),v(3*i))/vbo(1,1,1)';
'reaction2=AV2/AV1*vox(v(3*i-2),v(3*i-1),v(3*i))/vbo(1,1,1)';
'pi=p(i)';
'qi=q(i)';
'F(3*i-2)=h2*(pi*v(3*i+1)-2*v(3*i-2)+qi*v(3*i-5))+phi*(2*reaction1-3*reaction2)';
'F(3*i-1)=h2*(pi*v(3*i+2)-2*v(3*i-1)+qi*v(3*i-4))+phi*cm0/cd0*(3*reaction2-reaction1)';
'F(3*i)=1/Le*(h2*(pi*v(3*i+3)-2*v(3*i)+qi*v(3*i-3))+beta*phi*(reaction1+(-dH2)/(-
dH1)*reaction2))';
'end';
//
'reaction1=vbo(v(3*N+1),v(3*N-1),v(3*N))/vbo(1,1,1)';
'reaction2=AV2/AV1*vox(v(3*N+1),v(3*N-1),v(3*N))/vbo(1,1,1)';
'F(3*N+1)=h2*(2*v(3*N-2)-
2*(1+(1+1/N)*Bim*h)*v(3*N+1)+2*0*Bim*h*(1+1/N))+phi*(2*reaction1-3*reaction2)';
'F(3*N+2)=h2*(2*v(3*N-1)-
2*(1+(1+1/N)*Bim*h)*v(3*N+2)+2*Bim*0*h*(1+1/N))+phi*cm0/cd0*(3*reaction2-
reaction1)';
'F(3*N+3)=1/Le*(h2*(2*v(3*N)-
2*(1+(1+1/N)*Bih*h)*v(3*N+3)+2*Bih*1*h*(1+1/N))+beta*phi*(reaction1+(-dH2)/(-
dH1)*reaction2))';
])
//
//seção 4
//solução da equação dv/dt=F(t,v)
//condições iniciais
deff('ini]=inicial(a)',[
'for i=1:N+1,';
'ini(3*i-2)=1';
'ini(3*i-1)=1';
'ini(3*i)=(25+273)/T0';
'end';
])
y0=inicial(1);
t=0:10:21000;

```

```

y=ode(y0,0,t,F);
//
//Seção 5
//retomada de dados e plotagem
//retomando concentração do CO
deff('[yco]=vetorb(y)',[
'for i=1:N+1,';
'yco(i)=y(3*i-2)';
'end';
])
//
//plotando para t=1, 10 e 100
x=0:0.125:1;
y2=vetorb(y(:,1));
y3=vetorb(y(:,10));
y4=vetorb(y(:,50));
y5=vetorb(y(:,100));
plot2d([x'x'x'x'], [y2 y3 y4 y5],1:4,"121","t=10@t=100@t=500@t=1000");

xbasc();
//retomando a temperatura
deff('[T]=vetorT(y)',[
'for i=1:N+1,';
'T(i)=y(3*i)';
'end';
])
//
//plotando para t=1, 10 e 1000
x=0:0.125:1;
y2=vetorT(y(:,1));
y3=vetorT(y(:,10));
y4=vetorT(y(:,50));
y5=vetorT(y(:,100));

```

```
plot2d([x'x'x'x'], [y2 y3 y4 y5], 1:4, "121", "t=10@t=100@t=500@t=1000");
```

```
//retomando a concentração de CO2
```

```
deff('yco2'=vetorco2(y)',[
```

```
'for i=1:N+1,';
```

```
'yco2(i)=y(3*i-1)';
```

```
'end';
```

```
])
```

```
//
```

```
xbasc();
```

```
//gráficos em função do tempo para temperatura do centro e da
```

```
//superfície
```

```
//retomando a temperatura do centro e da superfície
```

```
Tc=y(3,:);
```

```
Ts=y(3*N+3,:);
```

```
plot2d([t't'],[Tc' Ts'], 1:2, "121", "centro@superfície");
```

```
//gráfico da temperatura absoluta no centro e na superfície
```

```
xbasc();
```

```
TcN=T0*Tc;
```

```
TsN=T0*Ts;
```

```
plot2d([t't'],[TcN' TsN'], 1:2, "121", "centro@superfície");
```

```
xbasc();
```

```
tn=t*rp*rp*e/De;
```

```
//t é o tempo adimensional na notação do script
```

```
plot2d([tn'tn'],[TcN' TsN'], 1:2, "121", "centro@superfície");
```

```
xbasc();
```

```
//escala uniforme
```

```
//rect=[xmin,ymin,xmax,ymax];
```

```
//nax[nx,Nx,ny,Ny]
```

```
xset("font",2,3)
```

```
xset("window",0)
```



```

rect=[0,900,1800,1300];
nax=[10,18,10,4];
plot2d([tn' tn'],[TcN' TsN'],1:2,"111","centro@superfície",rect,nax);
xtitle("pelota raio 8mm e temperatura de forno 1223K");
xset("window",1);
rect=[0,900,300,1300];
nax=[10,3,10,4];
plot2d([tn' tn'],[TcN' TsN'],1:2,"111","centro@superfície",rect,nax);
xtitle("pelota de raio 8mm e temperatura de forno 1223K");

```

9- Resultados e Discussão

O resultado gerado pelo modelo no software Scilab (output) é um gráfico que apresenta valores da temperatura do centro e da superfície da pelota (em Kelvin) em função do tempo (em segundos).

Uma consideração importante a ser feita, é que o nosso modelo não contempla o consumo de Fe_2O_3 e C, portanto, o valor da relação área/volume permanece constante durante o processo de redução da pelota.

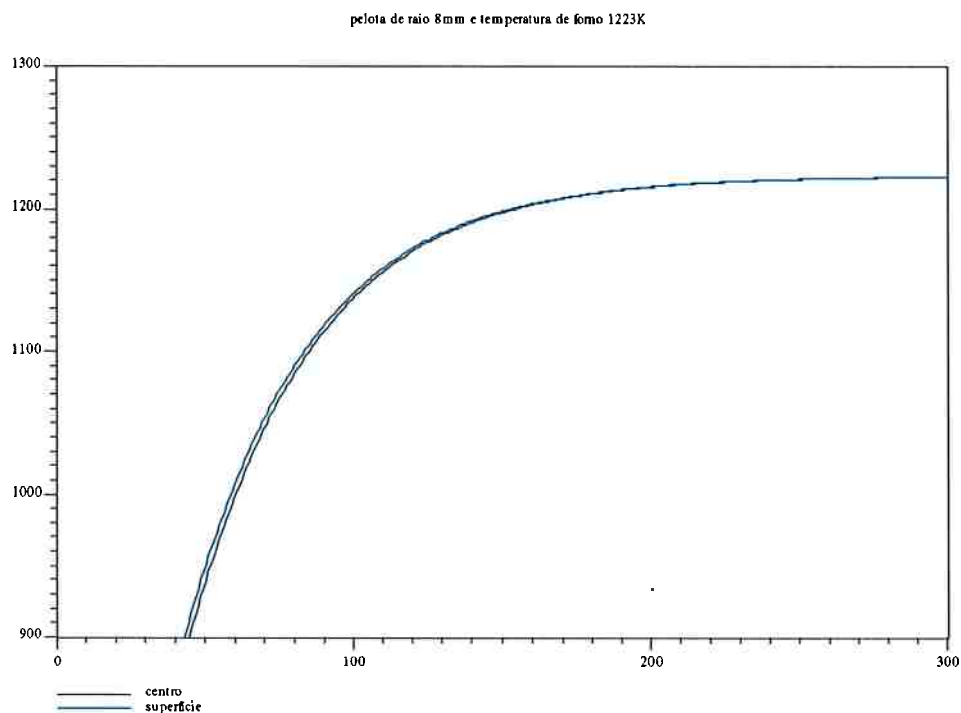
Outra importante consideração é quanto à concentração inicial dos gases, que é considerada igual a zero no meio externo à pelota.

Vale ainda ressaltar que o modelo calcula a velocidade de reação para as reações que ocorrem no processo de redução, Bourdoard e redução do Óxido de Ferro, nas temperaturas acima de 1173 K (900°C), caso contrário, a velocidade é nula (ver programa).

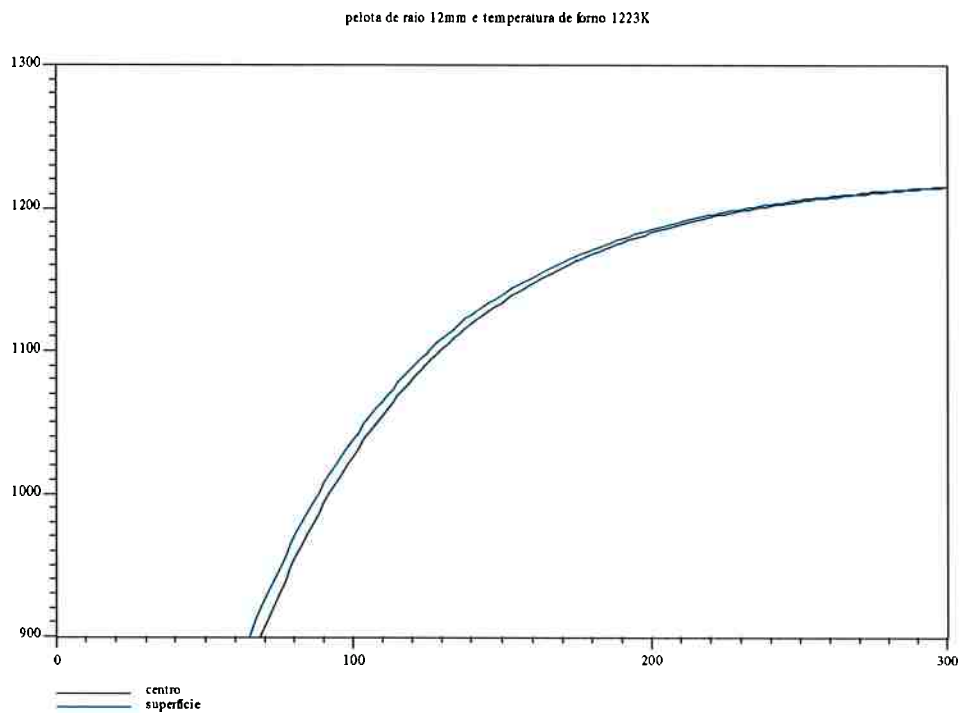
No modelo matemático proposto, a pelota é aquecida uniformemente. Os mecanismos de transferência de calor envolvidos são: condução e radiação. Ao iniciarmos o processo, a temperatura da borda será maior quando comparada à temperatura do centro da pelota, mas este efeito é minimizado com o passar do tempo onde a temperatura da pelota tende a se aproximar pontualmente. Este efeito pode ser observado ao analisarmos o Graf 9.1, onde as temperaturas do centro da pelota e da superfície da pelota tendem a se igualar com o passar do tempo, facilmente perceptível quando transcorridos 5 min (300s) após o início do processo.

9.1 Efeito do Diâmetro da pelota.

Os gráficos 9.1 e 9.2 representam o comportamento da curva de temperatura (centro e superfície) versus tempo para os raios de 8 e 12 mm respectivamente.



Graf. 9.1 Resultado gráfico do modelo (temperatura da superfície e centro vs. tempo) para pelota de raio 8 mm e temperatura do forno 1223 K

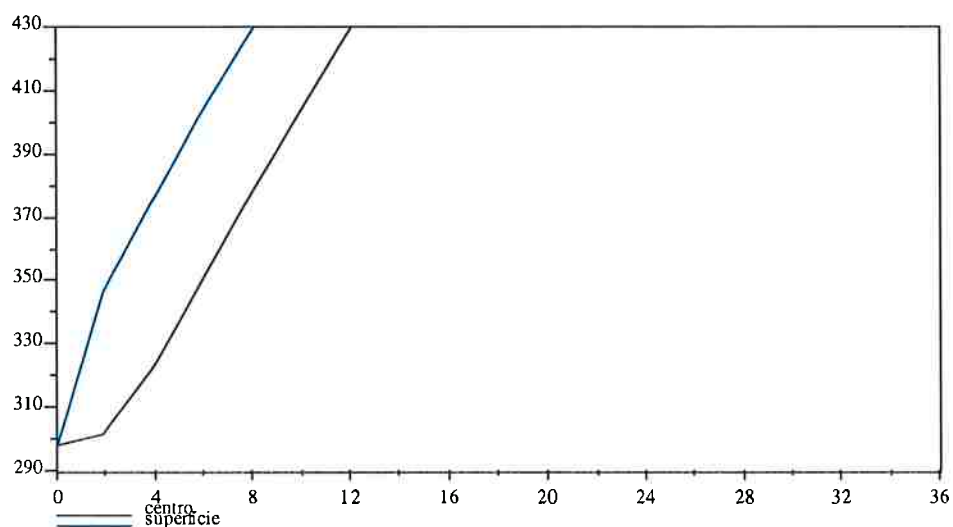


Graf. 9.2 Resultado gráfico do modelo (temperatura da superfície e centro vs. tempo) para pelota de raio 12 mm e temperatura do forno 1223 K

Analisando a variação do raio da pelota, podemos observar que a diminuição do raio acarreta a diminuição do gradiente de temperatura, ou seja, velocidade de reação mais rápida. Assim, a temperatura do centro e da superfície da pelota convergem mais rapidamente quando comparado com o resultado obtido para o raio da pelota igual a 8mm. E o inverso ocorre quando diminuimos o raio da pelota. Assim, fica evidente que o processo não é isotérmico.

9.2 Gradiente de Temperatura no Início do Processo de Redução

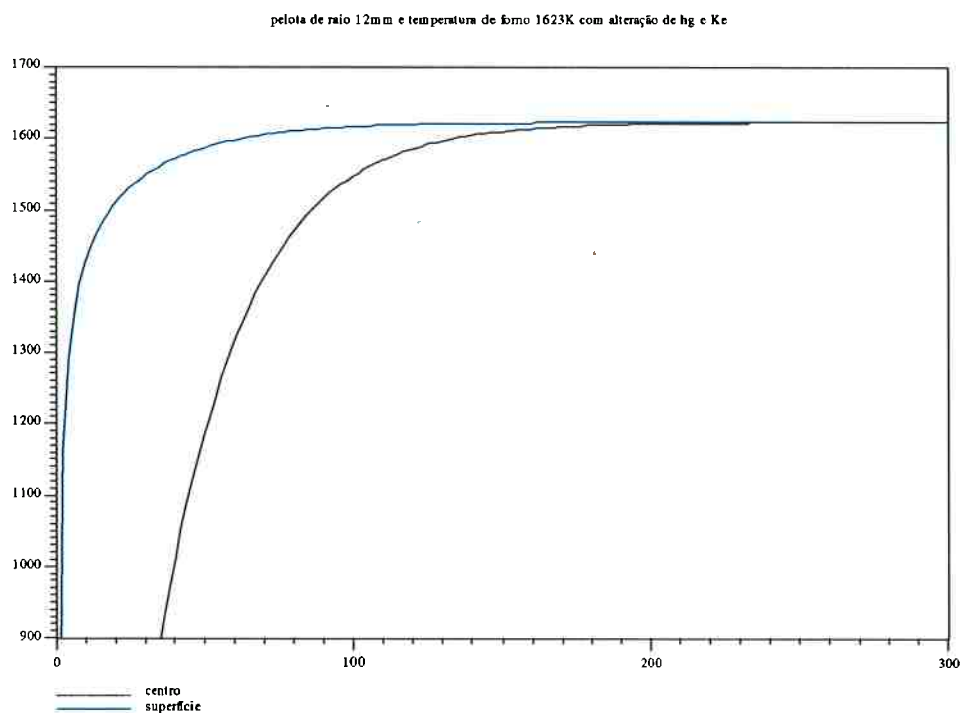
Quando analisamos o Graf. 9.3 (este gráfico nada mais é que um Zoom do Graf 9.2), pode-se observar que no início do processo de redução da pelota auto-redutora, a curva que representa a superfície da pelota tem um gradiente de temperatura que tende ao infinito (forma de uma barriga), enquanto o centro da pelota apresenta um gradiente de temperatura que tende a zero. Isto pode ser explicado pelo seguinte: no início do processo de redução a troca de calor entre a superfície e o meio externo é muito grande, pois o forno encontra-se à temperatura de 1223K enquanto a temperatura da superfície da pelota encontra-se à temperatura ambiente. Já no centro da pelota, neste mesmo instante, não há troca de calor, por isso o gradiente tende a zero.



Graf 9.3 Referência ao gradiente de temperatura no início do processo de redução para a pelota de $R = 12 \text{ mm}$ e $T_F = 1223\text{K}$ (temperatura do forno)

9.3 Variação do Coeficiente de Transferência de Calor e Condutividade Térmica específica

O Graf. 9.4 de raio 12mm e temperatura do forno 1623K teve os valores de h_g (coeficiente de transferência de calor) e K_e (condutividade térmica efetiva) multiplicado por dez e dividido por dez, respectivamente, quando comparados com os valores apresentados no Graf. 9.5. Assim, o valor de h_g que era de $150 \text{ J/m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K}$, passou a $1500 \text{ J/m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K}$, enquanto o valor de K_e passou de $14 \text{ W/m} \cdot \text{K}$ para $1,4 \text{ W/m} \cdot \text{K}$.

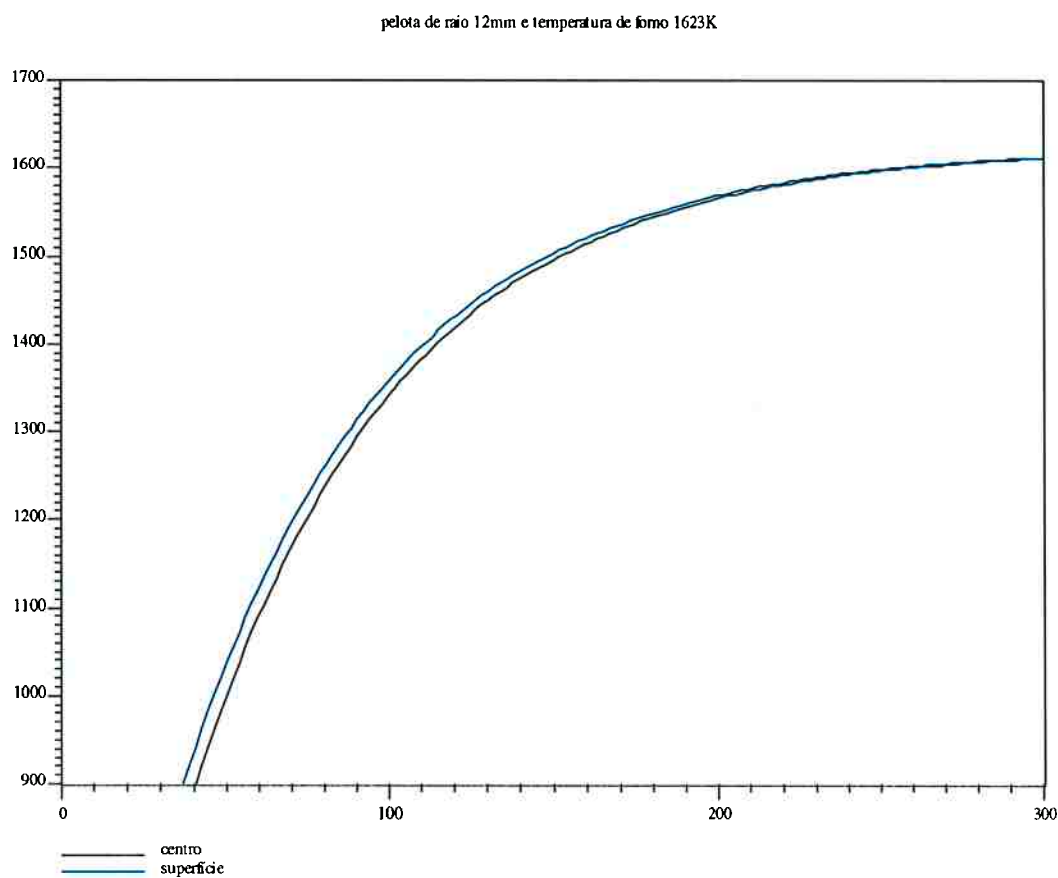


Graf 9.4 – Comportamento da temperatura do centro e da superfície da pelota de raio 12mm e Temperatura do forno 1623K, incluindo alterações no h_g e K_e .

Como consequência desta alteração, observamos um aumento no gradiente de temperatura, que apresentam os seguintes valores:

Para $t = 100\text{s}$, o gradiente do graf 9.5 é aproximadamente igual a $1,7^{\circ}\text{C}/\text{mm}$, enquanto o gradiente do graf. 9.4 é aproximadamente igual a $5^{\circ}\text{C}/\text{mm}$.

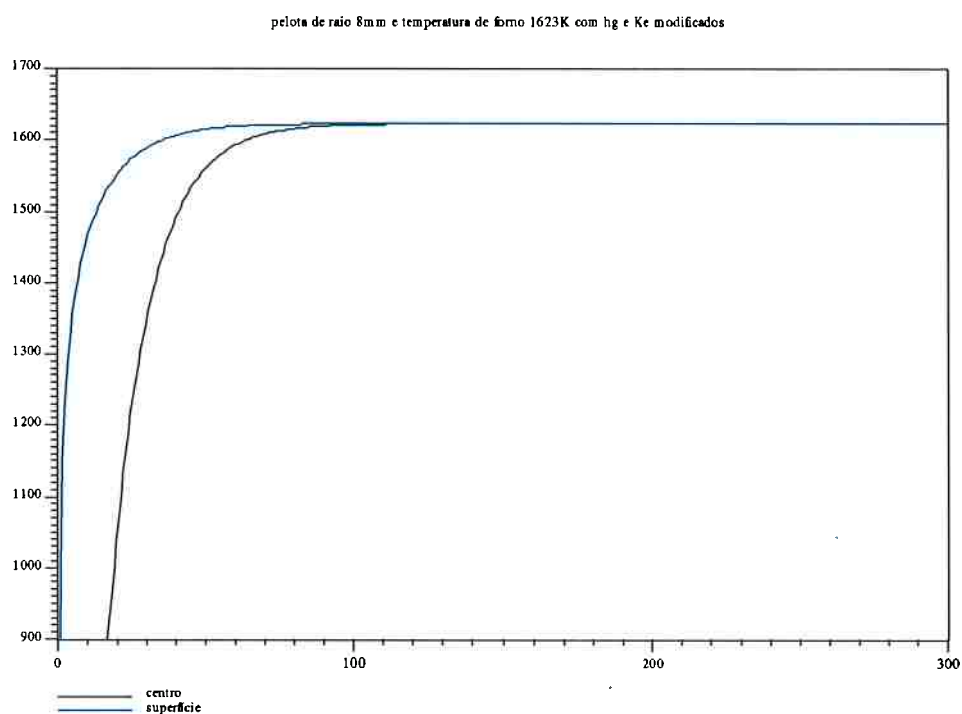
Esta diferença de gradiente ocorre devido a diminuição da condutividade térmica específica, que dificulta a transferência de calor no interior da pelota, enquanto o aumento do coeficiente de transferência de calor facilita o aumento de temperatura da superfície da pelota.



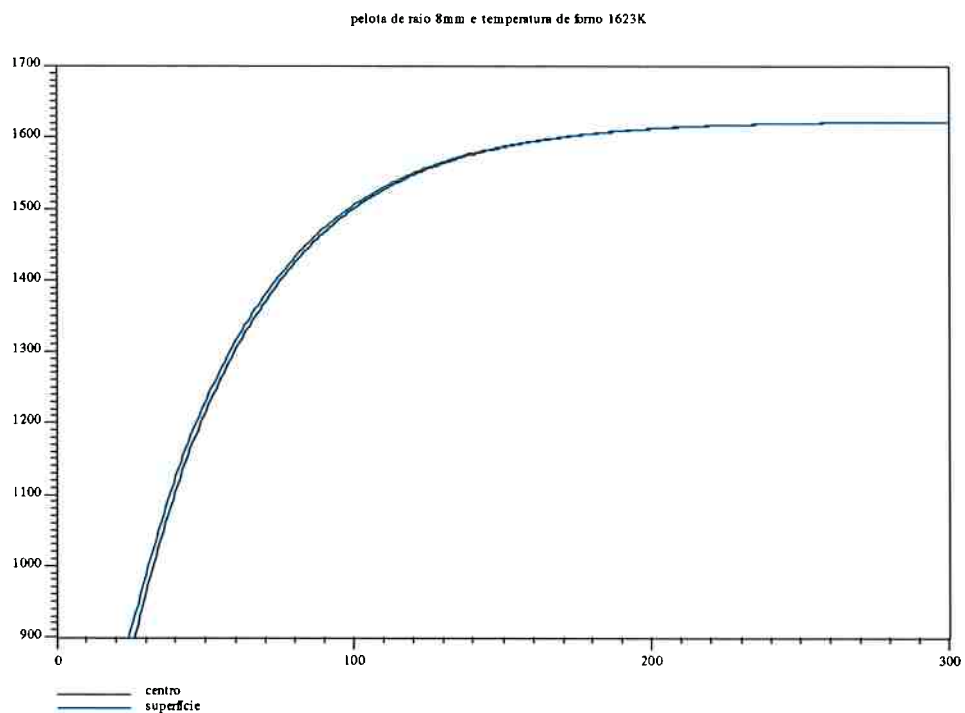
Graf 9.5 – Comportamento da temperatura do centro e da superfície da pelota de raio 12mm e Temperatura do forno 1623K.

O mesmo procedimento de alteração dos valores do coeficiente de transferência de calor e condutividade térmica efetiva foram realizados para a pelota de raio 8 mm. Da mesma forma, observou-se a formação do gradiente de temperatura maior ao observarmos o graf 9.6.

Contudo, pode-se observar que o gradiente de temperatura é inferior para a pelota de raio menor, pois a “resistência” quanto a transferência de calor na pelota de raio 8mm é menor e o centro da pelota atinge uma temperatura maior no mesmo intervalo de tempo quando comparado com a pelota de 12mm.



Graf 9.6 – Comportamento da temperatura do centro e da superfície da pelota de raio 8mm e Temperatura do forno 1623K, incluindo alterações no hg e Ke.



Graf 9.7 – Comportamento da temperatura do centro e da superfície da pelota de raio 8mm e Temperatura do forno 1623K.

9.4 Comparação com Dados Experimentais

Os dados medidos por Mourão {01} para redução de uma pelota de raio 8 mm e temperatura do forno igual a 1223K e 1373K são apresentados na Fig. 9.1. Comparando os resultados do modelo proposto neste trabalho com os dados experimentais, podemos afirmar ser coerente a hipótese da temperatura do centro e da superfície se aproximarem a partir de um determinado tempo de reação (estável).

Outro ponto importante observado, é que o gradiente de temperatura (superfície-centro) tende a aumentar com o aumento da temperatura do forno. Além de comprovar esta hipótese com os dados experimentais, basta analisar os gradientes de temperatura presentes nos Grafs. 9.1 e 9.7, onde o primeiro têm uma temperatura de forno correspondente a 1223K e o segundo, 1623K. Assim, calculando os gradientes de temperatura com base nos gráficos, temos:

Para $t = 100s$.

Graf9.1- gradiente de temperatura = $0.625^{\circ}C / mm$

Graf 9.7- gradiente de temperatura = $1.5^{\circ}C / mm$

Ainda vale ressaltar outra coerência entre os dados do modelo matemático e da parte experimental {01} no que se refere a temperatura do centro e da superfície da pelota, pois quanto maior a temperatura do forno, mais rápido ocorre o aquecimento da pelota. Portanto, obtemos temperaturas do centro e da superfície maiores, para um mesmo intervalo de tempo de reação, quando aumenta-se a temperatura do forno. Voltando ao exemplo dos Graf. 9.1 e 9.7, temos para o tempo de reação igual a 50s:

Graf9.1- $T_c = 938 K$ (temperatura do centro) e $T_s = 958 K$ (temperatura da superfície)

Graf9.7- $T_c = 1230 K$ (temperatura do centro) e $T_s = 1250 K$ (temperatura da superfície)

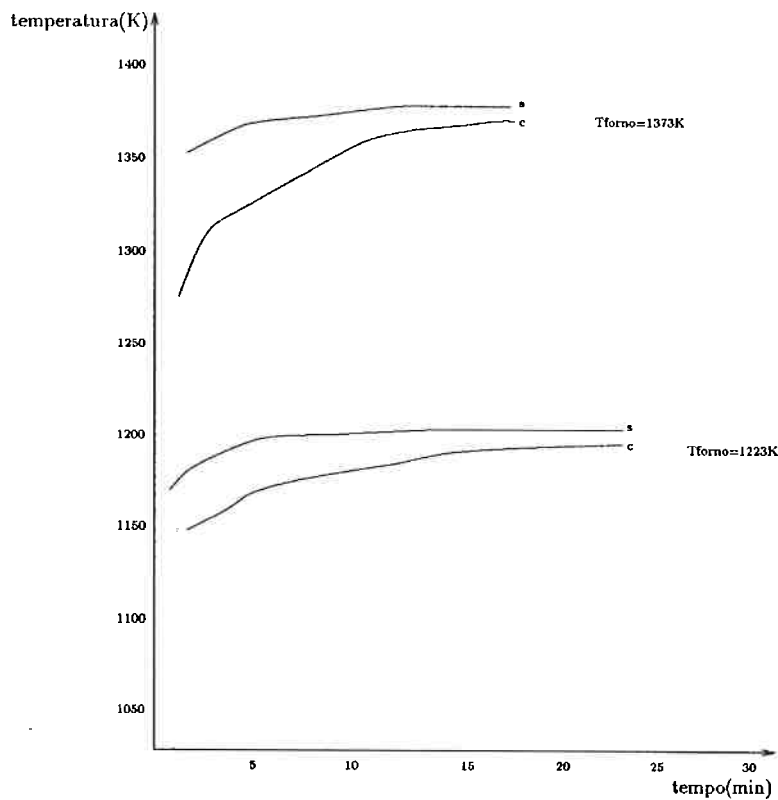


Figura 9.1- Dados experimentais elaborados por Mourão {01) para pelota de raio $R_p = 8$ mm e temperaturas de forno igual a 1223 K e 1373 K.

10 - Conclusão

De uma forma geral, o modelo apresentado neste trabalho se mostrou bem coerente com os objetivos propostos pelo mesmo, respeitando as condições impostas e apresentando um comportamento compatível aos dados apresentados pelo modelo experimental.

As análises sobre o modelo matemático proposto neste trabalho baseiam-se apenas no perfil térmico do processo de redução, contudo a listagem do programa (ver Capítulo 8) contempla um estudo mais profundo sobre o processo, mas que não tiveram

seus gráficos gerados para a análise, como, por exemplo, a análise da concentração dos componentes gasosos em função do tempo.

Por isso, os esforços realizados para o desenvolvimento do modelo matemático que simule a redução da pelota auto-redutora deverão ter continuidade, e alguns dos “bugs”, como por exemplo, assumir relação área sobre volume constante na pelota para Fe_2O_3 e C, poderão ser solucionados em uma próxima versão do modelo. Portanto, podemos dizer, que o modelo atual é um “embrião” para o modelo de redução da pelota auto-redutora.

11- ANEXOS (Software- Scilab)

Este anexo foi extraído da Home-page oficial do Software Scilab, no endereço <http://www-rocq.inria.fr/scilab/> , na seção de perguntas freqüentemente respondidas, permitindo assim, que os interessados tenham acesso mais rápido e direto sobre algumas características do software no qual é rodado o programa.

1 How to pronounce Scilab?

Scilab is spelled S-c-i-l-a-b, but it is not pronounced “Camembert” as many people think. It is pronounced as in Scientific Laboratory, i.e. in international phonetic syntax: 'sailæb

2 Latest release

The latest version of Scilab is 2.5 released on 10 December 1998.

3 Communication with Scilab Group

To keep up with the latest developments in Scilab World, you can become a member of SciClub. By sending an e-mail to :

Scilab@inria.fr

with subject: SciClub

and content: Your Email Address

you become a member and receive latest news on Scilab (information on patches, toolboxes, versions, contributions ...).

If you have a contribution to Scilab which you like to share with the Scilab community, you can send us a description and its availability, we will put the information in a contrib file and announce it in SciClub

4 Bug reporting

You can report bug by sending an e-mail to : Scilab@inria.fr

with subject: SciClub

and content: Your Email Address

Or you can go to our Bugs Report Page of Scilab : [/scilab/bugsreport/](http://scilab/bugsreport/)

5 Where is Scilab?

You can get Scilab by anonymous FTP from <ftp.inria.fr> (Internet #192.93.2.54)

in directory "INRIA/Projects/Meta2/Scilab".

There is also the Web Home Page of Scilab: [/scilab](http://scilab).

6 Can I run Scilab on my computer?

Scilab is available for most Unix workstations, PC and Linux machines.

A Macintosh port is also available at <ftp.inria.fr> in directory ["INRIA/Projects/Meta2/Scilab/contrib/Mac"](ftp.inria.fr:INRIA/Projects/Meta2/Scilab/contrib/Mac).

Scilab is distributed in source code format and as binary distribution for the following systems: Dec Alpha (OSF 3.0), Sun Sparc stations (Sun OS 4.1.3 and Sun Solaris 2.3), HP9000 (HP-UX 9.01), SGI Mips (Irix 5.2), IBM-RS6000 (AIX 3.2), PC (Linux a.out and ELF, WINDOWS 95, 98 and NT4, SOLARIS-X86), Linux PPC.

For other systems see <ftp.inria.fr> in directory
["ftp://ftp.inria.fr/INRIA/Projects/Meta2/Scilab/distributions"](ftp://ftp.inria.fr/INRIA/Projects/Meta2/Scilab/distributions).

7 How to install Scilab on UNIX boxes?

After you unpack the distribution, be sure to look at the README file where installation information are given. Do not forget to return to Inria the file notice.tex or notice.ps (you may use e-mail).

In order to build Scilab from the source code, you need a Fortran compiler and a C compiler. Scilab requires approximately 110Mb of disk storage to unpack and install from scratch. The binary distribution (which includes the on-line documentation) is less than 30Mb.

8 How to install Scilab on WINDOWS boxes?

Windows specific files Scilab 2.4.1 installer : to install Scilab double click on the file "scilab241.exe" and follow instructions. Be patient, the installer is slow. You can also download a self-extracting archive without installer. Put it in any folder (usually C:\Program Files) and double click on it. A new folder named "Scilab-2.4.1" which contains all the Scilab distribution will be created. Then click on "Scilab-2.4.1\bin\runscilab.exe" to launch Scilab. To uninstall Scilab, you only have to destroy the "Scilab-2.4.1" folder.

9 How to install Scilab on Macintosh boxes?

subsubsection*Requirements

You need a Macintosh with a 68020 (or better) processor with 8 Mb RAM and 7 Mb Hard Disk space at least to use Scilab. 68030 + 68882 (fpu) or PowerPC are recommended. Scilab works on System 7.xx (not tested on system 6).

Having a Postscript Laser Writer is a good thing if you want to print the documentation. It may be very difficult to use Scilab without any documentation.

Installing Scilab

First create a folder called 'scilab-2.1' or whatever. You need to ftp macros.sea.hqx , RebuildLibs.sea.hqx, demos.sea.hqx, man.sea.hqx, and scilab-(ppc, fpu or nofpu).sea.hqx depending of your hardware. Put all compressed archives (they are auto-uncompress archives) into the 'scilab-2.1' folder. Then uncompress them.

You should find (at least) inside your 'scilab-2.1' folder :

Scilab PPC (or fpu or nofpu)

scilab.star

scilab.quit

macros (folder)

RebuildLibs (folder)

demos (folder)

man (folder)

and if you want to be complete : tests (folder) docs (folder)

Please verify that all macros sub-directories are correctly uncompressed. Scilab needs them.

Since the b7 version, you first need to rebuild the libs associated with the macros. This is needed to be sure that the pre-compiled libs will fit to your particular Scilab version (data alignment especially). Before that the startup procedure of scilab will return an error. You just need to type (after the prompt '-->') :

```
exec('/RebuildLibs/RebuildAll.sci')
```

. It should take about 15 minutes on a PowerMac.

10 Where is the documentation of Scilab?

The documentation comes in two ways.

First, there is the on-line manual you can access with the help of Scilab.

Second, there are a few papers and manuals:

- Introduction to Scilab
- Scicos: a Dynamic System Builder and Simulator
- LMITOOL: Linear Matrix Inequalities Optimization Toolbox
- Intersci: Automatically Interfacing C and Fortran Subroutines
- Signal Processing toolbox manual
- Scilab internal structure description
- Communication Toolbox Documentation
- Metanet User's Guide and Tutorial

They are distributed in L^AT_EX source in the source version, but there are no longer given with the binary distribution. Instead you can get the corresponding Postscript files at <ftp.inria.fr> in directory ["/INRIA/Projects/Meta2/Scilab/documentation/"](ftp.inria.fr:/INRIA/Projects/Meta2/Scilab/documentation/).

You will also find in the same directory the Postscript, HTML and PDF format of the on-line help manual.

11 What are the objects manipulated by Scilab?

- Constant real and complex matrices
- Polynomial matrices (real and complex coefficients)
- Rational matrices
- n dimensional matrices

- Linear Systems (syslin lists)
- Matrices of strings
- Sparse constant real and complex matrices
- Boolean full and sparse matrices
- Graphs (Metanet toolbox)
- Lists and typed lists
- Functions
- Libraries

12 What are the main differences between Scilab and Matlab?

12.1 Functions

Functions in Scilab are NOT Matlab m-files but variables. One or several functions can be defined in a single file (say myfile.sci). The name of the file is not necessarily related to the the name of the functions. The name of the function(s) is given by

```
function [y]=fct1(x)
```

```
...
```

```
function [y]=fct2(x)
```

```
...
```

The function(s) are not automatically loaded into Scilab. Usually you have to execute the command `getf("myfile.sci")` before using it.

Functions can also be defined on-line (or inside functions) by the command `deff`.

To execute a script file you must use `exec("filename")` in Scilab and in Matlab you just need to type the name of the file.

12.2 Comment lines

Scilab comments begins with: `//`

Matlab comments begins with: %

12.3 Variables

Predefined variables usually have the % prefix in Scilab (%i, %inf, ...). They are write protected.

12.4 Strings

Strings are considered as 1 by 1 matrices of strings in Scilab. Each entry of a string matrix has its own length.

12.5 Boolean variables

Boolean variables are %T, %F in Scilab and 0, 1 in Matlab. Indexing with boolean variables may not produce same result. Example `x=[1,2];x([1,1])` [which is NOT `x([%T,%T])`] returns [1,1] in Scilab and [1,2] in Matlab. Also if x is a matrix `x(1:n,1)=[]` or `x(:)=[]` is not valid in Matlab.

12.6 Polynomials

Polynomials and polynomial matrices are defined by the function `poly` in Scilab (built-in variables). They are considered as vectors of coefficients in Matlab.

12.7 Empty matrices

`[]+1` returns 1 in Scilab and `[]` in Matlab.

12.8 Plotting

Except for the simple plot and mesh (plot3d) functions, Scilab and Matlab are not compatible.

12.9 Scicos

Scicos (Scilab) and Simulink (Matlab) are not compatible.

12.10 A dictionary

Most built in functions are identical in Matlab and Scilab. Some of them have a slightly different syntax. Here is a brief, partial list of commands with significant different syntax.

Matlab Scilab "equivalent"

all	and
any	or
balance	balanc
clock	unix('date')
computer	unix_g('machine')
cputime	timer
delete	unix('rm file')
dir	unix_g('ls')
echo	mode
eig	spec or bdiag
eval	evstr
exist	exists + type
fclose	file('close')
feof	
ferror	
feval	evstr and strcat
filter	rtitr
finite	(x < %inf)
fopen	file('open')
fread	read
fseek	file

ftell	
fwrite	writeb
global	
home	
isglobal	
isinf(a)	a == %inf
isnan(a)	a ~= a
isstr(a)	type(a) == 10
keyboard	pause + resume
lasterr	
lookfor	apropos
more	lines
pack	stacksize
pause	halt
qz	gspec+gschur
randn	rand
rem	modulo
setstr	code2str
strcmp(a,b)	a == b
uicontrol	
uimenu	getvalue
unix	unix_g
version	
which	whereis
nargin	[nargout,nargin]=argn(0)
nargout	

13 Local and Global variables

If a variable in a function is not defined (i.e. is not in the input parameters), then it is automatically considered as a global variable. The current value of this variable is used in the function. Functions can be invoked with less input or output parameters. Here is an example:

```
function [y1,y2]=f(x1,x2)
```

```
y1=x1+x2
```

```
y2=x1-x2
```

```
-->[y1,y2]=f(1,1)
```

```
y2 =
```

```
0.
```

```
y1 =
```

```
2.
```

```
-->f(1,1)
```

```
ans =
```

```
2.
```

```
-->f(1)
```

```
y1=x1+x2; y2=x1-x2
```

```
!-error 4
```

```
undefined variable : x2
```

```
at line 2 of function f
```

```
-->x2=1;
```

```
-->[y1,y2]=f(1)
```

```
y2 =
```

```
0.
```

```
y1 =
```

```
2.
```

```
-->f(1)
```

```
ans =
```

```
2.
```

14 How to compile and link fortran programs under Windows NT with Digital Fortran 6.0

- Include the attribute "dllexport" in the source file of the fortran program and specify the name of the exported file.

Example: The file `essai.f` contains

- `SUBROUTINE ESSAI(X)`
- `!DEC$ ATTRIBUTES DLLEXPORT :: ESSAI`
- `C`
- `DOUBLE PRECISION X(*)`
- `C`
- `...`
- Create a project of type "Win32 Dynamic-Link Library" (call it for example `proj`) with option "empty DLL project".
- Include `essai.f` in `proj`.
- Modify Project Settings as follows: Select Fortran and in the category "External Procedures", define the "Argument passing convention" as "C, By Reference". Also select "Append Underscore to External Names" option. The resulting "Project Options" (generated automatically) is
 - `/assume:underscore /check:bounds /compile_only`
 - `/debug:full /iface:cref /include:"Debug/" /libs:dll`
 - `/nologo /warn:argument_checking /warn:nofileopt /module:"Debug/"`
 - `/object:"Debug/" /pdbfile:"Debug/DF60.PDB" /dll`
- Compile `essai.f` and build the project `proj`. This creates the file `proj.dll`
- To link this routine incrementally in Scilab place `proj.dll` in the current directory and do a link. This should be the result:

-->link("proj.dll","ESSAI") Linking ESSAI (in fact ESSAI_) Link done ans = 0.

12- Referências Bibliográficas

01. MOURÃO, M.B. "Análise do processo de redução de minério de ferro por carbono na forma de pelotas auto-redutoras", Tese (Doutoramento). Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 1988.
02. D. HENRY, "Some Infinite-Dimensional Morse-Smale Systems Defined by Parabolic Partial Differential Equations", Journal Differential Equations 59 (1985), 165-205.
03. S. SUN E W-K LU, "Mathematical modelling of reactions in ore/coal composites", ISIJ International, bf33 (10) (1993), 1062-1069.
04. SUN E LU, W. K, Bulding of a Mathematical Model for Reduction of Iron Ore in Ore/Coal Composites, ISIJ International, Vol. 39 (1999), Nº 2 ,pp 130-138.
05. G.H.GEIGER E D.R.POIRIER, "Transport Phenomena in Metallurgy", Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts (1973).
06. FORTUNA, ARMANDO DE OLIVEIRA, "Técnicas Computacionais para Dinâmicas dos Fluídos- Conceitos Básicos e Aplicações", São Paulo; Editora da Universidade de São Paulo, 2000.
07. MUNHOZ, ANTONIO SERGIO, "Estudo de um sistema de reação-difusão com condições de fronteira não-lineares", Tese (Mestrado), Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo, 1998.
08. T.AKIYAMA, H.OHTA, R. TAKAHASHI, Y. WASEDA E J. YAGI, "Measurement and modelling of thermal conductivity for dense iron oxide and puros iron ore agglomerates in stepwise reduction", ISIJ International, 32 (7) (1992).
09. KUBASCHEWSKI, O.; ALCOCK. C.B. Metallurgical Thermochemistry. 5. ed. Oxford, Pergamon, 1979

10. MARK E. DAVIS, "Numerical Methods and Modelling for Chemical Engineers" - John Wiley & Sons - New York – 1984, exemplo p.147-154
11. MALISKA, C.R. , Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional, Editora LBC, 1ª ed., 1995.
12. TURKDOGAN, E.T. Physical Chemistry of high Temperature Technology. New York, Academic Press, 1980.pp 303-325.
13. BOGDANDY, L.von; ENGELL, H.J. The Reduction of Iron Ores. Berlin, Springer-Verlag, 1971.
14. VILLEGAS, E.A., SAAB, M.W. Evolução dos Estudos da Cinética de Redução de Óxidos de Ferro. In: CONGRESSO ANUAL DA ABM, 35
15. MARTINS, L.C.B. Kinetics of reduction of iron ores by mixed gases under pressure. Phd Thesis, Carnegie-Mellon University, 1981.
16. D'ABREU, J.C Fenomenologia e cinética da redução de pelotas e sinteres no intervalo 900- 1350°C em condições isotérmicas e simuladas do alto-forno. Tese de Doutorado, EPUSP, 1984. p 29-48
17. HAYNES, P.C. The kinetics of formation of H₂O and CO₂, during iron ore reduction, Metallurgical Transactions B, 10 (2): 211-217, Jun. 1979.
18. TURKDOGAN, E.T.; VINTERS, J.V. Gaseous reduction of iron oxides: Part III: Reduction-Oxidation of Porous and Dense Iron Oxides and Iron Met. Trans., New York, vol.3, pp1561-1574, 1972.
19. EL-GEASSY, A.A.; RAJAKUMAR,V. Gaseous Reduction of Wustite, with H₂, CO and H₂-CO mixtures. Transactions ISIJ, Tokyo, 25: 449-58, 1985.

20. RAO, V.K. Mechanism and the intrinsic rates of reduction of metallic oxides. Metallurgical Transactions B, New York, 10(2): 243-55, Jun. 1979.
21. TRUSHENSKI, S.P.; LI, K.; PHILBCOOK, W.O. Non-topochemical reduction of iron oxides. Metallurgical Transaction, Warrendale, 5: 1149-58, 1974.