

Simulação e Sensitividade Paramétrica para um Reator de Pirólise de Finos de Xisto em Leito de Arraste

03/91

Março – 91
Campinas – SP – Brasil

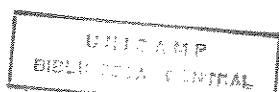
Simulação e Sensitividade Paramétrica para um Reator de Pirólise de Finos de Xisto em Leito de Arraste

03/91

Este exemplar corresponde à redação final da tese defendida por
Carlos Alberto Ubirajara Gontarski em 25.03.91.


Prof. Dr. Milton Mori
Orientador

Março – 91
Campinas – SP – Brasil



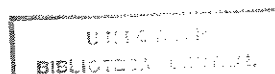
Carlos Alberto Ubirajara Gontarski

Simulação e Sensitividade Paramétrica para um Reator de Pirólise de Finos de Xisto em Leito de Arraste

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Engenharia Química da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP, como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre.

BC/910 H624

Campinas
1991



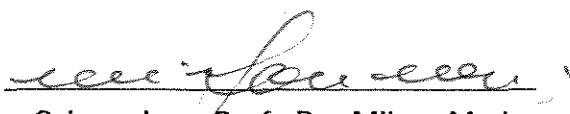
Universidade Estadual de Campinas
Faculdade de Engenharia Química


Simulação e Sensitividade Paramétrica
para um Reator de Pirólise de Finos
de Xisto em Leito de Arraste

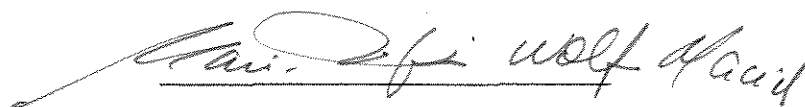
Autor : Carlos Alberto Ubirajara Gontarski

Tese submetida à Comissão de Pós – Graduação
da Faculdade de Engenharia Química – UNICAMP
como parte dos requisitos necessários para a obtenção
do grau de Mestre em Engenharia Química.

Aprovada por:


Orientador : Prof. Dr. Milton Mori


Prof. Dr. Leonardo Goldstein Jr.


Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel

Campinas – SP – Brasil

Março - 1991

*"Este trabalho é dedicado, com plena
satisfação, à minha família e à minha
querida Suzana pelo incetivo e com-
preensão incomensuráveis"*

Agradecimentos

Em especial ao Professor Milton Mori, pela valiosa orientação e amizade.

Ao engenheiro Waldir Martignoni da Petrobrás-SIX pelo material técnico fornecido e pelas discussões a respeito do tema deste trabalho.

Ao professor Cesar C. Santana pelas sugestões.

Aos colegas Henry França Meier e Georges Kaskantzis Neto pelas contribuições através de discussões e sugestões.

A minha querida Suzana que colaborou de diversas formas na confecção deste trabalho.

A meus pais e irmãos que sempre me incentivaram.

Ao CNPQ pela bolsa de estudos na primeira fase do curso.

A UNICAMP pelos equipamentos colocados à minha disposição e pela bolsa de Monitoria II cedida durante a fase de elaboração da tese.

Ao Fundo de Apoio à Pesquisa da Unicamp pela bolsa de auxílio-ponte cedida.

Ao Departamento de Tecnologia Química da Universidade Federal do Paraná pelo apoio durante este último ano do trabalho.

Conteúdo

1	INTRODUÇÃO	1
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	4
2.1	Introdução	4
2.2	Pirólise do Xisto	4
2.3	Fluidodinâmica do Transporte Pneumático	6
2.4	Análise do Processo Térmico	14
2.4.1	Interação Térmica Entre Gás e Partícula	14
2.4.2	Interações Térmicas Entre a Parede do Duto e a Mistura de Gás e Partícula	17
2.4.3	Condução térmica no Interior das Partículas	22
2.4.4	Interações térmicas entre o gás de aquecimento, passando por um ânulo, e as paredes interna e externa desse ânulo	22
2.4.5	Interações Térmicas entre Superfícies Aquecidas e o Ar Ambiente	25
2.5	Métodos Numéricos	26
2.6	Simulação pelo Modelo Simplificado	32
3	MODELAGEM MATEMÁTICA	34
3.1	Descrição do Sistema Físico	35
3.2	Cinética da Pirólise	38
3.3	Balances de Massa	40
3.4	Balances da Quantidade de Movimento	42
3.5	Balances de Energia	44
3.5.1	Mecanismos de Transferência de Calor	45
3.5.2	Equações dos Balances de Energia	60
3.6	Propriedades Físicas	62

3.6.1	Xisto	62
3.6.2	Gás de Arraste	64
3.6.3	Gás de Aquecimento	68
3.6.4	Propriedades do Reator	71
3.6.5	Propriedades do Refratário (Isolamento)	72
4	MÉTODOS NUMÉRICOS APLICADOS	73
4.1	Discretização do Modelo Matemático Proposto	73
4.2	Solução do Sistema de Equações Algébricas Gerado	74
4.2.1	Cálculo do Jacobiano	75
4.2.2	Inversa do Jacobiano	76
4.2.3	Método de Newton Estendido	77
4.3	Forma de Utilização das Subrotinas	80
4.4	Dados Utilizados e Programa para Cálculo das Condições Iniciais . . .	81
4.5	Programas para Auxiliar a Análise Paramétrica	92
4.5.1	DERIV.FOR	92
4.5.2	DECISAO.FOR	93
4.5.3	GRAFICOS.FOR	94
5	RESULTADOS E ANÁLISES	96
5.1	Validação do Modelo Matemático	96
5.1.1	Teste 01	97
5.1.2	Testes 02 e 03	102
5.2	Identificação de Parâmetros.	105
5.3	Análise da Convergência do Método Numérico.	111
5.4	Análise paramétrica dos dados e correlações	121
5.4.1	Grupo I - Parâmetros introduzidos via arquivos de dados . . .	124
5.4.2	Grupo II - Parâmetros introduzidos via constante K	169
6	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	202
	APÊNDICE	206
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	257

Lista de Tabelas

2.1	Correlações para o coeficiente de transferência de calor para partículas num meio infinito	16
2.2	Correlações para o coeficiente de transferência envolvendo a influência da concentração	17
2.3	Tabela com as constantes da equação 2.86	26
4.1	Estrutura do arquivo de propriedades físicas - dados gerais para uso do programa COND.FOR	84
4.2	Tabela ilustrando as informações contidas nos arquivos com extensão *.prj	84
4.3	Informações incluídas no arquivo de dados fixos do teste 01	85
4.4	Ilustração do formato para os dados do arquivo de dados iniciais e/ou intermediários - dados para o teste 01	85
4.5	Informações contidas no arquivo de dados variáveis para o teste 01	86
4.6	Estrutura para os dados do arquivo de dados iniciais e/ou intermediários - dados para o teste 01	86
4.7	Estrutura do arquivo com os dados necessários para o plano de execução por passos - dados utilizados para o teste 01	86
4.8	Estrutura do arquivo de propriedades físicas - dados para o teste 01	87
4.9	Informações contidas no arquivo de dados variáveis para o teste 02	88
4.10	Estrutura para os dados do arquivo de dados iniciais e/ou intermediários - dados para o teste 02	88
4.11	Estrutura do arquivo com os dados necessários para o plano de execução por passos - dados utilizados para o teste 02	88
4.12	Estrutura do arquivo de propriedades físicas - dados para o teste 02	89
4.13	Informações contidas no arquivo de dados variáveis para o teste 03	90

4.14	Estrutura para os dados do arquivo de dados iniciais e/ou intermediários - dados para o teste 03	90
4.15	Estrutura do arquivo com os dados necessários para o plano de execução por passos - dados utilizados para o teste 03	90
4.16	Estrutura do arquivo de propriedades físicas - dados para o teste 03 .	91
5.1	Teste 01 - Resumo do resultado	97
5.2	Comparação com os resultados experimentais - T_{w_r} - Teste 01	99
5.3	Comparação com os resultados experimentais - T_{w_i} - Teste 01	99
5.4	Comparação com os resultados experimentais - conversão - Teste 01 .	100
5.5	Teste 02 - Resumo do resultado	103
5.6	Teste 03 - Resumo do resultado	103
5.7	Comparação com os resultados experimentais - T_{w_r} e T_{w_i} - Testes 02 e 03	105
5.8	Comparação com os resultados experimentais - conversão - Testes 02 e 03	105
5.9	Comparativo dos resultados de T_{w_r} e da conversão com dados experi- mentais para vários fatores de forma diferentes	111
5.10	Configurações utilizadas para os parâmetros do método numérico — análise da convergência	112
5.11	Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo - diferenças entre os valores da esquerda e da direita - NEL5B	112
5.12	Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo - diferenças entre os valores da esquerda e da direita - PS200	113
5.13	Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo - diferenças entre os valores da esquerda e da direita - PS50	113
5.14	Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo - diferenças entre os valores da esquerda e da direita - PS10	114
5.15	Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo - diferenças entre os valores da esquerda e da direita - PS2	114
5.16	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Variável analisada : Tamanho do passo	115

5.17	Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo – diferenças entre os valores da esquerda e da direita – NEL10	115
5.18	Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo – diferenças entre os valores da esquerda e da direita – NEL1	116
5.19	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Variável analisada : Número de elementos	117
5.20	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — diversas configurações analisadas	118
5.21	Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo – diferenças entre os valores da esquerda e da direita – CBASES	119
5.22	Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo – diferenças entre os valores da esquerda e da direita – CBASE1	120
5.23	Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo – diferenças entre os valores da esquerda e da direita – CBASE2	120
5.24	Tempo de processamento de acordo com o número de elementos	120
5.25	Nomenclatura utilizada nas análises deste capítulo	122
5.26	cont. da tabela 5.25	123
5.27	Símbolos utilizados nas tabelas	124
5.28	Tabela dos valores adotados para os parâmetros em cada um dos casos indicados pelos sufixos - Parâmetros dos arquivos de dados	125
5.29	Tabela dos coeficientes adotados para os parâmetros em cada um dos casos indicados pelos sufixos – K	126
5.30	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Porosidade inicial	127
5.31	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Temperatura inicial do gás de aquecimento	130
5.32	Tabelas das maiores diferenças absolutas(a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Vazão inicial do xisto	133
5.33	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Vazão inicial do gás de arraste	138
5.34	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Diâmetro do reator	141

5.35	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Vazão de gás de aquecimento	144
5.36	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Pressão inicial	148
5.37	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Emissividade do Reator	151
5.38	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Velocidade inicial das partículas de xisto	153
5.39	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Diâmetro médio das partículas . . .	155
5.40	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Velocidade inicial do gás de arraste	158
5.41	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Absortividade da parede externa do reator	160
5.42	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Emissividade da parede externa do reator	161
5.43	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Absortividade da parede interna do reator	162
5.44	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Absortividade do xisto	163
5.45	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Emissividade da parede interna do refratário	164
5.46	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Absortividade da parede interna do refratário	165
5.47	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Variável analisada : Umidade inicial do xisto	166

5.48	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Energia de ativação da reação 2 . . .	170
5.49	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Massa específica do xisto	172
5.50	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Energia de ativação da reação 1 . . .	176
5.51	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Calor específico do xisto	179
5.52	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Absortividade do gás de aquecimento	181
5.53	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Emissividade do gás de aquecimento	184
5.54	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Calor específico do gás de aquecimento	186
5.55	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Calor específico do gás de arraste .	189
5.56	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Fator pré-exponencial para a reação 2	192
5.57	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Calor de reação	195
5.58	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Fator pré-exponencial para a reação 1	197
5.59	Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — Parâmetro analisado : Coefficiente de arraste gás-partícula	199

Lista de Figuras

2.1	Ilustração do domínio da variável independente no intervalo de z_i a z_f no método da colocação ortogonal em elementos finitos com dois pontos de colocação por elemento e NEL elementos totais.	29
2.2	Ilustração da estrutura matricial para a colocação ortogonal em elementos finitos, usando polinômios de Hermite cúbicos, de uma equação diferencial (uma variável dependente) com três elementos	31
3.1	Desenho esquemático do Sistema Físico - cotas e diâmetros em cm . .	36
3.2	Analogia da radiação com circuitos elétricos	55
3.3	Analogia para a equação (3.79)	55
3.4	Desenho esquemático da interação pela radiação no lado do aquecimento	56
3.5	Desenho esquemático da transformação para ligação em forma de estrela	58
5.1	Comparação dos resultados numéricos das temperaturas com os dados experimentais — TESTE 01	98
5.2	Comparação dos resultados numéricos com os dados experimentais para (a) T_w , (b) Conversão (c) ΔT_w , (d) velocidades — TESTE 01	101
5.3	Resultados numéricos para a porosidade e pressão — TESTE 01 . . .	102
5.4	Comparação dos resultados numéricos das temperaturas com os dados experimentais — TESTE 02	104
5.5	Comparação dos resultados numéricos com os dados experimentais para (a) T_w , (b) Conversão (c) ΔT_w , (d) velocidades — TESTE 02	106
5.6	Comparação dos resultados numéricos com os dados experimentais para (a) T_w , (b) Conversão (c) ΔT_w , (d) velocidades — TESTE 03	107
5.7	Comparação dos resultados numéricos das temperaturas com os dados experimentais — TESTE 03	108
5.8	Resultados numéricos para a porosidade e pressão — TESTE 02 . . .	109

5.9	Resultados numéricos para a porosidade e pressão — TESTE 03	109
5.10	Comparação dos resultados numéricos com os dados experimentais, variando o fator de forma, para (a) T_{w_r} , (b) conversão final (c) ΔT_{w_r} , (d) conversão	110
5.11	Influência da variação da porosidade nos perfis (a) - da conversão; (b) - T_{w_r} ; (c) - ΔX e (d) - ΔT_{w_r}	128
5.12	Influência da variação da temperatura inicial dos gases da combustão nos perfis (a) - da conversão; (b) - T_{w_r} ; (c) - ΔX e (d) - ΔT_{w_r}	131
5.13	Variação da conversão com a temperatura inicial dos gases de aquecimento	132
5.14	Variação da temperatura de parede do reator com a temperatura inicial dos gases de aquecimento	132
5.15	Influência da variação da vazão mássica de xisto nos perfis (a) - da conversão; (b) - ΔT_{w_r} ; e (c) - ΔX	135
5.16	Variação da temperatura de parede do reator com a vazão mássica de xisto	136
5.17	Variação da conversão com a vazão mássica de xisto	136
5.18	Influência da variação da vazão mássica do gás de arraste introduzido nos perfis (a) - da conversão; (b) - ΔT_{w_r} ; e (c) - ΔX	139
5.19	Variação da conversão com a vazão mássica do gás de arraste introduzido	140
5.20	Variação da temperatura de parede do reator com a vazão mássica de gás de arraste introduzido	140
5.21	Influência da variação do diâmetro do reator nos perfis (a) - da conversão; (b) - v_z ; (c) - ΔX e (d) - Δv_z	142
5.22	Variação da conversão com o diâmetro do reator	143
5.23	Influência da variação da vazão do gás de aquecimento nos perfis (a) - da conversão; (b) - T_{w_r} ; (c) - ΔX e (d) - ΔT_{w_r}	146
5.24	Variação da conversão com a vazão do gás de aquecimento	147
5.25	Influência da variação da pressão inicial nos perfis (a) - da conversão; (b) - v_z ; (c) - ΔX e (d) - Δv_z	149
5.26	Variação da conversão com a pressão inicial	150
5.27	Influência da variação da emissividade do reator nos perfis (a) - da conversão e (b) - ΔT_z	152

5.28	Influência da variação da estimativa da velocidade inicial das partículas nos perfis (a) - da conversão e (b) - Δv_x	154
5.29	Influência da variação do diâmetro médio das partículas nos perfis (a) - da velocidade da partícula; (b) - ΔT_{w_r} ; e (c) - Δv_x	156
5.30	Variação da velocidade das partículas com o diâmetro médio	157
5.31	Influência da variação da estimativa da velocidade inicial do gás de arraste nos perfis (a) - da conversão e (b) - Δv_x	159
5.32	Influência da variação da energia de ativação da segunda reação nos perfis (a) - da conversão; (b) - ΔT_{w_r} ; e (c) - ΔX	171
5.33	Influência da variação da massa específica das partículas nos perfis (a) - da conversão; (b) - v_x ; (c) - ΔX e (d) - Δv_x	174
5.34	Variação da conversão com a massa específica das partículas	175
5.35	Influência da variação da energia de ativação da primeira reação nos perfis (a) - da conversão; (b) - Q ; (c) - ΔX e (d) - ΔQ	177
5.36	Variação da conversão com o calor específico do xisto	178
5.37	Influência da variação do calor específico do xisto nos perfis (a) - da conversão; (b) - ΔT_x ; e (c) - ΔX	180
5.38	Influência da variação da absorvidade do gás de aquecimento nos perfis (a) - da conversão e (b) - ΔT_{w_r}	183
5.39	Variação da temperatura de parede do reator com a absorvidade do gás de aquecimento	183
5.40	Influência da variação da emissividade do gás de aquecimento nos perfis (a) - da conversão; (b) - ΔT_{w_r} ; e (c) - ΔX	185
5.41	Variação da temperatura de parede do reator com o calor específico do gás de aquecimento	187
5.42	Influência da variação do calor específico do gás de aquecimento nos perfis (a) - da conversão; (b) - T_{w_r} ; (c) - ΔX e (d) - ΔT_{w_r}	188
5.43	Influência da variação do calor específico do gás de arraste nos perfis (a) - de ΔX e (b) - ΔT_{w_r}	190
5.44	Variação da conversão com a calor específico do gás de arraste	191
5.45	Influência da variação de A_2 nos perfis (a) - da conversão; (b) - ΔB ; e (c) - ΔX	193

5.46	Influência da variação do calor de reação nos perfis (a) - da conversão; (b) - T_z ; (c) - ΔX e (d) - ΔT_z	196
------	---	-----

LISTA DE SÍMBOLOS E ABREVIATURAS

- A_1 = fator pré-exponencial da equação da taxa da reação 1 (s^{-1})
- A_2 = fator pré-exponencial da equação da taxa da reação 2 (s^{-1})
- A_C = área anular de escoamento dos gases de combustão
- A_{EC} = área de escoamento do ânulo $= \frac{\pi(D_2^2 - D_1^2)}{4}$
- A_H = área para troca térmica
- A_i = área de troca térmica (nas equações 3.77, 3.78 e 3.79 e figura 3.3)
- A_i, B_i, C_i e D_i = constantes da equação (3.137) para o componente i (base molar), os valores constam na tabela (4.8) [48].
- A_{REF} = área lateral do refratário para troca térmica $= 2\pi rL$
- A_T = área de escoamento do reator $= \frac{\pi D_1^2}{4}$
- A_X = área das partículas de xisto
- a e b = constantes da equação da condutividade do refratário
- a_0 = condição inicial
- B = fração em massa do Betume no xisto
- B_0 = fração em massa inicial do Betume no xisto
- C_D = coeficiente de arraste entre o gás e uma partícula isolada
- C_{H_2O} = fator de correção para a emissividade do vapor de água de acordo com a pressão parcial
- COR_{amb} = índice de correção para considerar outros pequenos efeitos
- C_{p_g} = calor específico do gás de aquecimento
- C_{p_g} = calor específico do gás de arraste a pressão constante

- C_{p_i} = calor específico do componente i (gás)
- $C_{p_{vap}}$ = calor específico do vapor d'água
- $(C_{p_x})_s$ = calor específico do xisto à pressão constante $\left(\frac{\text{cal}}{\text{g}^\circ\text{C}}\right)$
- C_{p_x} = calor específico do xisto
- D_1 = diâmetro interno do reator
- D_2 = diâmetro externo do reator
- D_3 = diâmetro interno do refratário
- D_4 = diâmetro externo do refratário
- dA_X = elemento diferencial de área das partículas existentes no volume cilíndrico de altura dz e diâmetro D_1
- dq_{AMB} = taxa de transferência de calor para o ambiente
- D_{EQC} = diâmetro equivalente para a área de escoamento anular
- d_p = diâmetro médio das partículas
- dq_{COND_R} = taxa de transferência de calor por condução na parede do reator
- dq_{CR} = taxa de transferência de calor entre gás de aquecimento e reator
- dq_{CT} = taxa de transferência de calor entre gás de aquecimento e refratário
- dq_{GX} = taxa de transferência de calor entre gás e xisto
- dq_{REF} = taxa de transferência de calor por condução na parede do refratário
- $dq_{R XR}$ = taxa de transferência de calor por radiação entre a parede do reator e o xisto
- dq_{susp} = taxa de transferência de calor entre a mistura gás-sólido e a parede do duto
- D_R = Diâmetro do reator
- dV_{el} = elemento diferencial de volume
- dz = altura infinitesimal do elemento diferencial de volume
- E_1 = energia de ativação da reação 1 (cal/mol) ;
- E_2 = energia de ativação da reação 2 (cal/mol) ;
- E_{CO_2} = poder emissivo do CO_2 em $\left[\frac{\text{kcal}}{\text{m}^2\text{h}}\right]$

- E_G = poder emissivo de um gás qualquer
- E_{H_2O} = poder emissivo de vapor d'gua em $\left[\frac{kcal}{m^2h}\right]$
- el = número do elemento dentro do passo considerado
- E_n = poder emissivo do corpo negro
- En_i = poder emissivo do corpo negro à mesma temperatura do elemento i (R, C ou T) = σT_i^4
- \underline{F} = vetor com o resíduo das equações (que são colocadas na forma implícita)
- f_{BV} = função da concentração volumétrica
- f_{Cp} = fator de correção para o cálculo do calor específico
- f_{Gf} = fator de atrito entre gás e parede
- $F_{j,i}$ = equação j do modelo discretizado, na forma implícita e aplicada ao ponto de colocação i
- F_{RC} = fator geométrico para a radiação entre o reator (R) e o gás (C)
- F_{RT} = fator geométrico para a radiação entre o reator (R) e o refratário (T)
- F_{RX} = fator de forma para a radiação entre as superfícies do xisto e do reator
- f_{Sf} = fator de atrito entre sólidos e parede
- F_{TC} = fator geométrico para a radiação entre o refratário (T) e o gás (C)
- g = aceleração da gravidade
- G_G = vazão mássica do gás
- G_i = irradiação, ou seja, a energia radiante incidente
- G_S = vazão mássica dos sólidos
- $\underline{H} \approx$ = matriz inversa do Jacobiano
- h_0 = coeficiente de película para o fluxo isento de partículas
- h_{AMB} = coeficiente para a perda de calor para o ambiente
- h_{cc} = coeficiente obtido pela equação (3.51) de Ditus-Boelter
- h_{CR} = coeficiente da transferência de calor entre gás de aquecimento e reator

- h_{CT} = coeficiente de troca de calor por convecção entre a parede do refratário e o gás de aquecimento
- h_{el} = tamanho do elemento
- $H_{fg_{H_2O}}$ = calor latente de vaporização da água
- h_{GX} = coeficiente de transferência de calor por convecção entre gás e xisto
- h_{NAT}^{∞} = perda de calor pela convecção natural
- h_{outros}^{∞} = perda de calor devido a outros fatores
- h_{RAD}^{∞} = perda por radiação para o meio ambiente
- h_{susp} = coeficiente de troca de calor por convecção entre parede interna do reator e a suspensão gás + sólido
- h_{vento}^{∞} = coeficiente de troca de calor para o ambiente devido ao vento
- i = contador para a variável
- i_C = fluxo de calor proveniente do ramo que interliga o nó central (J_0) com a massa de gás quente
- In_0 = quantidade de inertes inicial
- i_R = fluxo de calor proveniente do ramo que interliga o nó central (J_0) com a parede do reator
- i_T = fluxo de calor proveniente do ramo que interliga o nó central (J_0) com a parede do refratário
- J_0 = corresponde ao potencial de transferência no nó central da ligação em estrela
- J_i = radiosidade do elemento i (placa ou o gás)
- K = número da iteração
- k = número de sequência do parâmetro para a variável l
- K_1 = constante da taxa para a primeira reação (s^{-1})
- K_2 = constante da taxa para a segunda reação (s^{-1})
- k_{ar} = condutividade térmica do ar
- k_C = condutividade térmica do gás de aquecimento
- k_G = condutividade do gás de arraste

- $k_{i,z}$ = condutividade do refratário em $\left(\frac{\text{cal}}{\text{cm.s.}^{\circ}\text{C}}\right)$
- k_i = condutividade térmica do componente i
- k_R = condutividade térmica do reator
- L = comprimento do reator
- l = indica a variável a qual se refere o parâmetro $P_{k,l}$
- lmr = comprimento efetivo do feixe de radiação (m) = $D_3 - D_2$
- m = índice k genérico
- \dot{m}_{comb} = vazão mássica do gás de aquecimento
- $\overline{M_{G0}}$ = massa molecular média do gás introduzido
- $\overline{M_{pro}}$ = massa molecular média dos produtos da pirólise
- \dot{m}_g = vazão mássica do gás de arraste
- \dot{m}_{g0} = vazão de gás de arraste na entrada do reator
- M_i = massa molecular do componente i
- \dot{m}_{org} = vazão mássica equivalente da matéria orgânica no xisto
- \dot{m}_{umi} = vazão mássica da umidade contida no xisto
- \dot{m}_x = vazão mássica do xisto
- \dot{m}_{x0} = vazão mássica inicial de xisto
- N = número total de elementos de $Z = 0$ a $Z = 1500$ cm
- n = índice l genérico
- ND e nd = referem-se aos pontos nodais
- \dot{n}_{EV} = vazão molar de vapor produzido na secagem
- NEL = número de elementos por passo
- $N_{GA} = \frac{a_T \rho_g (\rho_s - \rho_g) g}{\mu_G^2} =$ número de Galileo
- \dot{n}_{g0} = vazão molar de gás de arraste na entrada do reator
- NP = número de parâmetros totais a determinar para cada variável
- \dot{n} = número médio de partículas por unidade de volume do gás
- \dot{n}_P = vazão molar de produtos da pirólise

- n_{pi} = número de partículas que atravessam o cilindro por segundo
- NT = número total de parcelas da somatória incluindo todas as variáveis
- Nu = número de Nusselt
- NV = número de variáveis dependentes do modelo = número de equações
- P = fração em massa dos produtos em relação à massa inicial de xisto
- P_0 = fração em massa inicial dos produtos em relação à massa do xisto
- p_0 = pressão na entrada do reator
- Pr_{ar} = número de Prandtl para o ar = 0.7
- p_{CO_2} = pressão parcial do CO_2 = $p \cdot y_{CO_2}$ em atm
- p_{H_2O} = pressão parcial do H_2O = $p \cdot y_{H_2O}$ em atm
- p_i = parâmetros da solução numérica
- Pr = número de Prandtl
- Pr_c = número adimensional de Prandtl para o gás de aquecimento
- Pr_G = número adimensional de Prandtl para o gás de arraste = $\frac{C_{pg} \mu_G}{k_G}$
- p = pressão
- $P(v_z)_i^K$ = parâmetro (K) do polinômio da velocidade do xisto para o caso i
- PV_i^k = parâmetro k para a variável V no caso i; i=0 é o caso de referência
- Q = fração em massa do Querogênio no xisto
- Q_0 = fração em massa inicial do Querogênio no xisto
- q_{GX} = taxa de transferência de calor entre gás e xisto
- q_i = taxa de perda de energia radiante
- q_{RAD_G} = taxa líquida de perda de energia radiante para o gás de aquecimento
- q_{RAD_R} = taxa líquida de perda de energia radiante para a parede do reator
- q_{RAD_T} = taxa líquida de perda de energia radiante para a parede do refratário
- R = constante dos gases = $1.987 \text{ cal}/(\text{mol} \cdot K)$
- r = raio
- Re = número de Reynolds

- Re_{ar} = número de Reynolds para o vento = $\frac{\rho_{ar} v_{\infty} D_1}{\mu_{ar}}$
- Re_c = número adimensional de Reynolds .200 para o gás de combustão = $\frac{\dot{m}_{comb} D_{EG}}{A_{EG} \mu_G}$
- Re_G = número adimensional de Reynolds .200 para o gás = $\frac{\rho_g v_g D_1}{\mu_G}$
- Re_P = número adimensional de Reynolds .200 relativo à partícula = $\frac{\rho_g (v_g - v_x) d_p}{\mu_G}$
- Re_t = número adimensional de Reynolds .200 para a velocidade terminal e segundo a equação 2.13
- $R_R, R_T, R_C, R_{RT}, R_{RC}, R_{TC}, R_{RE}, R_{TE}$ e R_{CE} = resistências à transferência de calor por radiação
- $R(x)$ = representa o residual
- St_G = número de Stanton = $\frac{h_{sup}}{\rho_g C_{pg} v_g}$
- t = tempo de reação (segundos s)
- T_{CR_i} = temperatura crítica do componente i
- T_C = temperatura do gás de aquecimento
- T_{C0} = temperatura inicial dos gases de combustão
- T_g = temperatura do gás de arraste
- T_{g0} = temperatura inicial do gás de arraste
- T_{∞} = temperatura do ar ambiente
- T_{R_i} = temperatura reduzida do componente i
- T_W = temperatura da parede interna do reator
- $\overline{T_W}$ = temperatura média das paredes
- T_{w_i} = temperatura de parede externa do refratário
- T_{w_r} = temperatura da parede externa do reator
- $T_{w_{ri}}$ = temperatura da parede interna do reator
- T_{w_T} = temperatura da parede interna do refratário
- T_x = temperatura do xisto
- T_{x0} = temperatura do xisto na entrada do reator
- U_{g0} = velocidade axial média do gás no centro do duto

- U_{p0} = velocidade axial média da partícula no centro do duto
- U_s = velocidade da queda livre da partícula no centro do duto = $(U_{g0} - U_{p0})$
- U_t = velocidade terminal da partícula
- u_∞ = velocidade do vento em (km/h)
- V = variável dependente qualquer $V = (\varepsilon, v_g, T_g, \dots, T_w, T_{wi})$
- V_C = velocidade de escoamento do gás de combustão
- V_{CR_i} = volume crítico do componente i ($cm^3/gmol$)
- v_g = velocidade de escoamento do gás
- v_{g0} = velocidade inicial do gás de arraste
- v_p = velocidade das partículas sólidas
- v_t = velocidade terminal da partícula
- $\overline{v_{xi}}$ = velocidade média do xisto para o caso i
- v_x = velocidade das partículas de xisto
- v_{x0} = velocidade inicial das partículas
- W = razão de alimentação = $\frac{\text{vazão mássica de sólidos}}{\text{vazão mássica de gás}}$
- $W(x)$ = função peso, definida como ortogonal ao resíduo
- W'_∞ = velocidade do vento em (m/s)
- X = conversão em produtos
- X = representa o número da linha do Jacobiano
- \underline{x} = vetor das incógnitas
- x = variável independente, corresponde à variável axial (z) adimensionalizada
- Y = representa o número da coluna do Jacobiano
- Y = teor de orgânicos
- Y_0 = teor inicial de material orgânico (Querogênio e Betume) no xisto
- y_i^{gas} = fração molar do componente i para o gás na entrada do reator
- y_i^{pro} = fração molar do componente i para o gás produzido na pirólise
- Z = cota ou altura desde a base do reator

- α = absorptividade
- α_C = absorptividade do gás de aquecimento
- α_i = absorptividade do elemento i (placa ou o gás)
- α_R = absorptividade da parede externa do reator
- α_{Ri} = absorptividade da parede interna do reator
- α_T = absorptividade da parede interna do refratário
- α_X = absorptividade do xisto
- β = fator de correção para a emissividade do vapor
- β_A = coeficiente de atrito entre as fases
- β_v = concentração volumétrica (volume de sólidos / volume de fluido)
- Δ = determinante do Jacobiano
- $\Delta\epsilon_C$ = correção para a emissividade da mistura de vapor de água e gás carbônico
- $\Delta\epsilon_G$ = correção para o efeito de mistura
- ΔH_r = calor de reação
- $\overline{\Delta V_i}$ = diferença média da variável V qualquer no caso i (i = 20% abaixo, por exemplo)
- ϵ_C = emissividade do gás de combustão
- ϵ_{CO_2} = emissividade do dióxido de carbono
- $\epsilon_{CO_2}(T_W)$ = é a função da equação (3.153), somente que o valor da temperatura utilizado deixa de ser a do gás (T_C) e passa a ser a da parede ($\overline{T_W}$).
- ϵ_G = emissividade do gás
- ϵ_{H_2O} = emissividade do vapor de água
- ϵ_i = emissividade do elemento i (placa ou o gás)
- ϵ_{is} = emissividade da parede externa do isolamento
- ϵ_R = emissividade da parede externa do reator
- ϵ_{Ri} = emissividade da parede interna do reator
- ϵ_T = emissividade da parede interna do refratário

- ϵ_X = emissividade das partículas
- ϵ = porosidade
- ϵ_0 = porosidade Inicial
- μ_{ar} = viscosidade do ar
- μ_C = viscosidade do gás de combustão
- μ_G = viscosidade do gás de arraste
- μ_i^0 = viscosidade do componente i puro
- μ_i = viscosidade do componente i (gás)
- μ_{CW} = viscosidade do gás de combustão próximo à parede
- Φ = umidade no xisto
- Φ_0 = umidade inicial do xisto
- ϱ = refletividade
- ρ_{ar} = massa específica do ar
- ρ_c = massa específica do gás de combustão
- ρ_g = massa específica do gás
- ρ_s = massa específica dos sólidos
- ρ_x = massa específica do xisto
- ρ_{x_0} = massa específica do xisto na entrada do reator em $\frac{g}{cm^3}$
- $(\rho_{x_0})_{seco}$ = massa específica do xisto seco na entrada do reator em $\frac{g}{cm^3}$
- σ = constante de Stephan-Boltzman
- σ = tensão normal dos sólidos
- τ = transmissividade
- τ_{WG} = tensor cisalhante entre parede e gás
- τ_{WS} = tensor cisalhante entre parede e partícula

Resumo

Gontarski, Carlos Alberto Ubirajara. **Simulação e Sensitividade Paramétrica para um Reator de Pirólise de Finos de Xisto em Leito de Arraste.**

(Sob a orientação do prof. Dr. Milton Mori.)

O trabalho consiste na utilização de um modelo matemático baseado em equações gerais de balanço e cinéticas, simplificadas para o caso unidimensional e em regime permanente de um reator para a pirólise de finos de xisto. O processo ocorre com o transporte pneumático das partículas de xisto, no sentido ascendente, e com o aquecimento simultâneo através dos gases quentes, provenientes de um queimador e que escoam no espaço anular entre a parede do reator e o material isolante.

O modelo matemático proposto envolve as dez equações diferenciais que representam os balanços de massa, energia e quantidade de movimento nos meios fluidos, e a cinética da reação. Com mais duas equações referentes aos balanços de energia nas paredes do reator e do isolamento determinam-se as temperaturas de parede.

Na simulação do reator em um microcomputador, as equações são resolvidas com auxílio de métodos numéricos, principalmente o da colocação ortogonal em elementos finitos e o algoritmo de Broyden. A programação é apresentada em linguagem FORTRAN [27].

Os resultados obtidos na simulação são comparados com os dados experimentais coletados na planta piloto localizada nas instalações da Petrobrás-SIX, em São Mateus do Sul, Paraná.

A análise da sensibilidade dos principais parâmetros do modelo permite tirar conclusões a respeito da precisão necessária para a leitura de dados da planta e para a estimativa de algumas propriedades utilizadas no modelo matemático. Além disso, por este procedimento também podem ser identificadas as principais variáveis que afetam a simulação.

Abstract

Gontarski, Carlos Alberto Ubirajara. Simulation and Parametric Analysis of fine oil shale pyrolysis in a moving bed reactor.

(Under the direction of Milton Mori).

This work presents a mathematical model based on kinetics and general balance equations, for the one dimensional and steady state reactor to the pyrolysis of oil shale fine-grained. The process occurs with the vertical pneumatic conveying of the particles. The system is heated by a hot gas, originated in the burner, that flows through the annular space between the reactor wall and insulating material.

The proposed model has ten differential equations representing mass, energy and momentum balances in moving phases, and reaction kinetics. In addition, two equations obtained by wall energy balances are necessary to determine the value of wall temperatures.

The orthogonal collocation on finite elements method is applied to solve the stiff system of ordinary differential equations. The numerical results show a very good agreement with the experimental data obtained on the Petrobrás-Six pilot plant at São Mateus do Sul, Paraná.

The parametric sensitivity analysis allows important conclusions about the precision of measurement instruments and the validity of the estimation of some properties used in the mathematical model. Furthermore, by taking this procedure, the main variables which affect the simulation are also identified.

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

Neste trabalho, simula-se um reator para pirolisar os finos do xisto, fração das faixas granulométricas que é rejeitada na carga do reator do processo industrial estabelecido.

Definem-se como objetivos deste trabalho de pesquisa:

I - criar um modelo matemático mais rigoroso que o existente; incluindo fenômenos anteriormente desconsiderados e, principalmente utilizando um tratamento mais teórico para a fluidodinâmica;

II - simular o comportamento de uma instalação em escala piloto, reproduzindo resultados experimentais com o maior grau de aproximação possível;

III - testar o comportamento dos métodos numéricos frente a um problema envolvendo um grande número de variáveis, e construir um programa que possa ter uma aplicação genérica e que seja facilmente modificado para outras aplicações;

IV - através de um estudo de sensibilidade paramétrica, identificar as principais variáveis propiciando estudos futuros para o aprimoramento da modelagem, assim como para a otimização do processo;

V - fornecer subsídios para a análise térmica do processo industrial.

O assunto despertou interesse porque há o envolvimento de um grande número de variáveis em interação, porém o sistema pode ser simplificado para o caso unidimensional. Considera-se como um desafio a aplicação de métodos numéricos para um problema desta dimensão. O fato dos dados experimentais já estarem disponíveis e ainda a semelhança do assunto em pauta com outros processos de interesse industrial, como a gaseificação e combustão do carvão e o craqueamento catalítico, também contribuíram para a seleção do assunto.

O processo escolhido foi denominado de PLASOL, por ser uma abreviatura de pirólise em leito de arraste de sólidos. O processo principal utilizado em São

Mateus do Sul foi denominado de PETROSIX, e o reator é de leito móvel descendente, em contracorrente com o gás. A presença de partículas finas neste sistema provoca problemas de formação de caminhos preferenciais, aumento da perda de carga no leito e excesso de arraste no topo do reator. Assim, torna-se necessário rejeitar este material. Para reaproveitar estas frações, estão sendo propostos alguns processos alternativos, sendo o PLASOL um deles. Este estudo pretende fornecer informações que possam ser relevantes na caracterização da forma mais adequada e econômica de tratar os rejeitos.

O reator do Plasol caracteriza-se principalmente por processar cargas com granulometria inferior a 1/4 de polegada; e ainda pela sua elevada taxa de aquecimento que é da ordem de 150 °C por segundo. A planta piloto, da qual o reator faz parte, está projetada para operar com 500 kg por hora de xisto. O reator consiste em dois tubos concêntricos com 15 m de altura. Na base do tubo interno é injetada a mistura de xisto e gás e no espaço anular escoam os gases de aquecimento.

Na formulação do problema, procura-se envolver na forma de equações conservativas e fenomenológicas o maior número possível de fenômenos. Contudo, devido à impossibilidade de avaliar alguns efeitos pela inexistência dos dados necessários, ou pela complexidade que seria inserida no modelo, é necessário admitir certas simplificações. Sabendo disso, é possível chegar a um sistema de equações diferenciais ordinárias, que deve ser resolvido pela aplicação de um método numérico adequado. Neste trabalho, opta-se pelo método da colocação ortogonal em elementos finitos. Nesta fase, os resultados puderam ser confrontados com dados reais obtidos em uma planta piloto.

A fase posterior seria o estudo criterioso da sensibilidade paramétrica. Desta forma, consegue-se, objetivamente, identificar possíveis pontos falhos da modelagem como por exemplo estimativas grosseiras demais. Também é importante saber quais são as variáveis operacionais de maior importância, o que auxilia a realização da etapa seguinte, que seria a otimização da planta. De qualquer maneira, ressalta-se que a possibilidade de prever a reação da planta piloto, frente a uma modificação qualquer, é de grande utilidade e economia.

O programa gerado, em linguagem FORTRAN, pode ser executado em qualquer computador ou microcomputador, desde que se verifique a compatibilidade da linguagem. Várias configurações, desde um microcomputador PC com processador

aritmético até o computador VAX da Universidade foram usados nas simulações. O equipamento mais adequado, dentre os disponíveis, para a análise da sensibilidade foi um microcomputador AT com uma placa aceleradora de 32 bits. A programação desenvolvida é bastante versátil, permitindo adaptações para outros modelos.

O capítulo 2 apresenta sucintamente a revisão bibliográfica de todos os assuntos tratados neste trabalho, principalmente aqueles relacionados com a modelagem matemática e os métodos utilizados para sua solução.

No capítulo 3 apresenta-se o modelo matemático, com as hipótese simplificadoras envolvidas, as equações diferenciais que o constituem e as correlações para a predição das propriedades físicas e de transporte necessárias para a resolução do problema.

Faz parte do capítulo 4 a discussão sobre os métodos numéricos aplicados e outros procedimentos utilizados na solução do problema proposto, tais como a organização dos dados de entrada e saída do programa.

Por sua vez, o capítulo 5 é dedicado à discussão dos resultados obtidos nas simulações e também à análise da influência das principais variáveis que afetam o comportamento do reator.

No capítulo 6 aparecem as conclusões finais do trabalho e também algumas sugestões para trabalhos futuros a respeito do mesmo assunto.

Capítulo 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Introdução

Uma rápida análise inicial de relatórios a respeito de trabalhos práticos no assunto [34],[35] e [36] revela a necessidade de uma ampla pesquisa bibliográfica. Assim, dentre os vários artigos, capítulos e informações coletadas procura-se fazer uma compilação para dar uma idéia da importância do assunto principal e de suas diversas abordagens. Devido a variedade dos assuntos preferiu-se a separação por tópicos.

2.2 Pirólise do Xisto

O xisto é uma rocha conhecida pela sua característica de exalar uma substância líquida e combustível quando aquecida devidamente. Na verdade, a presença de materiais de origem orgânica com altos pesos moleculares explica a ocorrência deste fenômeno. Por conveniência, as substâncias orgânicas no xisto com um elevado peso molecular são denominadas de Querogênio. O Betume, por sua vez, é constituído pelas substâncias de peso molecular também elevado, mas com um valor inferior ao do Querogênio.

A obtenção de dados a respeito da decomposição do xisto, através da ação do calor em regime estabelecido, proporciona o desenvolvimento de um mecanismo para explicar como a matéria orgânica contida no xisto transforma-se em hidrocarbonetos fluidos.

ALLRED [1] mostra através de estudos experimentais que simplificadaamente a cinética da pirólise do xisto pode ser representada por duas reações consecutivas irreversíveis. Na primeira o querogênio se decompõe em betume, que pela segunda reação sofre decomposição na forma de gás, óleos leves e resíduo de carbono. Ou seja,

Querogênio \longrightarrow Betume \longrightarrow Produtos

ou, $Q \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} P$.

As equações para a cinética sugeridas por Allred podem ser expressas como

$$\frac{dQ}{dt} = -k_1 Q \quad (2.1)$$

$$\frac{dB}{dt} = k_1 Q - k_2 B \quad (2.2)$$

$$\frac{dP}{dt} = k_2 B \quad (2.3)$$

onde

Q = fração de querogênio nos orgânicos

B = fração de betume nos orgânicos

P = fração de produto formado

k_1 = constante da taxa da primeira reação (s^{-1})

k_2 = constante da taxa da segunda reação (s^{-1})

t = tempo de reação (s).

As constantes de velocidade das reações podem ser relacionadas com a temperatura do xisto através da lei de Arrhenius [28],

$$k_1 = A_1 e^{\left(\frac{-E_1}{RT_x}\right)} \quad (2.4)$$

$$k_2 = A_2 e^{\left(\frac{-E_2}{RT_x}\right)} \quad (2.5)$$

onde

E_1 = energia de ativação da reação 1 (cal/mol)

E_2 = energia de ativação da reação 2 (cal/mol)

$R = 1.987 \frac{cal}{mol \cdot K}$ constante dos gases

T_x = temperatura do xisto (K)

A_1 e A_2 = fatores pré-exponenciais (s^{-1}).

Experimentalmente, MARTIGNONI da Petrobrás-Six [46] determinou os fatores pré-exponenciais e as energias de ativação de cada etapa da reação de pirólise, cujos valores são:

$A_1 = 996.04 s^{-1}$; $E_1 = 9500 cal/mol$;

$A_2 = 3.64 \cdot 10^{+7} s^{-1}$; e $E_2 = 26500 cal/mol$.

Outro dado experimental de relevante importância obtido por MARTIGNONI [46] foi a entalpia da reação endotérmica (ΔH_r) de acordo com a

temperatura de pirólise. Para,

$$T_x \leq 450^{\circ}\text{C} \rightarrow \Delta H_r = 127 \text{ cal/g}^1$$

$$T_x > 450^{\circ}\text{C} \rightarrow \Delta H_r = 180 \text{ cal/g}.$$

Posteriormente, CAMPBELL *et alii* [10] estudaram os efeitos de razões de aquecimento entre 2 e 180 °C/h sobre a pirólise. Os resultados obtidos permitiram-lhes concluir a respeito da produção de óleo, do grau de degradação do óleo (classificação do óleo) e o perfil térmico no material. As principais conclusões deste estudo são: a) o tamanho da partícula tem pouca influência no grau de degradação do óleo durante a retortagem; b) a razão na qual o xisto é aquecido tem efeito pronunciado no rendimento, por exemplo, com 180 °C/h se obtém aproximadamente 99% de rendimento, enquanto que com 2 °C/h esse rendimento cai para 83%.

2.3 Fluidodinâmica do Transporte Pneumático

A influência de diversos fatores sobre as condições de velocidade, porosidade e pressão é reportada extensamente em vários artigos. Segundo CAPES *et alii* [11,42], os fenômenos pouco estudados que complicam a compreensão do escoamento sólido-gás são: a aglomeração de partículas; as turbulências no fluido; a recirculação de partículas; as quantidades não uniformes de fluido e partícula; e a distribuição de velocidades.

BOOTHROYD e HAQUE [8] afirmam que devido aos atritos, a presença de sólidos aumenta a perda de carga em níveis percentuais maiores do que o aumento no coeficiente de troca térmica com a parede. No artigo, a ilustração gráfica, relativa ao assunto, mostra os valores da relação entre os fatores de fricção com e sem as partículas ($\frac{f_s}{f_v}$) contra os valores da razão de alimentação.

A preocupação maior no estudo de KONNO e SAITO [33] é a de estabelecer relações para representar o transporte pneumático de sólidos através de tubos verticais e horizontais. Em seus trabalhos experimentais, alertam para a sensibilidade frente a rugosidade do tubo, procurando trabalhar com um material mais liso possível. O material escolhido para os tubos foi o vidro, o que ainda lhes permite observar dois tipos predominantes de escoamento das partículas: o paralelo ao eixo do tubo; e um outro no qual a direção das partículas é aleatória, onde ocorrem colisões violentas

¹em calorias por grama de material orgânico transformado

contra as paredes do ducto. Neste último caso, as correlações para a queda de pressão em função da razão de alimentação não seriam lineares, e investiga-se apenas o escoamento paralelo. As causas do escoamento aleatório não são totalmente esclarecidas e, segundo o autor, a queda de pressão é bastante diversa nestes casos. As medidas de pressão foram feitas na região de escoamento totalmente estabelecido onde não há efeitos de aceleração no gás ou nas partículas. Assim, tem-se

$$\Delta P_{TOTAL} = \Delta P_{\text{atrito do fluido}} + \Delta P_{\text{atrito dos sólidos}} + \Delta P_{\text{coluna da mistura}} \quad (2.6)$$

Para a queda de pressão (ΔP) devido ao atrito dos sólidos e do fluido, pode ser utilizada a equação de Fanning. Desta forma, e através de dados experimentais, chegou-se à expressão para o coeficiente de atrito (f_s) para os sólidos

$$f_s = \frac{0.0285}{v_p / \sqrt{g D_1}} \quad (2.7)$$

onde

v_p = velocidade da partícula (cm/s)

g = aceleração da gravidade (cm/s²)

D_1 = diâmetro do tubo (cm).

A respeito da velocidade da partícula, KONNO e SAITO observam [33], que as variações ao longo da dimensão radial são desprezíveis, podendo considerar-se $\left(\frac{dv_p}{dr}\right) = 0$. Para encontrar o valor da velocidade da partícula, admite-se que

$$v_p = v_g - v_t \quad (2.8)$$

onde

v_g = velocidade do gás

v_t = velocidade da queda livre da partícula.

Nas condições experimentais utilizadas pelo autor, o perfil de velocidade do gás pouco é alterado pela presença dos sólidos, mesmo para diversos valores do diâmetro, da velocidade média e da densidade da partícula.

Ao observar a distribuição das partículas na direção radial no transporte pneumático vertical de partículas de vidro e cobre, KONNO e SAITO [33] constataram que a densidade de partículas é maior na parede do que no centro do duto. Porém, ao utilizar partículas de poliestireno, ocorre a distribuição inversa.

A mesma equação (2.8) é utilizada por DUNG [17] em seu modelo para a combustão de xisto em leito de arraste. Neste caso o autor usa uma correlação para a velocidade terminal, assim

$$v_t = \left[\frac{4gd_P(\rho_x - \rho_g)}{3\rho_g C_D} \right] , \quad (2.9)$$

onde

d_P = diâmetro médio das partículas [22]

ρ_x = massa específica do xisto

ρ_g = massa específica do gás

C_D = coeficiente de arraste para uma partícula isolada.

A conclusão do trabalho de REDDY [47] cita que em escoamentos diluídos, o coeficiente de arraste experimental é maior que o calculado para uma partícula isolada, considerando o mesmo número de Reynolds. Segundo a publicação, isto é devido a forças de atrito adicionais criadas pela intensidade das turbulências entre gás e partícula. Uma correlação para a velocidade terminal é proposta em função da razão de alimentação [47],

$$\frac{U_s}{U_t} = 1 + 1.59W^{2/3} , \quad (2.10)$$

onde

U_s = velocidade da queda livre da partícula no centro do duto = $(U_{g0} - U_{p0})$

U_{g0} = velocidade axial média do gás no centro do duto

U_{p0} = velocidade axial média da partícula no centro do duto

U_t = velocidade terminal da partícula

W = razão de alimentação = $\frac{\text{vazão mássica de sólidos}}{\text{vazão mássica de gás}}$

Para cálculo do coeficiente de arraste (C_D), DUNG [17] utiliza uma correlação modificada de SCHILLER e NEUMANN, ou seja,

$$C_D = 3.8 , \text{ para } Re_t > 1000 \quad (2.11)$$

$$C_D = (0.8 + 2.6 \ln(Re_t)) \left(\frac{24}{Re_t} + \frac{3.6}{Re_t^{0.313}} \right) , \text{ para } 2 < Re_t \leq 1000 , \quad (2.12)$$

onde

$$Re_t = \frac{\rho_g d_P v_t}{\mu_G} . \quad (2.13)$$

BUDDE *et alii* [9], para o cálculo do coeficiente de arraste, desconsideram os efeitos de uma população de sólidos, e utilizam as equações para uma única partícula,

$$C_D = \frac{24}{Re_P} \quad , \text{ para } Re_P \leq 0.2 \quad (2.14)$$

$$C_D = \frac{18.5}{\sqrt{Re_P}} \quad , \text{ para } 0.2 < Re_P \leq 500 \quad (2.15)$$

$$C_D = 0.44 \quad , \text{ para } 500 < Re_P \leq 150000 \quad , \quad (2.16)$$

onde

$$Re_P = \frac{\rho_g d_P (v_g - v_p)}{\mu_G}$$

v_g = velocidade de escoamento do gás

v_p = velocidade das partículas sólidas

d_P = diâmetro médio das partículas

ρ_g = massa específica do gás

μ_G = viscosidade do gás.

Com o objetivo de modelar um reator em leito de arraste FAN *et alii* [19] utilizam, para representar a fluidodinâmica, basicamente as equações de YANG [63]. Assim a velocidade linear das partículas [65] é obtida com

$$v_p = v_g - v_t \sqrt{\left(1 + \frac{f_p v_p^2}{2D_1}\right)} \quad (2.17)$$

O fator de atrito para os sólidos (f_p) pode ser calculado pelas expressões empíricas seguintes [19]:

$$f_p = 0.0126 \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon^3} \left[(1 - \varepsilon) \frac{Re_t}{Re_p} \right]^{0.979} \quad , \text{ quando } \frac{v_g}{v_t} > 1.5; \text{ e} \quad (2.18)$$

$$f_p = 0.041 \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon^3} \left[(1 - \varepsilon) \frac{Re_t}{Re_p} \right]^{1.021} \quad , \text{ quando } \frac{v_g}{v_t} \leq 1.5 \quad (2.19)$$

A velocidade terminal (v_t) das partículas sólidas é estimada por [19]

$$v_t = 0.153 \frac{d_P^{1.14} g^{0.71} (\rho_S - \rho_g)^{0.71}}{\mu_G^{0.43} \rho_g^{0.29}} \quad , \text{ para } 2 < Re_p < 1000 \quad (2.20)$$

$$v_t = \frac{d_P^2 g (\rho_S - \rho_g)}{18 \mu_G} \quad , \text{ para } Re_p \leq 1000 \quad , \quad (2.21)$$

onde

Re_P = definido pela equação 2.3

v_t = velocidade terminal da partícula

d_p = diâmetro médio das partículas

ρ_s = massa específica dos sólidos

Re_t = segundo a equação 2.13

ε = porosidade

f_p = fator de atrito.

As forças atuantes em cada uma das partículas suspensas devem estar em equilíbrio dinâmico; ou seja, a soma da força de arraste (F_K) com a força de empuxo (F_S) deve ser igual à força gravitacional (F_G) atuando na direção oposta,

$$F_K + F_S = F_G . \quad (2.22)$$

Apesar do fato da força de arraste que atua sobre uma partícula esférica isolada num fluido estagnado ter sido amplamente estudado, o tratamento dessa força atuando sobre um sistema multipartícula está muito longe de ser satisfatório. Nestes sistemas, esta força é afetada pela porosidade do sistema. Para examinar tal relação, a razão entre a força atuante em cada uma das partículas de um sistema multipartícula (F_K), e a atuante sobre uma partícula isolada em um meio infinito de um fluido estacionado (F_{KS}) é chamada de função do efeito da população de partículas. Essa função é definida, então, como

$$\frac{F_K}{F_{KS}} = f(\varepsilon) . \quad (2.23)$$

Desenvolvendo o termo acima conforme WEN e YU [60] chega-se à relação

$$f(\varepsilon) = \frac{N_{GA}}{18Re_p + 2.7Re_p^{1.687}} , \quad (2.24)$$

onde

$$N_{GA} = \frac{d_p^3 \rho_g (\rho_s - \rho_g) g}{\mu_{tg}^2} = \text{número de Galileo}$$

g = aceleração da gravidade

ε = porosidade.

Baseando-se nos dados experimentais, uma correlação para $f(\varepsilon)$ pode ser escrita como

$$f(\varepsilon) = \varepsilon^{-4.65} . \quad (2.25)$$

A equação para a perda de carga sugerida no mesmo trabalho [60] para leitos de fluidização incipiente é

$$\frac{\Delta P}{L} = (1 - \varepsilon) (\rho_s - \rho_g) g , \quad (2.26)$$

onde

L = comprimento do reator

ρ_s = massa específica dos sólidos

ρ_g = massa específica do gás.

Através de um balanço de quantidade de movimento no regime permanente para o elemento de volume fixo no espaço de um sistema com um gás arrastando um sólido, GIDASPOW [24] propõe um modelo unidimensional para a fluidodinâmica, analisando três situações especiais [4] para o balanço nos sólidos, tem-se:

Modelo A - A queda de pressão atua sobre ambas as fases;

Modelo B - A queda de pressão só existe para a fase gasosa;

Modelo C - Modelo da velocidade relativa – uma equação constitutiva para o sistema [3].

Embasado em trabalhos experimentais, GIDASPOW verifica um melhor desempenho do modelo C. Assim o modelo proposto por GIDASPOW é composto das seguintes equações: A equação da continuidade para o gás:

$$\frac{d}{dz} [\varepsilon \rho_g v_g] = 0 . \quad (2.27)$$

A equação da continuidade para os sólidos:

$$\frac{d}{dz} [(1 - \varepsilon) \rho_s v_p] = 0 . \quad (2.28)$$

A equação da quantidade de movimento para a mistura:

$$(1 - \varepsilon) \rho_s v_p \frac{dv_p}{dz} + \varepsilon \rho_g v_g \frac{dv_g}{dz} = -\frac{dp}{dz} - \frac{d\sigma}{dz} - g(1 - \varepsilon) \rho_s - g\varepsilon \rho_g - \frac{4(\tau_{WG} + \tau_{WS})}{D_1} . \quad (2.29)$$

A equação da quantidade de movimento para os sólidos:

Modelo A:

$$(1 - \varepsilon) \rho_s v_p \frac{dv_p}{dz} = - (1 - \varepsilon) \frac{dp}{dz} - \frac{d\sigma}{dz} - g(1 - \varepsilon) \rho_s - \frac{4(\tau_{WS})}{D_1} - \beta_A(v_p - v_g) . \quad (2.30)$$

Modelo B:

$$(1 - \varepsilon) \rho_s v_p \frac{dv_p}{dz} = - \frac{d\sigma}{dz} - g(1 - \varepsilon) \rho_s - \frac{4(\tau_{WS})}{D_1} - \beta_B(v_p - v_g) . \quad (2.31)$$

Modelo C:

$$(1 - \varepsilon) \rho_s (v_p - v_g) \frac{d(v_p - v_g)}{dz} = - \frac{d\sigma}{dz} - g(1 - \varepsilon) \rho_s - \frac{4(\tau_{WS})}{D_1} - \beta_C(v_p - v_g) , \quad (2.32)$$

onde nas equações acima

p = pressão no sistema

D_1 = diâmetro do tubo

v_g = velocidade de escoamento do gás

v_p = velocidade das partículas

σ = tensão normal dos sólidos

τ_{WG} = tensor cisalhante entre parede e gás

τ_{WS} = tensor cisalhante entre parede e partícula

β_A , β_B e β_C = coeficiente de arraste (atrito entre fases) utilizado nos modelos A, B ou C respectivamente.

A relação entre os coeficientes é deduzida [24] como

$$\beta_C = \beta_B = \beta_A \frac{\rho_s}{\varepsilon (\rho_s - \rho_g)} . \quad (2.33)$$

A equação para o balanço na fase gasosa, desde que a área de escoamento seja constante, é

$$\frac{d(\rho_g \varepsilon v_g^2)}{dz} = -\varepsilon \frac{dp}{dz} - \rho_g \varepsilon - \beta_A (v_g - v_p) - 4 \frac{\tau_{WG}}{D_1} . \quad (2.34)$$

Com o fim de obter uma relação para β_A , desconsidera-se os efeitos de aceleração, de atrito com as paredes e gravitacionais, e a equação acima (2.34) pode ser escrita como

$$-\varepsilon \frac{dp}{dz} - \beta_A (v_g - v_p) = 0 . \quad (2.35)$$

Assim, utilizando-se do trabalho de WEN e YU [60] e substituindo a expressão para a perda de carga, o coeficiente de atrito entre as fases fica

$$\beta_A = \frac{3}{4} C_D \frac{\rho_g |v_g - v_p| \varepsilon (1 - \varepsilon)}{d_p} f(\varepsilon) , \quad (2.36)$$

onde

d_p = diâmetro das partículas

C_D = coeficiente de arraste para uma partícula isolada. GIDASPOW escolheu a correlação de ROWE [49] dependente do número de Reynolds (Re_p) para este coeficiente

$$C_D = 0.44 , \text{ para } Re_p \geq 1000 \quad (2.37)$$

$$C_D = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) , \text{ para } Re_p < 1000 . \quad (2.38)$$

Por fim, considerando o número de Reynolds nestas equações como

$$Re_P = \frac{\varepsilon \rho_g (v_g - v_p) d_P}{\mu_G}, \quad (2.39)$$

daí a função que expressa o efeito da população de partículas, ou seja, a correção da lei de Stokes para a queda livre de uma partícula isolada, admite a forma

$$f(\varepsilon) = \varepsilon^{-2.65}. \quad (2.40)$$

A estimativa, nestes modelos, dos efeitos de atrito com a parede (tensores cisalhantes) é feita via definição do fator de atrito de Fanning.

Tensor Cisalhante entre a parede e o gás:

$$\tau_{WG} = \frac{\varepsilon \rho_g v_g^2 f_{WG}}{2}, \quad (2.41)$$

onde

τ_{WG} = tensor cisalhante entre a parede do reator e o agente de arraste

ε = porosidade do sistema

ρ_g = massa específica do gás

v_g = velocidade ascendente do gás

f_{WG} = fator de atrito entre a parede e o gás.

Tensor Cisalhante entre a parede e o xisto:

$$\tau_{WX} = \frac{(1 - \varepsilon) \rho_x v_x^2 f_{WX}}{2}, \quad (2.42)$$

onde

τ_{WX} = tensor cisalhante entre a parede do reator e as partículas sólidas (xisto)

ρ_x = massa específica do xisto

v_x = velocidade ascendente do xisto

f_{WX} = fator de atrito entre a parede e as partículas sólidas.

Para estimar os fatores de atrito, GIDASPOW utiliza as equações de Hagen-Poiseuille (equação 3.34), para o regime laminar, e de Blasius (equação 3.35) para o turbulento.

A preocupação central do trabalho de STEMERDING [54] é com a queda de pressão em "risers" do craqueamento catalítico. O autor observa que a queda de pressão é maior na região inicial e é proporcional à vazão de sólidos quando a vazão de gás é constante. Mantendo a vazão de sólidos constante existe um ponto de mínimo

na queda de pressão ao variar a vazão de gás. O tratamento da fluidodinâmica neste estudo envolve o balanço de quantidade de movimento no sistema de escoamento de duas fases dispersas, similar ao tratamento dado por GIDASPOW, somente acrescentando os termos do gradiente da transferência de momentum turbulenta na direção axial e o das flutuações turbulentas da velocidade relativa dos sólidos.

2.4 Análise do Processo Térmico

Com a finalidade de poder avaliar os diversos mecanismos de troca de calor que ocorrem no sistema a modelar, é importante discorrer sobre experiências e conclusões de pesquisas correlatas. Dessa forma, separa-se o assunto de acordo com a natureza do mecanismo.

Segundo BUDDE *et alii* [9] o estudo do processo térmico nos sistemas particulados, deve envolver as trocas de calor por:

- convecção entre gás e partícula;
- convecção entre a parede do recipiente e a suspensão escoando;
- radiação entre a parede do recipiente e a partícula;
- condução dentro das partículas;
- condução pelas paredes do reator.

A questão da condução intra-partícula, em alguns casos não necessita ser abordada, já que é plausível considerar que a condutividade térmica é suficientemente grande e o diâmetro da partícula pequeno para serem desprezados os gradientes radiais de temperatura na partícula (número de Biot pequeno) [5].

2.4.1 Interação Térmica Entre Gás e Partícula

A quantidade de calor transferida (q_{GX}) por convecção, do gás para os sólidos contidos num volume diferencial do reator de altura dz , é determinada também pela área de troca térmica das partículas (A_X). Além disso é função das condições de transferência, que são representadas pelo coeficiente de película (h_{GX}), que é proporcional à velocidade relativa entre as duas fases (gás e partícula). Por fim, a força propulsora da troca de calor é o gradiente de temperatura entre o gás (T_g) e a superfície da partícula (T_z). Assim

$$q_{GX} = h_{GX} A_X (T_g - T_z) , \quad (2.43)$$

onde

q_{GX} = taxa de transferência de calor entre gás e xisto

h_{GX} = coeficiente de transferência de calor por convecção entre o gás e o xisto

T_x = temperatura do xisto

A_X = área das partículas.

O coeficiente de transferência de calor (h_{GX}) é usualmente encontrado via correlações empíricas que utilizam relações entre números adimensionais, assim

$$Nu = \frac{h_{GX} d_P}{k} = f(Re, Pr, \dots) \quad , \quad (2.44)$$

onde

Nu = número de Nusselt

Re = número de Reynolds

Pr = número de Prandtl

d_P = diâmetro da partícula

k = condutividade térmica do gás.

No tratamento seguido por BUDDE [9], considera-se que o fato da porosidade ser próxima a 1 (sistema bastante diluído) permite considerar a troca de calor entre gás e partícula individualmente. Para este caso, encontra-se na literatura grande número de correlações cobrindo as mais diversas faixas para o número de Reynolds. A tabela 2.1 contém algumas dessas relações para partículas esféricas em um meio infinito [9].

Tabela 2.1: Correlações para o coeficiente de transferência de calor para partículas num meio infinito

Equações ² :	validade	autores	eq. n ^o :
$Nu = 2 + 0.4 Re^{0.5}$	$Re = 1 \dots 200$	<i>Chukhanov</i>	2.45
$Nu = 0.55 Re^{0.5}$	$Re = 200 \dots 7000$	<i>Chukhanov</i>	2.46
$Nu = 0.62 Re^{0.5}$	$Re = 130 \dots 3000$	<i>Vorobev et alii</i>	2.47
$Nu = 0.54 Re^{0.5}$	$Re = 200 \dots 3000$	<i>Vorobev et alii</i>	2.48
$Nu = 2 + 0.16 Re^{0.57}$	$Re = 0 \dots 2000$	<i>Vorobev et alii</i>	2.49
$Nu = 2 + 0.6 Re^{0.5} Pr^{0.33}$	$Re = 0 \dots 200$	<i>Brotz</i>	2.50
$Nu = 2 + 0.552 Re^{0.5} Pr^{0.33}$		<i>Ruhle</i>	2.51
$Nu = 0.33 Re^{0.6}$	$Re = 200 \dots 150000$	<i>Ruhle</i>	2.52
$Nu = 0.118 Re^{0.75} Pr^{0.33}$	$Re = 600 \dots 430$	<i>Chevalier et alii</i>	2.53
$Nu = 0.37 Re^{0.6} Pr^{0.33}$	$Re = 20 \dots 150000,$ $d > 3 \text{ mm}$		2.54
$Nu = 2$	Esfera, meio estacionário	<i>Rudenberg</i>	2.55
$Nu = 2 + 1.3 Pr^{0.15}$ $+ 0.56 Pr^{0.31} Re^{0.5}$	$Nu = 8 \dots 40,$ $Pr = 0.7 \dots 380$	<i>Kramers</i>	2.56
$Nu = 2 + \frac{Z_k (Re Pr)^{1.7}}{1 + (Re Pr)^{1.2}}$	$Re = 1 \dots 100$	<i>Brauer e Newes</i>	2.57

Nas equações da tabela 2.1

$$Nu = \frac{h d_P}{K_G} \quad (2.58)$$

$$Re = \frac{\rho_g (v_g - v_s) d_P}{\mu_G} \quad (2.59)$$

$$Pr = \frac{C_p \mu_G}{K_G} \quad (2.60)$$

$$Z_k = \frac{0.66}{1 + Pr} + \frac{0.79 Pr}{Pr^{1.6} (2.4 Pr)} \quad (2.61)$$

Das equações da tabela 2.1, o autor [9] indica as equações que dão melhores resultados, dando especial ênfase ao fato das altas temperaturas envolvidas no processo

²retirado das referências [9] e [55]

por ele estudado. Para número de Reynolds entre 0 e 200 usa-se a equação 2.45 ; entre 200 e 600 a equação 2.46 e na região entre 600 e 4300 a equação 2.53.

Na mesma tabela, as equações de 2.55 a 2.57 foram extraídas do trabalho de TORREZAN [55] e são aplicáveis somente à esfera num meio infinito.

Em muitos casos, repara-se que a concentração de partículas é uma variável fundamental na determinação dos coeficientes de troca de calor e por isso devem, de alguma forma, figurar na correlação. Dessa forma TORREZAN [55] relaciona as equações que usam a concentração de partícula (β_v) ou a utilizam na especificação da faixa de aplicação. Estas expressões estão reproduzidas na tabela 2.2, que inclui a equação desenvolvida [55] através de dados experimentais com esferas de vidro de diâmetro desde 0,24 mm a 1,70 mm (equação 2.65).

Tabela 2.2: Correlações para o coeficiente de transferência envolvendo a influência da concentração

Equações ³ :	validade	autores	eq. n ^o :
$Nu = 0.186 Re^{0.82}$	$Re = 30 \dots 480,$ $\beta_v < 3.5 \cdot 10^{-4}$	<i>Gorbis</i>	2.62
$Nu = 0.006 Re^{0.8} \beta_v^{-0.43}$	$Re < 330,$ $\beta_v < 2.3 \cdot 10^{-3}$	<i>Chukhanov</i>	2.63
$Nu = 0.00114 Re^{0.8159} \beta_v^{-0.5984}$	$Re = 180 \dots 1800,$ $\beta_v = 0.00025 \dots 0.05$	<i>Bandrowski e Kaczmarzyk</i>	2.64
$Nu = 2 + \left\{ \left[0.4 \sqrt{Re} \right]^{\frac{5}{4}} + \left[f(\beta_v) Re^{0.82} \right]^{\frac{5}{4}} \right\}^{\frac{4}{5}}$	$Re = 20 \dots 790,$ $\beta_v = 0.00023 \dots 10^{-2}$	<i>Torrezan et alii</i>	2.65

Nas equações da tabela 2.2

$$\beta_v = \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon} . \quad (2.66)$$

2.4.2 Interações Térmicas Entre a Parede do Duto e a Mistura de Gás e Partícula

É de interesse avaliar a quantidade de calor que passa pelas paredes do reator. Na literatura encontram-se vários estudos onde a transferência por convecção entre a parede e o fluido (q_{SUSP}) é abordada. Devido a baixa temperatura envolvida na

³retirado da referência [55]

maioria dos trabalhos experimentais destes pesquisadores, não houve a preocupação de se considerar os efeitos da radiação entre a parede e as partículas (q_{RXR}).

Existe uma larga variedade de aplicações industriais onde as taxas de transferência de calor envolvidas são de grande importância. Para aproveitar o aumento no coeficiente de troca, devido a presença das partículas além da maior capacidade calorífica da mistura, muitos processos têm procurado utilizar a transferência de calor entre dutos e misturas gás-sólido. Exemplos importantes são alguns tipos de geradores de vapor e trocadores de calor na indústria química e nuclear [5].

Algumas revisões criteriosas sobre este assunto têm procurado enfocar principalmente a influência da concentração de partículas sobre o coeficiente de troca (h_{susp}). O trabalho de JEPSON [32] é realizado a baixas temperaturas, quando a radiação não é considerada, e a análise de outros parâmetros é executada por meio de um aparato simples.

A expressão para a taxa de transferência de calor é idêntica àquela do gás isolado

$$q_{susp} = h_{susp} A_R (T_W - T_g) , \quad (2.67)$$

onde

q_{susp} = taxa de transferência de calor

h_{susp} = coeficiente de película para o sistema suspensão-parede

A_R = área da troca térmica

T_W = temperatura da parede interna do reator

T_g = temperatura do gás de arraste.

Repara-se que a influência dos sólidos pode ser avaliada pela relação entre h_{susp} e h_0 , ou seja entre o coeficiente real e o coeficiente de troca para o gás isoladamente. Outro fato a ser observado é que na equação 2.67 toma-se a temperatura do gás (T_g). Porém existem casos onde uma temperatura média entre a do gás e a das partículas é usada.

Uma correlação para h_{susp} , baseada em princípios de similaridade, foi proposto por SADEK para baixa concentração de sólidos [50]

$$\frac{h_{susp} - h_0}{h_0} = 0.2 \left[n d_p^2 D_1 \right]^{1.19} , \quad (2.68)$$

onde

h_0 = coeficiente de película para o fluxo isento de partículas

\bar{n} = número médio de partículas por unidade de volume do gás

d_p = diâmetro das partículas

D_1 = diâmetro do duto.

Utilizando o conceito de \bar{n} e da porosidade (ϵ) e admitindo partícula esférica, a expressão torna-se

$$\frac{h_{susp}}{h_0} = 1 + 0.432 \left[\frac{D_1(1 - \epsilon)}{d_p} \right]^{1.19} \quad (2.69)$$

Em seu trabalho, BUDDE [9] também utiliza a diferença de temperatura entre a parede e o gás como força propulsora da transferência de calor, mas desconsidera a influência do material sólido na intensidade da transmissão de calor entre a parede e a suspensão, devido ao pouco conhecimento do assunto. Neste caso, para altas temperaturas, aplicam-se as equações de DUSCHIN (citado por [9]) (equações 2.70 e 2.71), e a influência dos sólidos é considerada no modelo para a radiação entre o duto e a partícula.

$$St_G = 0.332 Pr_G^{-0.6} Re_G^{-0.5} \left(\frac{T_g}{T_w} \right)^{0.11} \quad , \text{ para } Re_G \leq 2300 \quad (2.70)$$

$$St_G = 0.0296 Pr_G^{-0.6} Re_G^{-0.2} \left[\frac{2}{\left(1 + \sqrt{\frac{T_w}{T_g}} \right)} \right]^{1.6} \quad , \text{ para } Re_G > 2300 \quad , \quad (2.71)$$

onde

$$St_G = \text{número de Stanton} = \frac{h_{susp}}{\rho_g C_{pg} v_g}$$

$$Re_G = \text{número adimensional de Reynolds para o gás} = \frac{\rho_g v_g D_1}{\mu_G}$$

$$Pr_G = \text{número adimensional de Prandtl para o gás de arraste} = \frac{C_{pg} \mu_G}{k_G}$$

ρ_g = massa específica do gás

v_g = velocidade de escoamento do gás

μ_G = viscosidade do gás

C_{pg} = calor específico do gás de arraste a pressão constante.

FARBAR e MORLEY [20] também preocuparam-se em encontrar uma correlação para o h_{susp} . Seus experimentos foram direcionados mais especificamente para o catalizador sílica-alumina e ar. A temperatura do gás para o experimento gira em torno de $76^\circ F$ a $100^\circ F$; e a temperatura da parede não passa de $180^\circ F$. O resultado de seu estudo é uma correlação do número de Nusselt em função do número de Reynolds e da razão de alimentação entre sólido e gás.

$$Nu = 0.14 Re_G^{0.6} \left(\frac{G_s}{G_g} \right)^{0.45} \quad , \quad (2.72)$$

onde

G_S = vazão mássica dos sólidos

G_G = vazão mássica do gás.

Suspensões com pérolas de vidro e de grafite em ar foram utilizadas por WILKINSON e NORMAN [62]. Os resultados experimentais de h_{susp} foram comparados com o coeficiente para gás sozinho, e os valores foram comparados com diversas outras correlações pesquisadas pelo autor.

Como foi visto, correlações para coeficientes globais existem em grande quantidade, mas DEPEW e FARBAR [15] estabelecem uma equação para o número de Nusselt local também em função do valor encontrado para o ar individualmente.

Com raras exceções, os artigos que tratam do assunto não abordam a influência da radiação existente entre o duto e o meio particulado. É o caso de BOOTHROYD e LAQUE [8], que realizaram testes com partículas de zinco em dutos de vários diâmetros e cobrindo larga escala de razões de alimentação e números de Reynolds. A temperatura de parede utilizada nos experimentos é de, no máximo, $250^{\circ}F$, enquanto que a temperatura da mistura gira em torno de $80^{\circ}F$. Neste estudo utiliza-se a temperatura média da suspensão para a determinação do número de Nusselt experimental. A performance do equipamento é confirmada através dos dados de testes com ar, comparados com a correlação respectiva

$$Nu = 0.023 Re^{0.8} Pr^{0.4} \quad (2.73)$$

Verificam-se consideráveis diferenças ao confrontar os dados com os apresentados por outros autores ([62] e [32]). Associa-se esse fato à possibilidade da influência de diversos fatores, como por exemplo o surgimento de cargas eletrostáticas e a aglomeração de partículas. Ainda afirma-se que a influência da radiação térmica proveniente da parede deve ser melhor estudada e reavaliada. As conclusões mais importantes desse trabalho são [8]: a) a presença de sólidos no escoamento do gás pode aumentar ou diminuir o coeficiente de troca de calor, dependendo do valor para o parâmetro $(\frac{\rho_g D_1^2}{\rho_s d_p^2 Re})$; b) os resultados obtidos deixam claro que os sólidos interferem substancialmente no mecanismo de geração da turbulência do escoamento; c) a observação de um valor de mínimo para $(\frac{Nu_{susp}}{Nu_0})$ quando a baixos valores da razão de alimentação é um dado importante na análise dos resultados, já que existe um mínimo similar para a razão entre os fatores de atrito; d) para valores mais altos da razão

de alimentação, a presença de sólidos irá causar um aumento relativo muito maior na queda de pressão do que no coeficiente de troca térmica; e) a radiação proveniente da parede pode contribuir significativamente para transferência de calor no escoamento de suspensões, mas a magnitude deste efeito ainda é imprecisa.

Formulação mais complexa para definir o problema pode ser encontrada no trabalho de AZAD e MODEST [5] que é relativamente recente (1981), incorporando a influência tanto da convecção como da radiação ao transporte pneumático de partículas por meio de um modelo bidimensional (axial e radial). Considera-se o meio como multifásico, com dispersão anisotrópica de partículas que absorvem e emitem quando circundadas por uma parede aquecida ou resfriada a uma temperatura constante. Alega o autor que as partículas influenciam na transmissão de calor por causar distúrbios na estrutura do escoamento turbulento ou laminar. Ressalta ainda que, nas altas temperaturas, a interação da energia radiante com o meio particulado é importante, ao ponto de aumentar profundamente a transferência global de calor devido à alta absorvidade da suspensão de partículas finas. Acompanham, neste trabalho, vários gráficos demonstrando a participação da radiação no calor total transferido ($\frac{q^R}{q^T}$) onde $q^T = q^R + q^C$. De modo genérico, observam-se casos onde essa participação é de 20 %, podendo, em certas condições, aproximar-se de 100 %.

Destaca-se, ainda, uma das conclusões deste artigo [5], que afirma haver uma razão de alimentação de sólidos ótima, para uma dada situação de fluxo, na qual as taxas de transferência de calor são máximas. Assim, aumentando a quantidade de sólidos, aumenta também a espessura ótica da mistura resultando o ponto máximo para a taxa de transferência por radiação numa espessura ótica intermediária. Sobre a radiação no interior do reator, existem outros trabalhos, como o de ECHIGO *et alii* [18] que equaciona o problema considerando o gás como participante. Em outro trabalho SANDHU e HASHEMI [51] utilizam a seguinte expressão para representar o fluxo líquido de energia térmica radiante da superfície interior do duto para a superfície da partícula

$$q^R = F\epsilon_X\sigma(T_w^4 - T_p^4) \quad , \quad (2.74)$$

onde

q^R = fluxo de calor, (kJ/m³s)

F = fator de forma para a troca de calor por radiação entre a partícula e a parede do duto

ϵ_X = emissividade das partículas

σ = constante de Stefan-Boltzman = $5.677 \cdot 10^{-11}$ (kJ/m²sK⁴)

T_w = temperatura da parede do duto; no experimento é da ordem de 1283 K

T_p = temperatura local da partícula; no início é de aproximadamente 573 K.

Uma expressão muito parecida é proposta por BUDDE *et alii* [9], que considera um duto cilíndrico com um número pequeno de partículas cilíndricas distribuídas na seção transversal. O gás é admitido como não participante

$$q^R = \epsilon_{WP} \sigma A_p (T_w^4 - T_p^4) , \quad (2.75)$$

onde

A_p = área de troca das partículas

ϵ_{WP} = emissividade média entre parede e partícula, calculado como

$$\frac{1}{\epsilon_{WP}} = \frac{1}{\epsilon_X} + \frac{A_p}{A_w} \left(\frac{1}{\epsilon_w} - 1 \right) , \quad (2.76)$$

onde

ϵ_X = emissividade da partícula

A_w = área de troca do tubo

ϵ_w = emissividade do tubo.

2.4.3 Condução térmica no Interior das Partículas

A abordagem deste assunto é encontrada em alguns trabalhos ([9] e [51]), mas em geral considera-se que este processo de transferência não tem grande influência. Assim, DEPEW e FARBAR [15] e ainda AZAD e MODEST [5] em seus respectivos trabalhos preferem supor que a condutividade térmica das partículas é suficientemente alta para negligenciar a variação radial da temperatura dentro da partícula, ou seja um baixo valor do número de Biot.

2.4.4 Interações térmicas entre o gás de aquecimento, passando por um ânulo, e as paredes interna e externa desse ânulo

Os coeficientes de película para a parede externa e interna do ânulo podem ser determinados pela equação de Sieder e Tate [29] para o escoamento laminar e a equação

de Ditus-Boelter para o turbulento [29]. A influência da região de entrada, sobre os coeficientes de película também deve ser levada em consideração [37].

A questão da radiação externa ao reator pode ser abordada, conforme MIKHEYEV [40], tratando o gás como participante. A capacidade de emitir e absorver energia radiante dos gases é bastante variável. Em gases mono e diatômicos como nitrogênio (N_2), oxigênio (O_2) e hidrogênio (H_2) essa capacidade é insignificante, e estes gases podem ser considerados como transparentes à radiação. Alguns gases poliatômicos, em particular o dióxido de carbono (CO_2), o vapor d'água (H_2O), o dióxido de enxofre (SO_2) e a amônia (NH_3), possuem um poder emissivo e de absorção consideráveis.

Os gases comportam-se distintamente dos sólidos frente à radiação. Os sólidos emitem e absorvem energia térmica nos comprimentos de onda que vão de zero até um valor infinito. Já os gases, só o fazem dentro de faixas definidas de valores de comprimento de onda, comportando-se como transparentes para ondas não pertencentes a essas faixas. Outra diferença é que nos sólidos a emissão e absorção ocorrem pela sua superfície, enquanto que no gás ocorrem sobre todo volume.

Para quantificar estes efeitos, uma análise de dados obtidos diretamente da radiação total do gás mostra que, para o dióxido de carbono a radiação é proporcional a $T^{3.5}$ e para vapor de água a T^3 . As equações obtidas então para o poder emissivo do gás carbônico e do vapor de água são

$$E_{CO_2} = 3.5(p l)^{1/3} \left(\frac{T_g}{100} \right)^{3.5} \quad (2.77)$$

$$E_{H_2O} = 3.5 p^{0.8} l^{0.6} \left(\frac{T_g}{100} \right)^3, \quad (2.78)$$

onde

E_{CO_2} = poder emissivo do gás carbônico em $\left(\frac{kcal}{m^2.h} \right)$

E_{H_2O} = poder emissivo do vapor de água em $\left(\frac{kcal}{m^2.h} \right)$

p = pressão parcial do gás (atm)

l = comprimento médio do feixe (m)

T_g = temperatura do gás (K).

A emissividade do gás pode ser definida como a razão entre a taxa de transferência do gás e a taxa equivalente do corpo negro na temperatura do gás. Assim,

tem-se

$$\epsilon_G = \frac{E_G}{E_n} , \quad (2.79)$$

onde

ϵ_G = emissividade do gás

E_G = poder emissivo de um gás qualquer

E_n = poder emissivo do corpo negro.

Quando o dióxido de carbono e o vapor de água estão presentes, a emissividade da mistura será

$$\epsilon_G = \epsilon_{CO_2} + \beta \epsilon_{H_2O} - \Delta \epsilon_G , \quad (2.80)$$

onde

ϵ_{CO_2} = emissividade do dióxido de carbono

ϵ_{H_2O} = emissividade do vapor de água

β = fator de correção para a emissividade do vapor

$\Delta \epsilon_G$ = correção para o efeito de mistura.

Esta equação indica que a radiação total da mistura é um pouco menor que a soma pura e simples das radiações calculadas separadamente. Isto é devido ao fato das bandas de radiação e absorção do CO_2 e do vapor de água coincidirem parcialmente. Consequentemente, a radiação emitida pelo CO_2 é absorvida, em parte, pelo vapor e vice-versa.

Os valores de ϵ_{CO_2} , ϵ_{H_2O} , β e $\Delta \epsilon_G$ podem ser lidos em gráficos como os apresentados em várias fontes [29],[37] e [40]. A troca de calor pela radiação entre o gás e a superfície que o envolve pode ser calculada por [40]

$$q_{GW} = \epsilon_W^* \sigma \left[\epsilon_G T_g^4 - \alpha_G T_W^4 \right] , \quad (2.81)$$

onde

ϵ_W^* = emissividade efetiva na superfície

ϵ_G = emissividade do gás, calculada conforme equação 2.80

T_W = temperatura da superfície

σ = constante de Stefan-Boltzmann

α_G = absortividade do gás, calculada de forma similar a ϵ_G

$$\alpha_G = \alpha_{CO_2} + \alpha_{H_2O} - \Delta \alpha_G , \quad (2.82)$$

onde

$$\alpha_{CO_2} = \epsilon_{CO_2}^* \left(\frac{T_f}{T_w} \right)^{0.65}$$

$\epsilon_{CO_2}^*$ é lido no mesmo gráfico que o ϵ_{CO_2} , só que usando-se a temperatura T_w

$$\alpha_{H_2O} = \beta \epsilon_{H_2O}^*$$

$\epsilon_{H_2O}^*$ é lido no mesmo gráfico que o ϵ_{H_2O} , utilizando a temperatura T_w

$\Delta\alpha_G$ = correção para o efeito de mistura, pode ser considerado igual a $\Delta\epsilon_G$.

O comprimento médio de feixe (l) para uma configuração geométrica qualquer pode ser calculada como

$$l = 3.6 \frac{V}{S}, \quad (2.83)$$

onde

V = volume do gás

S = área da superfície que envolve o volume V .

2.4.5 Interações Térmicas entre Superfícies Aquecidas e o Ar Ambiente

A previsão da quantidade de calor que é perdida para o ambiente, no caso em que uma superfície aquecida está sujeita às condições atmosféricas, deverá envolver diversos fatores.

Pelo fato do ar ser aquecido ao entrar em contato com a superfície quente, cria-se um movimento vertical do fluido devido à diferença provocada na densidade. Desta forma é que surgem as correntes de convecção natural [29], que irão influir na quantidade de calor transferida.

Encontra-se na literatura [29] uma expressão que quantifica o calor transferido por convecção natural para o caso de cilindros verticais no regime laminar ($10^4 < Gr Pr < 10^9$)

$$q_{cn} = h_{cn} A (T_w - T_\infty) \quad (2.84)$$

$$h_{cn} = 1.42 \left(\frac{T_w - T_\infty}{L} \right)^{1/4}, \quad (2.85)$$

onde

A = área de troca térmica

T_w = temperatura da parede

T_∞ = temperatura ambiente

h_{cn} = coeficiente de transferência de calor em $\left(\frac{W}{m^2 \cdot ^\circ C}\right)$

L = dimensão característica (m).

A expressão acima (2.85) para o coeficiente de transferência é uma equação simplificada para o ar.

No caso da superfície estar sobre a ação de correntes de vento, espera-se que a perda de calor seja maior. Assim para avaliar este efeito, equações como as encontradas por ECKERT e DRAKE [29] ou CHURCHIL e BERNSTEIN [29] podem ser utilizadas. Entretanto, correlações dos dados experimentais para gases obtidas por HILPERT [29] calculam os coeficientes médios de acordo com a expressão

$$Nu = C \cdot \left(\frac{u_\infty D \rho_g}{\mu_G} \right)^n Pr_G^{1/3}, \quad (2.86)$$

onde as constantes C e n a serem usadas estão na tabela 2.3.

Tabela 2.3: Tabela com as constantes da equação 2.86

Re_G	C	n
0.4–4	0.989	0.33
4–40	0.911	0.385
40–4000	0.683	0.466
4000–40000	0.193	0.618
40000–400000	0.0266	0.805

Outras fontes sugerem expressões como [16]

$$h_{vento} = [3.2077 - 0.00235 (T_w - T_\infty)] u_\infty^{0.46}, \quad (2.87)$$

onde u_∞ = velocidade do vento em (km/h) [16], ou como [43]

$$h_{vento} = 5.3 + 3.6 W_\infty, \quad (2.88)$$

sendo W_∞ a velocidade do vento em (m/s). Para usar esta correlação a velocidade não deve ser superior a 5 m/s.

2.5 Métodos Numéricos

Muitos problemas na área da Engenharia Química que envolvem a formulação de modelos matemáticos podem ser resolvidos através de um conjunto de equações diferenciais ordinárias que de modo geral são não-lineares. Na maioria dos casos, as situações

encontradas na prática tornam as soluções analíticas desse conjunto de equações diferenciais laboriosas e complicadas. Daí, a necessidade de se estudar e aplicar os métodos numéricos [39].

Quanto às equações diferenciais ordinárias, pode-se distinguir dois tipos de problemas, de acordo com DAVIS [14]: Problemas de Valor Inicial (PVI) onde as condições impostas são de 1ª espécie e localizadas no mesmo extremo de integração; e Problemas de Valor de Contorno (PVC) onde as condições podem ser mistas (1ª, 2ª e 3ª espécies) e localizadas em qualquer extremo.

Os métodos para solução de um PVI podem ser classificados como explícitos e implícitos. Os métodos explícitos, também conhecidos como métodos de Runge-Kutta, baseiam-se nas expansões da função em série de Taylor satisfazendo a tantos membros quantos forem desejados, indicando a ordem do método. Os métodos implícitos por sua vez, são denominados como Preditor-Corretor [14].

Análises da estabilidade dos métodos explícitos mostram que nas regiões com acentuados gradientes ocorrem oscilações que podem ser divergentes em relação ao resultado analítico [39]. Nestes casos, o método implícito é mais indicado.

O método de predição e correção consiste basicamente em estimar um valor para a função no final do intervalo de integração, e depois utiliza-se uma fórmula mais apurada para corrigir este valor em aproximações sucessivas [39].

Método dos Pesos Residuais

Consiste em escolher uma função tentativa como solução da equação diferencial [21]. Portanto, seja a equação

$$f(x, y, y', y'', \dots) = 0, \quad (2.89)$$

com

$$(0 \leq x \leq 1) . \quad (2.90)$$

Escolhendo-se uma função tentativa $y_t = g(x)$ e substituindo na equação diferencial, temos

$$f(x, y_t, y_t', y_t'', \dots) = R(x), \quad (2.91)$$

onde $R(x)$ representa o residual ⁴.

⁴o residual pode ser interpretado como uma medida do resultado da aproximação

Pela integração com a função peso, obtém-se

$$\int_0^1 [W(x) f(x, y_t, y_t', y_t'', \dots)] dx = \int_0^1 W(x) R(x) dx, \quad (2.92)$$

onde,

$W(x) \rightarrow$ função peso, definida como ortogonal ao resíduo.

Como o produto escalar de vetores ortogonais é nulo,

$$\int_0^1 W(x) R(x) dx = 0 \quad (2.93)$$

e

$$\int_0^1 f(x, y_t, y_t', y_t'', \dots) dx = 0. \quad (2.94)$$

O critério de escolha da função peso é que define o tipo do método [21]. Por exemplo, se

- $W(x) = \delta$ (delta de Dirac), tem-se o método da colocação, e
- $W(x) = (x^{k+1} - x^k)$ tem-se o método de Galerkin.

Para o caso da colocação ortogonal pode-se escolher a função tentativa. Para resolver as equações diferenciais deste trabalho utiliza-se a série de polinômios de Hermite, para simplificar a aplicação do método da colocação ortogonal em elementos finitos.

Colocação Ortogonal em Elementos Finitos [21,12,57,58]

Este método consiste em dividir o intervalo de interesse em subdomínios, que são os elementos; aos quais poderão ser aplicadas funções tentativa em pontos determinados (chamados de pontos de colocação). A figura 2.1 demonstra a divisão do intervalo. As funções tentativa escolhidas são polinômios de Hermite e cada variável possui uma função própria, existindo para cada elemento um conjunto de constantes do polinômio. O objetivo é representar o valor de cada variável dependente de acordo com a posição (variável independente), ou seja, para um elemento k qualquer

$$y_t = \sum_{i=1}^4 p_i \cdot H_i(u), \quad (2.95)$$

sendo que p_i são os parâmetros que resolvem o problema e $H_i(u)$ são funções só da variável independente

$$H_1(u) = (1 - u)^2(1 + 2u), \quad (2.96)$$

$$H_2(u) = u(1 - u)^2 h_k , \quad (2.97)$$

$$H_3(u) = u^2(3 - 2u) , \quad (2.98)$$

$$H_4(u) = u^2(u - 1)h_k . \quad (2.99)$$

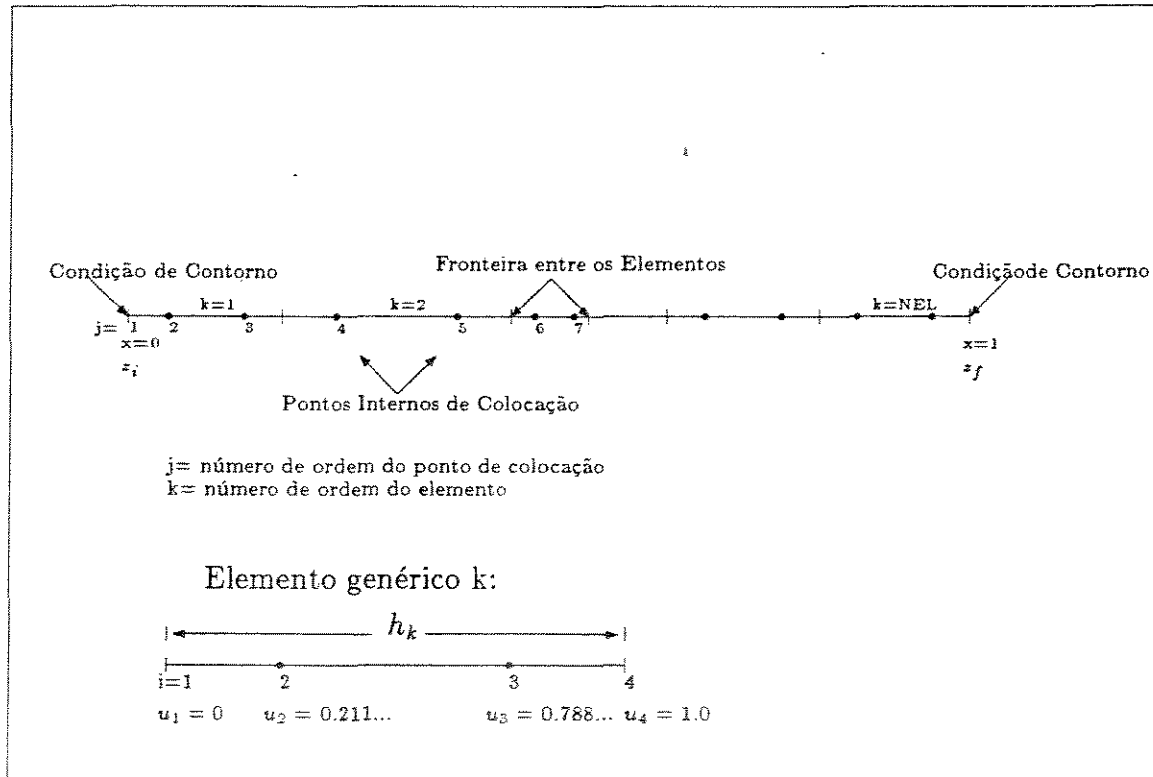


Figura 2.1: Ilustração do domínio da variável independente no intervalo de z_i a z_f no método da colocação ortogonal em elementos finitos com dois pontos de colocação por elemento e NEL elementos totais.

Deve-se adimensionalizar as equações diferenciais na variável independente, o que facilita a localização dos pontos de colocação. No caso em questão, como se trata de colocação em elementos finitos, é preciso adimensionalizar primeiro em relação a variável independente z do modelo para o intervalo entre z_i a z_f , criando a variável x . Depois para cada elemento deste intervalo entre x_k e x_{k+1} , surgindo a variável u

$$x = \frac{z - z_i}{z_f - z_i} \quad (2.100)$$

$$h_k = x_{k+1} - x_k \quad (2.101)$$

$$u = \frac{x - x_k}{h_k} . \quad (2.102)$$

As representações das funções tentativa para as variáveis dependentes e suas derivadas são

$$y_t = p_1 H_1 + p_2 H_2 + p_3 H_3 + p_4 H_4 \quad (2.103)$$

$$\frac{dy_t}{dx} = \frac{1}{h_k} \cdot (p_1 A_1 + p_2 A_2 + p_3 A_3 + p_4 A_4) \quad , \quad (2.104)$$

onde H_1 , H_2 , H_3 e H_4 são os valores das equações $H_i(u)$ (2.96 a 2.99) no ponto de colocação, e

$$A_i = \frac{dH_i}{du} \quad (2.105)$$

assim

$$A_1 = 6u(u - 1) \quad (2.106)$$

$$A_2 = (3u^2 - 4u + 1)h_k \quad (2.107)$$

$$A_3 = 6u(1 - u) \quad (2.108)$$

$$A_4 = (3u^2 - 2u)h_k \quad . \quad (2.109)$$

Uma peculiaridade das funções tentativa escolhidas é que quando $u=0$, tem-se que

$$y_t|_{u=0} = p_1 \quad (2.110)$$

$$\left. \frac{dy_t}{dx} \right|_{u=0} = p_2 \quad , \quad (2.111)$$

e também para $u=1$

$$y_t|_{u=1} = p_3 \quad (2.112)$$

$$\left. \frac{dy_t}{dx} \right|_{u=1} = p_4 \quad . \quad (2.113)$$

Portanto, os parâmetros encontrados representam os valores da variável dependente e sua derivada primeira em cada ponto nodal ⁵ do elemento. Como deseja-se que a curva de y_t contra x seja contínua, para elementos vizinhos tem-se

$$(p_1)_{k+1} = (p_3)_k \quad (2.114)$$

$$(p_2)_{k+1} = (p_4)_k \quad . \quad (2.115)$$

É necessário então descobrir, em cada uma das equações diferenciais do modelo, dois parâmetros para cada ponto nodal introduzido. Em problemas de valor

⁵Ponto nodal é aquele situado nas fronteiras de um elemento.

de contorno, dois desses parâmetros são conhecidos. A figura 2.2 ilustra esquematicamente o sistema de equações para ser resolvido quando uma equação diferencial é discretizada pelo método da colocação ortogonal em elementos finitos usando três elementos. Neste caso, a equação diferencial discretizada e na forma implícita $F(x) = 0$, é aplicada nos seis pontos internos de colocação, ou seja em $x_2, x_3 \dots x_7$. Utilizando as condições de contorno, formam-se oito equações para os oito parâmetros (p_i) a serem encontrados.

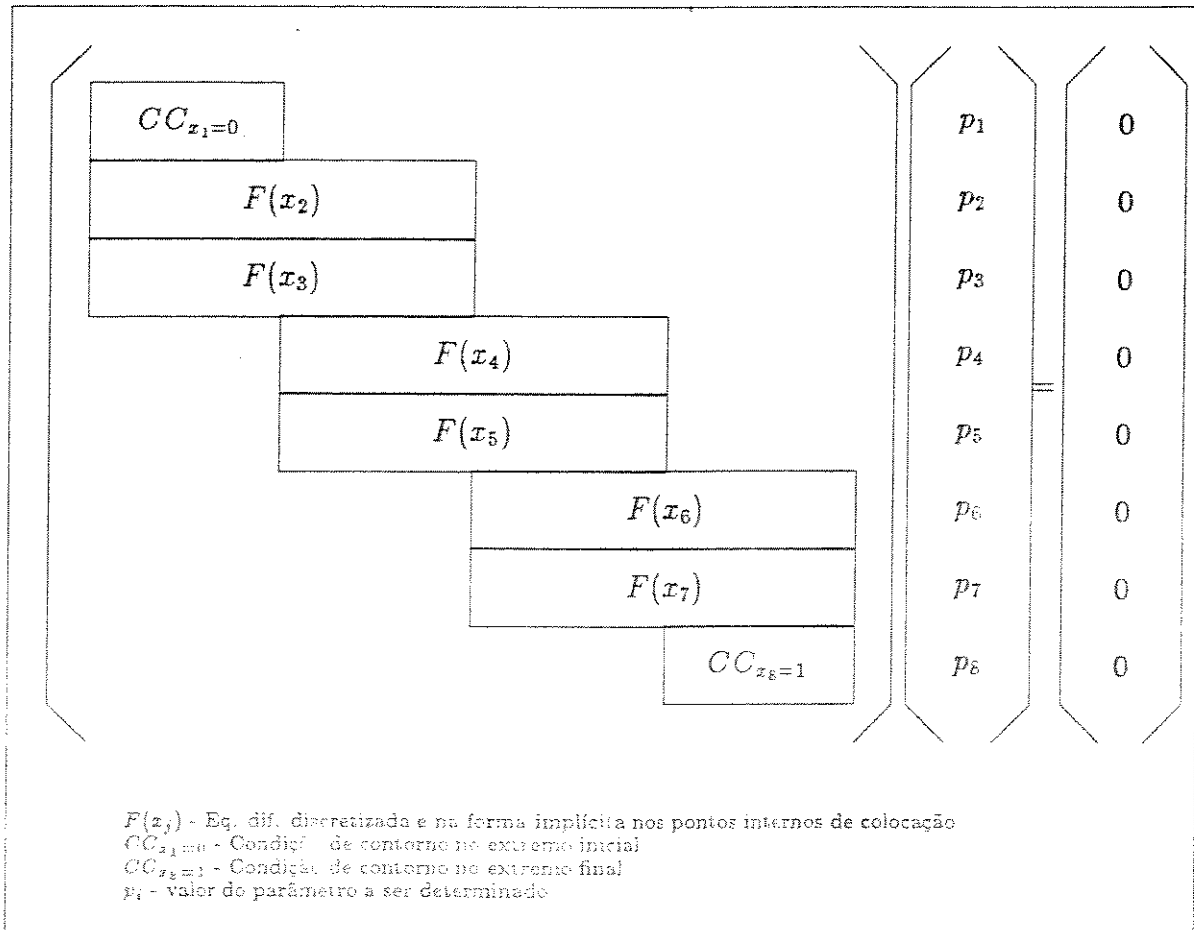


Figura 2.2: Ilustração da estrutura matricial para a colocação ortogonal em elementos finitos, usando polinômios de Hermite cúbicos, de uma equação diferencial (uma variável dependente) com três elementos

Resolução de Sistemas de Equações Algébricas Não-Lineares

Para solucionar sistemas de equações do tipo da figura 2.2, existem alguns métodos numéricos já consagrados como o método de Newton estendido [21,31,41] e o método de Broyden [61,41]. Na verdade o segundo método é uma modificação do

primeiro, onde existe a vantagem de calcular o Jacobiano apenas para a estimativa inicial.

Inversão de Matrizes

O método utilizado para inverter matrizes foi o método da eliminação [44,52]. A simplicidade das operações realizadas por este método permitem algumas adaptações para adequar o método à sua utilização.

2.6 Simulação pelo Modelo Simplificado

Um modelo simplificado, composto basicamente de equações diferenciais para o balanço de energia e para a cinética foi elaborado por MARTIGNONI *et alii* [34]. A questão da fluidodinâmica foi resolvida pelas equações de Yang [63] (equações 2.17 a 2.21).

Para o balanço de energia entre a superfície interna do reator e a mistura gás-sólido [34]

$$A\varepsilon v_g \rho_g C_{p_g} \frac{dT_g}{dz} + A(1 - \varepsilon) v_x \rho_x C_{p_x} \frac{dT_x}{dz} + Y \Delta H_r \frac{dX}{dz} = q_{susp} + q_{RXR} \quad (2.116)$$

Para o balanço de energia no xisto:

$$A(1 - \varepsilon) v_x \rho_x C_{p_x} \frac{dT_x}{dz} + Y \Delta H_r \frac{dX}{dz} = q_{GX} + q_{RXR} \quad (2.117)$$

Para o balanço de energia no gás de combustão:

$$A_C v_C \rho_C C_{p_C} \frac{dT_C}{dz} = q_{amb} + q_{susp} + q_{RXR} \quad (2.118)$$

Para a cinética da reação:

$$\frac{dX}{dz} = \frac{K_1}{v_x} e^{(-K_1 \frac{A}{v_x})} \quad (2.119)$$

Nas equações acima

$$\dot{m}_g = \rho_g v_g A_T \varepsilon \quad (2.120)$$

$$\dot{m}_x = \rho_x v_x A_T (1 - \varepsilon) \quad (2.121)$$

\dot{m}_{comb} = vazão mássica do gás de aquecimento

q_{susp} = taxa de transferência de calor para a mistura gás-sólido

q_{GX} = taxa de transferência de calor entre gás e xisto

q_{amb} = taxa de transferência de calor para o ambiente

q_{RXR} = taxa de transferência de calor por radiação entre a parede do reator e o xisto

$$A = \frac{\pi D_1^2}{4}$$

z = dimensão axial

Y = teor de orgânicos

C_{p_x} = calor específico do xisto

ρ_x = massa específica do xisto

T_x = temperatura do xisto

v_x = velocidade do xisto

ΔH_r = calor de reação

X = conversão

C_{p_g} = calor específico do gás de arraste

T_g = temperatura do gás de arraste

ρ_g = massa específica do gás

ε = porosidade do sistema

A_C = área anular de escoamento dos gases de combustão

ρ_c = massa específica do gás de combustão

v_C = velocidade de escoamento do gás de combustão

C_{p_c} = calor específico do gás de combustão

T_C = temperatura do gás de aquecimento

K_1 = constante da taxa para a primeira reação (s^{-1})

h_{susp} , h_{RXR} , U_{GX} , h_{conv} , h_{RAD} são coeficientes de troca térmica.

O sistema de equações diferenciais formado foi resolvido por um método Runge-Kutta de quarta ordem, e a comparação com dados experimentais foi considerada como satisfatória.

Posteriormente, MARTIGNONI aprofundou um pouco mais o modelo, analisando algumas opções visando adaptar o processo a uma unidade em escala industrial [35]. Seguindo com este objetivo, MARTIGNONI *et alii* procuram avaliar as possíveis características e condições de operação de um forno de pirólise em leito de arraste [36].

Capítulo 3

MODELAGEM MATEMÁTICA

O objetivo deste capítulo é demonstrar o modelo matemático elaborado que deve ser coerente com o comportamento real do sistema físico de uma forma apropriada aos propósitos finais deste trabalho.

O modelo surge em forma de equações diferenciais provenientes da aplicação dos princípios de conservação de massa, de energia e de quantidade de movimento. Além disso, existem relações que se referem à reação, propriedades físicas e outras correlações para representar os parâmetros empíricos. Assim, estes balanços são aplicados em um volume de controle ou em uma superfície de contorno. Equações diferenciais serão obtidas se o volume for diferencial. As equações serão algébricas caso o volume considerado tenha dimensões finitas.

Depois de testado e aprovado, o modelo passa a ser usado em diversas atividades. Em primeiro lugar, é bom começar testando as estimativas das propriedades, para certificar-se de que um pequeno erro em um destes dados não irá ocasionar uma modificação expressiva no resultado final. Também é interessante verificar quais as variáveis operacionais que podem controlar o processo, evitando gastos desnecessários com o controle inócuo sobre uma variável operacional que pouco influi nos resultados. Desta forma, tem-se o estudo da sensibilidade paramétrica do modelo que será abordado mais adiante em outro capítulo.

Uma outra possibilidade gerada com a execução da simulação é a rápida verificação das consequências de uma modificação qualquer no processo, o que significará, em muitas ocasiões, uma economia de recursos. Sugere-se então que, se estas tentativas de modificação forem feitas com o objetivo de melhorar a "performance" do reator, tem-se o estudo de otimização do reator. Com as fases descritas concluídas, fica mais fácil fazer o "scale-up" do equipamento, ou ainda, é possível desenvolver um

processo para torná-lo viável. Estas últimas etapas, ou seja, a otimização e a análise do processo não são temas deste trabalho.

Finalmente, é importante salientar que a existência de dados experimentais de uma instalação piloto permite a confrontação com os dados simulados, conferindo ao trabalho importante teor prático.

3.1 Descrição do Sistema Físico

Até pouco tempo, os finos (material granular de pequeno tamanho) gerados nos sistemas de redução de tamanho do minério bruto eram descartados, e não tinham nenhum tipo de aproveitamento. O equipamento que está sendo simulado é um reator de leito de arraste para pirólise dos finos de xisto. Este processo recebe o nome de Plasol (Pirólise em leito de arraste de sólidos), para diferenciar do processo Petrosix, que é o principal da Usina de Xisto de São Mateus do Sul.

O reator consiste em dois tubos concêntricos verticais com 15 metros de altura, onde pelo tubo interior escoam o xisto pelo efeito do arraste do gás propulsor (transporte pneumático). O tubo interior é de aço inox e tem diâmetro de três polegadas. O gás utilizado na simulação e na planta foi o próprio gás produzido na reação, denominado como gás de reciclo. A figura 3.1 ilustra esquematicamente o reator de pirólise.

No espaço anular escoam o gás de aquecimento produzido por um queimador de óleo localizado na base do reator, caracterizando as correntes paralelas de xisto e gás de aquecimento. O tubo externo é feito de concreto refratário. A espessura da parede é suficiente para prover um bom isolamento ao sistema pois o diâmetro interno é de 19 cm e o externo de 45 cm. Porém a edificação onde está o reator não possui paredes laterais, estando sujeito a ação de agentes externos como chuva, insolação, vento dentre outros, o que dificulta ainda mais o tratamento matemático das perdas de calor para o ambiente.

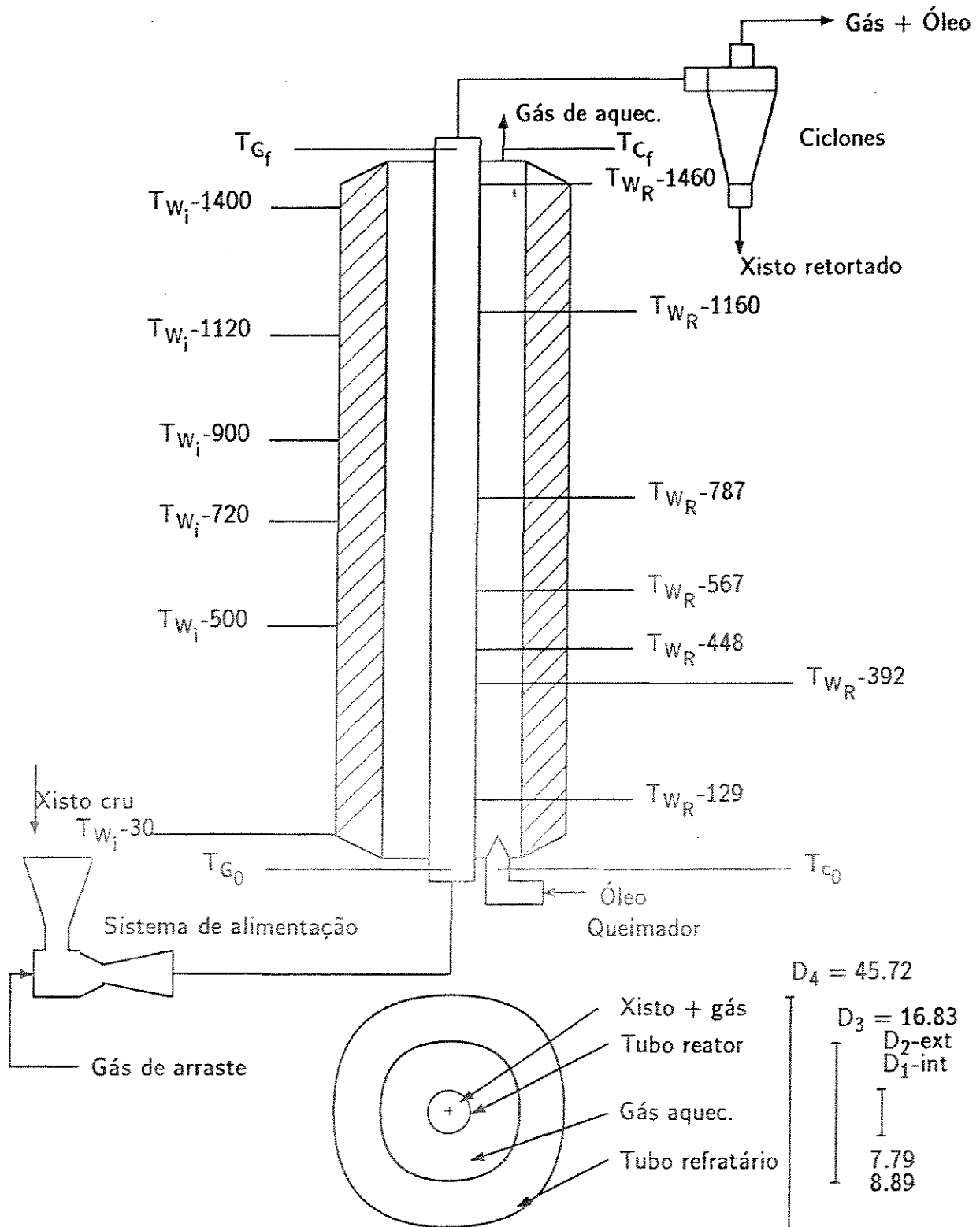


Figura 3.1: Desenho esquemático do Sistema Físico - cotas e diâmetros em cm

A planta piloto existente nas instalações da Usina de Xisto da Petrobrás - SIX em São Mateus do Sul, onde foram obtidos os dados experimentais, está projetada para 500 kg/h de xisto. A unidade é composta do sistema de alimentação, do reator, do sistema de aquecimento do reator, do sistema de condensação e coleta de produtos, do sistema de desempoeiramento e coleta de pó, dos sistemas de medição e de controle e dos sistemas de recuperação de calor. Porém a preocupação deste trabalho restringe-se somente ao reator.

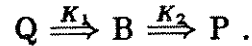
Outra complicação enfrentada é com respeito ao fato do xisto entrar no reator com um certo grau de umidade. Isto obriga o tratamento matemático da faixa de evaporação desta umidade, o que significa um aumento considerável no tempo de execução da simulação.

As hipóteses simplificadoras principais adotadas que tornaram possível a formulação do modelo, eliminando termos que, apesar de uma importância menor, requisitariam grande esforço e consumo de tempo para serem avaliadas são:

- Operação em regime permanente;
- Modelo unidimensional (variações somente no sentido axial);
- Cinética de primeira ordem para a reação de pirólise;
- Composição do xisto expressa somente em teor de orgânicos (Querogênio e Betume) e matéria inerte;
- Os produtos formados (gás, óleo e resíduo de carbono) são tratados como uma única substância.
- Considera-se um diâmetro médio para a caracterização das partículas de xisto;
- Partículas com geometria esférica;
- Para o cálculo das propriedades físicas, os gases de arraste e de aquecimento são considerados como uma mistura ideal de gases ideais;
- Para simplificar o efeito da umidade no xisto, presume-se que a evaporação da água na partícula começa a 100 °C e, enquanto existir água, a temperatura do xisto permanece constante .

3.2 Cinética da Pirólise

Considera-se que as transformações de natureza química que ocorrem no reator possam ser representadas segundo a equação química



E admitindo o modelo cinético homogêneo de primeira ordem para caracterizar o comportamento destas transformações, as equações 2.1, 2.2 e 2.3 já apresentadas no capítulo da revisão bibliográfica podem ser utilizadas. Porém, com a definição da velocidade instantânea do xisto (v_x), as equações se transformam em

$$\frac{dQ}{dz} = \frac{-K_1 Q}{v_x} \quad (3.1)$$

$$\frac{dB}{dz} = \frac{K_1 Q - K_2 B}{v_x} \quad (3.2)$$

$$\frac{dP}{dz} = \frac{K_2 B}{v_x} , \quad (3.3)$$

onde

Q = fração em massa do Querogênio no xisto $\left(\frac{\text{g de querogênio}}{\text{g de xisto alimentado}} \right)$

B = fração em massa do Betume no xisto $\left(\frac{\text{g de betume}}{\text{g de xisto alimentado}} \right)$

P = fração em massa dos produtos em relação à massa inicial de xisto

K_1 = constante da taxa para a primeira reação (s^{-1})

K_2 = constante da taxa para a segunda reação (s^{-1})

As constantes K_1 e K_2 das reações são dependentes da temperatura do xisto (T_x) seguindo a lei de Arrhenius

$$K_1 = 996.04 e^{\left(\frac{-9500}{RT_x} \right)} \quad (3.4)$$

$$K_2 = 3.64 \cdot 10^{+7} e^{\left(\frac{-26500}{RT_x} \right)} , \quad (3.5)$$

onde

R = constante para os gases

T_x = temperatura do xisto.

Definindo o teor de orgânicos como

$$Y = \frac{m_{org}}{m_x} , \quad (3.6)$$

onde

\dot{m}_{org} = vazão mássica equivalente da matéria orgânica no xisto

\dot{m}_x = vazão mássica do xisto. E considerando que a matéria orgânica no xisto é composta essencialmente por querogênio e betume, e a ainda sabendo que as variáveis Q e B são relativas à vazão mássica de xisto alimentada (\dot{m}_{x_0}) tem-se:

$$\dot{m}_{org} = (Q + B) \dot{m}_{x_0} \quad (3.7)$$

$$Y = \frac{(Q + B) \dot{m}_{x_0}}{\dot{m}_x}, \quad (3.8)$$

e a conversão dos orgânicos é expressa como

$$X = \frac{(\dot{m}_{org})_0 - \dot{m}_{org}}{(\dot{m}_{org})_0} = \frac{(Q_0 + B_0) - (Q + B)}{(Q_0 + B_0)} \quad (3.9)$$

$$X = \frac{P - P_0}{Y_0}, \quad (3.10)$$

onde

Q_0 = fração inicial do Querogênio no xisto

B_0 = fração inicial do Betume no xisto

P_0 = fração inicial dos produtos em relação à massa do xisto

Y_0 = teor inicial de material orgânico (Querogênio e Betume) no xisto.

Como as concentrações so relativas à quantidade inicial de xisto tem-se a relação

$$Q_0 + B_0 + P_0 + In_0 = Q + B + P + In. \quad (3.11)$$

Como a quantidade de material inerte não se altera ($In = In_0$) chega-se a

$$X = \frac{P - P_0}{Y_0}, \quad (3.12)$$

surgindo daí as expressões

$$Y = \frac{Y_0(1 - X)}{(1 - XY_0)} \quad (3.13)$$

$$\frac{dX}{dz} = \frac{1}{Y_0} \cdot \frac{dP}{dz} \quad (3.14)$$

$$\frac{dY}{dz} = Y_0 \frac{(Y_0 - 1)}{(1 - XY_0)^2} \frac{dX}{dz}. \quad (3.15)$$

É muito mais interessante saber a conversão em cada ponto, do que avaliar a concentração de produto formado. Assim substituindo em 3.3 a equação 3.14, obtém-se

$$\frac{dX}{dz} = \frac{K_2 B}{Y_0 v_x} \quad (3.16)$$

A cinética fornece então, ao modelo final, três equações 3.1, 3.2 e 3.16; que possuem como incógnitas as variáveis Q , B , X , v_x e T_x .

A escolha deste modelo cinético justifica-se porque apesar de sua simplicidade, fornece resultados confiáveis. Além disso, para usar modelos mais complexos necessita-se do levantamento de um número considerável de dados ; o que neste momento não é viável.

3.3 Balanços de Massa

A modelagem matemática adotada segue o modelo de duas fases, ou seja, os balanços de conservação são efetuados considerando o fluído e as partículas separadamente. Admite-se um elemento diferencial cilíndrico com base de diâmetro D_1 e altura dz , cujo volume é igual a

$$dV_{el} = \left(\frac{\pi D_1^2 dz}{4} \right) , \quad (3.17)$$

onde D_1 = diâmetro interno do reator.

Por este elemento, passa no sentido ascendente uma suspensão de sólidos arrastada por um gás. Perto da base, onde o xisto sofre secagem, e a partir de certo ponto, onde começa a pirólise são liberados produtos gasosos que irão compor a fase fluida. Desta maneira, a composição do gás de arraste também varia de acordo com a posição no reator.

Consideram-se desprezíveis as variações nas propriedades no sentido radial, e os balanços mássicos são:

a) para os sólidos

$$\frac{d \dot{m}_x}{dz} - \frac{d \dot{m}_{org}}{dz} - \frac{d \dot{m}_{umi}}{dz} = 0 ; \quad (3.18)$$

b) para o gás de arraste

$$\frac{d \dot{m}_g}{dz} + \frac{d \dot{m}_{org}}{dz} + \frac{d \dot{m}_{umi}}{dz} = 0 ; \quad (3.19)$$

onde

\dot{m}_{umi} = é a vazão mássica da umidade contida no xisto

\dot{m}_g = é a vazão mássica do gás de arraste.

A informação que deve ser retirada das equações acima é que a variação da vazão mássica de xisto irá depender da umidade desprendida do xisto na região de secagem; ou da quantidade de produtos gasosos formada na etapa da pirólise. Idem e com efeito contrário para a vazão mássica do gás de arraste. Portanto na região de evaporação $\frac{d\dot{m}_{umi}}{dz} < 0$ e $\frac{d\dot{m}_{org}}{dz} = 0$. A reação se inicia quando a temperatura do xisto é maior que 100 °C e assim $\frac{d\dot{m}_{org}}{dz} < 0$ e $\frac{d\dot{m}_{umi}}{dz} = 0$. Portanto na região de secagem, a umidade do xisto é uma variável dependente de z , enquanto que a temperatura do xisto deixa de variar nesta parte do reator. Este fato pode ser aproveitado no programa da simulação para economizar o tamanho das matrizes, mas deste modo é obrigatório encontrar a posição exata onde começa e onde termina a secagem.

As equações 3.18 e 3.19 estão na forma implícita para facilitar o equacionamento da resolução numérica do sistema de equações. Para compor as equações que fazem parte do modelo, as vazões mássicas nas equações devem ser substituídas pelas verdadeiras incógnitas do sistema, como foi feito na cinética. Assim, pode-se escrever que

$$\dot{m}_g = \rho_g v_g A_T \varepsilon \quad (3.20)$$

$$\dot{m}_x = \rho_x v_x A_T (1 - \varepsilon) \quad (3.21)$$

$$\dot{m}_{org} = \dot{m}_x Y \quad (3.22)$$

$$\dot{m}_{umi} = \dot{m}_x \Phi \quad (3.23)$$

$$A_T = \frac{\pi D_1^2}{4} , \quad (3.24)$$

onde

ρ_g = massa específica do gás

v_g = velocidade de escoamento do gás

A_T = área de escoamento do reator

ε = porosidade

ρ_x = massa específica do xisto

Φ = umidade no xisto

Y = teor de orgânicos

v_x = velocidade do xisto

D_1 = diâmetro interno do reator.

Portanto, resta apresentar as formas derivadas e desmembradas destas funções que deverão ser substituídas nas equações 3.18 e 3.19. Dispensa-se a apresentação das equações substituídas por causa do tamanho resultante das expressões sem prejuízo da compreensão dos balanços.

$$\frac{d \dot{m}_g}{dz} = \rho_g v_g A_T \frac{d\varepsilon}{dz} + \rho_g A_T \varepsilon \frac{dv_g}{dz} + A_T \varepsilon v_g \frac{d\rho_g}{dz} \quad (3.25)$$

$$\frac{d \dot{m}_x}{dz} = -\rho_x v_x A_T \frac{d\varepsilon}{dz} + \rho_x A_T (1 - \varepsilon) \frac{dv_x}{dz} + A_T (1 - \varepsilon) v_x \frac{d\rho_x}{dz} \quad (3.26)$$

$$\frac{d \dot{m}_{org}}{dz} = Y_0 \dot{m}_{x_0} \frac{dX}{dz} \quad (3.27)$$

$$\frac{d \dot{m}_{umi}}{dz} = \Phi \frac{d \dot{m}_x}{dz} + \dot{m}_x \frac{d\Phi}{dz} \quad (3.28)$$

Desta maneira é possível mostrar quais serão as variáveis do modelo. Nota-se pela cinética que as concentrações de querogênio e de betume, a conversão, a temperatura e a velocidade do xisto serão algumas das variáveis dependentes do modelo. Nas equações para o balanço de massa surgem ainda a porosidade, a velocidade e temperatura do gás, e a pressão no sistema. A pressão e a temperatura do gás não aparecem diretamente nas equações, porém, ao avaliar a variação da densidade do gás com a altura do reator, através da lei dos gases ideais, incluem-se as duas variáveis citadas. A questão das propriedades físicas terá sua discussão em seção posterior, mas é oportuno salientar que a densidade do xisto depende das variações da temperatura do xisto e do teor de orgânicos na partícula. A fração de orgânicos não é uma incógnita do modelo e pode ser expressa em função só da conversão.

3.4 Balanços da Quantidade de Movimento

Com a finalidade de conseguir demonstrar o que ocorre em relação à fluidodinâmica das fases, utiliza-se o modelo das duas fases, onde no balanço considera-se as influências peculiares a cada uma delas. Anteriormente [34] foi utilizado para suprir esta necessidade um conjunto de equações de origem empírica que relacionam a velocidade da partícula com as condições locais de certas propriedades.

Apesar do grande valor prático implícito no uso destas relações, prefere-se realizar o estudo utilizando equações com um fundamento mais teórico. Assim

equacionam-se os balanços de conservação na quantidade de movimento para cada uma das fases, usando para isso um elemento diferencial cilíndrico fixo e idêntico aos balanços de massa. Com o auxílio dos trabalhos anteriores de Gidaspow [24] e Meier [38] os balanços ficam:

a) para o gás de arraste

$$\frac{d(\rho_g \epsilon v_g^2)}{dz} + \epsilon \frac{dp}{dz} + \beta_A (v_g - v_x) + g \rho_g \epsilon + \frac{2 \rho_g \epsilon v_g^2 f_{Gf}}{D_1} = 0, \quad (3.29)$$

b) e para os sólidos

$$\frac{d(\rho_x (1 - \epsilon) v_x^2)}{dz} + (1 - \epsilon) \frac{dp}{dz} - \beta_A (v_g - v_x) + g \rho_x (1 - \epsilon) + \frac{2 \rho_x (1 - \epsilon) v_x^2 f_{Sf}}{D_1} = 0, \quad (3.30)$$

onde

ρ_g = massa específica do gás

ρ_x = massa específica do xisto

v_g = velocidade de escoamento do gás

ϵ = porosidade

v_x = velocidade do xisto

Z = cota ou altura desde a base do reator

p = pressão

β_A = coeficiente de atrito ente as fases

f_{Gf} = fator de atrito entre gás e parede

f_{Sf} = fator de atrito entre sólidos e parede

C_D = coeficiente de arraste para uma partícula isolada

g = aceleração da gravidade

D_1 = diâmetro interno do reator.

Observa-se que a avaliação da variação da quantidade de movimento do gás $\left[\frac{d(\rho_g \epsilon v_g^2)}{dz} \right]$ e do xisto $\left[\frac{d(\rho_x (1 - \epsilon) v_x^2)}{dz} \right]$ levam em consideração o efeito da queda de pressão atuante em cada fase $\left[\epsilon \frac{dp}{dz} \right]$ e $\left[(1 - \epsilon) \frac{dp}{dz} \right]$, a ação da gravidade $[g \rho_g \epsilon]$ e $[g \rho_x (1 - \epsilon)]$, e os efeitos de atrito. O cálculo da influência do atrito entre gás e partículas $[\beta_A (v_g - v_x)]$ é estimado aplicando a lei de Darcy. A fricção com as paredes dos dutos em sistemas diluídos pode ser avaliada utilizando a expressão de Fanning. Assim, representa-se o atrito entre o gás e a superfície do reator como $\left[\frac{2 \rho_g \epsilon v_g^2 f_{Gf}}{D_1} \right]$; e entre as partículas e a superfície como $\left[\frac{2 \rho_x (1 - \epsilon) v_x^2 f_{Sf}}{D_1} \right]$.

O coeficiente de atrito gás-partícula (β_A) é estimado pelas equações de WEN e YU [60] para a perda de carga em leitos de porosidade acima de 0.81 como

$$\beta_A = C_D \frac{3 \rho_g |v_g - v_x| \varepsilon (1 - \varepsilon)}{4 d_p \varepsilon^{2.65}} , \quad (3.31)$$

onde

d_p = diâmetro médio das partículas

C_D = coeficiente de arraste para uma partícula isolada. Seu valor é estimado por correlações dependentes do número de Reynolds (Re_P) estipuladas por ROWE [49]

$$C_D = 0.44 , \text{ para } Re_P \geq 1000 \quad (3.32)$$

$$C_D = \frac{24}{Re_P} (1 + 0.15 Re_P^{0.687}) , \text{ para } Re_P < 1000 , \quad (3.33)$$

onde Re_P = número adimensional de Reynolds relativo à partícula = $\frac{\rho_g (v_g - v_x) d_p}{\mu_G}$.

Para o cálculo do coeficiente gás-parede usa-se a fórmula de Poiseulle (equação 3.34) na região laminar e Blasius (equação 3.35) para região de transição ($2100 \leq Re_G \leq 100.000$). Assim:

$$f_{Gf} = \frac{16}{Re_G} , \text{ para } Re_G \leq 2100 \quad (3.34)$$

$$f_{Gf} = \frac{0.0791}{Re_G^{1/4}} , \text{ para } 2100 < Re_G \leq 100000 , \quad (3.35)$$

onde Re_G = número adimensional de Reynolds para o gás = $\frac{\rho_g v_g D_1}{\mu_G}$.

O cálculo do coeficiente de atrito partícula-parede é feito através da equação de KONNO-SAITO [33]

$$f_{Sf} = 2.85 \cdot 10^{-2} \frac{\sqrt{g D_1}}{v_x} . \quad (3.36)$$

Desta forma, as equações 3.29 e 3.30 na forma implícita e depois de desmembradas as derivadas, constituem mais duas equações para o modelo.

3.5 Balanços de Energia

A questão da energia utilizada no processo depende das considerações a respeito das regiões do reator. Assim, seria necessário o equacionamento dos balanços para cada uma destas. Porém, é possível representar todas as regiões (aquecimento, evaporação e pirólise) por um modelo único. Repare-se que quando há evaporação, não há a pirólise, porque a T_x ainda é baixa o bastante para não promover a reação. Então,

o que acontece nas expressões do modelo é a nulificação, por exemplo, na zona de pirólise, dos termos da evaporação.

Primeiramente, apresentam-se os mecanismos principais de transferência de calor que foram considerados nos balanços, em seguida mostram-se os balanços de energia que irão compor o sistema de equações diferenciais.

3.5.1 Mecanismos de Transferência de Calor

Os principais mecanismos envolvidos são:

3.5.1.1 Troca Térmica por Convecção que Ocorre entre a Parede Interna do Reator e a Suspensão de Gás e Xisto

A taxa de transferência neste caso é dada pela relação

$$dq_{susp} = h_{susp}(\pi D_1 dz)(T_{w,ri} - T_g) , \quad (3.37)$$

onde

dq_{susp} = taxa de transferência de calor

h_{susp} = coeficiente de película para o sistema suspensão-parede

D_1 = diâmetro interno do reator

dz = altura infinitesimal para o cilindro de controle

$T_{w,ri}$ = temperatura da parede interna do reator

T_g = temperatura do gás de arraste.

Para o cálculo de h_{susp} , utilizou-se as equações propostas por DUSCHIN [9], assim

$$h_{susp} = 0.0332 \frac{\rho_g C_{pg} v_g}{Pr_G^{0.6} \sqrt{Re_G}} \left(\frac{T_g}{T_{w,ri}} \right)^{0.4} ; \text{ para } Re_G > 2300 \quad (3.38)$$

e

$$h_{susp} = 0.0296 \frac{\rho_g C_{pg} v_g}{Pr_G^{0.6} Re_G^{0.2}} \left[\frac{2}{\left(1 + \sqrt{\frac{T_{w,ri}}{T_g}} \right)} \right]^{1.6} ; \text{ para } Re_G \leq 2300 , \quad (3.39)$$

onde

Re_G = número adimensional de Reynolds para o gás = $\frac{\rho_g v_g D_1}{\mu_G}$

Pr_G = número adimensional de Prandtl para o gás de arraste = $\frac{C_{pg} \mu_G}{k_G}$

ρ_g = massa específica do gás

v_g = velocidade de escoamento do gás

μ_G = viscosidade do gás

C_{p_g} = calor específico do gás de arraste a pressão constante.

3.5.1.2 Troca Térmica por Convecção entre o Gás de Arraste e as Partículas

A taxa de transferência pode ser expressa por

$$dq_{GX} = h_{GX} dA_X (T_g - T_x) , \quad (3.40)$$

onde

dq_{GX} = taxa de transferência de calor entre gás e xisto

h_{GX} = coeficiente de transferência de calor por convecção entre gás e xisto

T_x = temperatura do xisto

dA_X = elemento diferencial de área das partículas existentes no volume cilíndrico de altura dz e diâmetro D_1 .

Área das partículas

Admite-se geometria esférica das partículas para determinar a área de cada partícula (πd_p^2) e o seu volume ($\frac{\pi d_p^3}{6}$). O número de partículas equivalente ao volume ocupado pelos sólidos no elemento cilíndrico de controle (\dot{n}_π) é

$$\dot{n}_\pi = \frac{A_T v_x (1 - \varepsilon)}{\left(\frac{\pi d_p^3}{6}\right)} , \quad (3.41)$$

daí a área total das partículas contidas no cilindro de altura dz fica

$$dA_X = \frac{\dot{n}_\pi dz}{v_x} (\pi d_p^2) . \quad (3.42)$$

Substituindo a equação 3.41 na 3.42 obtém-se

$$dA_X = \frac{6(1 - \varepsilon) A_T}{d_p} dz , \quad (3.43)$$

onde

A_T = área de escoamento do reator = $\frac{\pi D_1^2}{4}$

\dot{n}_π = número de partículas que atravessam o cilindro por segundo

v_x = velocidade do xisto

ε = porosidade

d_P = diâmetro médio das partículas.

O coeficiente de transferência de calor é determinado pela correlação

$$h_{GX} = \frac{k_G}{d_P} \left\{ 2 + \left[(0.4\sqrt{Re_P})^{1.25} + (f_{BV} Re_P^{0.82})^{1.25} \right]^{4/5} \right\}, \quad (3.44)$$

onde

k_G = condutividade do gás de arraste

Re_P = número adimensional de Reynolds relativo à partícula = $\frac{\rho_g(v_g - v_s)d_P}{\mu_G}$,

e ainda

$$f_{BV} = 0.308 - 74.625\beta_v \quad (3.45)$$

$$\beta_v = \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon}. \quad (3.46)$$

A correlação acima tem validade limitada para:

$$\begin{cases} 2.3 \cdot 10^{-4} \leq \beta_v \leq 10^{-2} \\ 20 \leq Re_P \leq 790. \end{cases} \quad (3.47)$$

3.5.1.3 Troca de Calor por Convecção entre o Gás de Aquecimento e o Reator

A taxa de calor transferida (dq_{CR}) por este mecanismo é expressa por

$$dq_{CR} = h_{CR}(\pi D_2 dz)(T_C - T_{w_r}), \quad (3.48)$$

onde

h_{CR} = coeficiente da transferência de calor entre gás de aquecimento e reator

D_2 = diâmetro externo do reator

T_C = temperatura do gás de aquecimento

T_{w_r} = temperatura da parede externa do reator.

De acordo com Mc Adams [37], o coeficiente de película para a parte interna do ânulo é calculado

No regime turbulento ($Re_c > 2100$) por

$$h_{CR} = h_{cc} \left(\frac{D_3}{D_2} \right)^{0.45} \left[1 + \left(\frac{D_3 - D_2}{Z} \right)^{0.7} \right] \quad ; \text{ para } \frac{Z}{D_{EQC}} < 80 \quad (3.49)$$

$$h_{CR} = h_{cc} \left(\frac{D_3}{D_2} \right)^{0.45} \quad ; \text{ para } \frac{Z}{D_{EQC}} \geq 80, \quad (3.50)$$

onde

Re_c = número adimensional de Reynolds para o gás de combustão = $\frac{\dot{m}_{comb} D_{EQC}}{A_{EC} \mu_C}$

D_3 = diâmetro interno do refratário

Z = cota ou altura desde a base do reator

D_{EQC} = diâmetro equivalente para a área de escoamento anular

\dot{m}_{comb} = vazão mássica do gás de aquecimento

A_{EC} = área de escoamento do ânulo = $\frac{\pi(D_3^2 - D_2^2)}{4}$

μ_C = viscosidade do gás de combustão

h_{cc} = é o coeficiente obtido pela equação 3.51 de Ditus-Boelter expressa como

$$h_{cc} = \frac{k_C}{D_{EQC}} 0.023 Re_c^{0.8} Pr_c^{0.4} , \quad (3.51)$$

onde

k_C = condutividade térmica do gás de aquecimento

Pr_c = número adimensional de Prandtl para o gás de aquecimento.

No regime laminar ($Re_c \leq 2100$) por

$$h_{CR} = \frac{k_C}{D_{EQC}} 1.86 \left(\frac{Re_c Pr_c D_{EQC}}{Z} \right)^{1/3} \left(\frac{\mu_C}{\mu_{CW}} \right)^{0.14} , \quad (3.52)$$

onde μ_{CW} = viscosidade do gás de combustão próximo à parede.

A equação 3.52 é conhecida como a equação de Sieder e Tate [53,29].

3.5.1.4 Troca de Calor por Convecção entre o Gás de Aquecimento e o Refratário

A taxa de calor transferida por este mecanismo é expressa por

$$dq_{CT} = h_{CT} (\pi D_3 dz) (T_C - T_{wT}) , \quad (3.53)$$

onde

dq_{CT} = taxa de transferência de calor entre gás de aquecimento e refratário

h_{CT} = coeficiente para a transferência de calor entre gás de aquecimento e refratário

T_{wT} = temperatura da parede interna do refratário

D_3 = diâmetro interno do refratário.

Seguindo a mesma referência do caso anterior [37], o coeficiente de película para a parte externa do ânulo fica

No regime turbulento

$$h_{CT} = h_{cc} \left(\frac{\mu_C}{\mu_{CW}} \right)^{0.14} \left[1 + \left(\frac{D_3 - D_2}{Z} \right)^{0.7} \right] \quad ; \text{ para } \frac{Z}{D_{EQC}} < 80 \quad (3.54)$$

$$h_{CT} = h_{cc} \left(\frac{\mu_C}{\mu_{CW}} \right)^{0.14} \quad ; \text{ para } \frac{Z}{D_{EQC}} \geq 80 \quad (3.55)$$

A expressão para h_{cc} é a mesma apresentada anteriormente (equação 3.51)

No regime laminar é possível considerar os coeficientes de película interno e externo do anulo como iguais, utilizando a mesma equação 3.52.

$$h_{CT} = h_{CR} \quad (3.56)$$

3.5.1.5 Perdas para o Ambiente

A estimativa da taxa de calor perdida pelo sistema para o ambiente é realizada através da equação

$$dq_{AMB} = h_{AMB} (\pi D_4 dz) (T_{w_i} - T_{\infty}) \quad , \quad (3.57)$$

onde

D_4 = diâmetro externo do refratário

T_{w_i} = temperatura de parede externa do refratário

T_{∞} = temperatura do ar ambiente

dq_{AMB} = taxa de transferência de calor para o ambiente

h_{AMB} = coeficiente para a perda de calor para o ambiente.

Para o cálculo do coeficiente de troca (h_{AMB}) considera-se quatro parcelas

$$h_{AMB} = h_{NAT}^{\infty} + h_{RAD}^{\infty} + h_{vento}^{\infty} + h_{outros}^{\infty} \quad , \quad (3.58)$$

sendo cada uma destas parcelas calculadas por:

Perda de calor pela convecção natural - h_{NAT}^{∞}

Para estimar o coeficiente de troca, utiliza-se uma equação deduzida para o caso de cilindros verticais [29]

$$h_{NAT}^{\infty} = 1.42 \cdot 2.39 \cdot 10^{-5} \left(\frac{T_{w_i} - T_{\infty}}{D_4/100} \right)^{1/4} \quad , \quad (3.59)$$

onde

D_4 = diâmetro externo do refratário

T_{w_i} = temperatura da parede externa do refratário

T_{∞} = temperatura do ar ambiente.

Perda por radiação para o meio ambiente - h_{RAD}^{∞}

O cálculo deste coeficiente é feito empregando a relação entre a lei de Stephan-Boltzman para a radiação e a lei de Newton para a convecção. Assim

$$h_{RAD}^{\infty} = \sigma \epsilon_{is} \frac{(T_{w_i}^4 - T_{\infty}^4)}{T_{w_i} - T_{\infty}}, \quad (3.60)$$

onde ϵ_{is} = emissividade do isolamento.

Perda de calor devido à convecção forçada causada pelo vento -

h_{vento}^{∞}

O reator está sujeito a ventos, pois está colocado em uma instalação aberta. A consideração sobre o valor da velocidade média do vento é uma estimativa, pois os valores exatos não puderam ser determinados. A correlação utilizada para o cálculo do coeficiente de troca é

$$\frac{h_{vento}^{\infty} D_4}{k_{ar}} = 0.0266 Re_{ar}^{0.805} Pr_{ar}^{1/3}, \quad (3.61)$$

onde

$$Re_{ar} = \frac{\rho_{ar} v_{\infty} D_4}{\mu_{ar}}$$

$D_4 = 0.4572$ m e as propriedades médias para o ar atmosférico [29]:

$$Pr_{ar} = 0.7$$

$$\rho_{ar} = 1.046 \frac{kg}{m^3}$$

$$\mu_{ar} = 2 \cdot 10^{-5} \frac{kg}{m.s}$$

$$k_{ar} = 0.03 \frac{W}{m.s.^{\circ}C}.$$

Substituindo as propriedades na equação 3.61, fica

$$h_{vento}^{\infty} = 0.51885 v_{\infty}^{0.805} \text{ em } \left(\frac{W}{m^2.^{\circ}C} \right), \quad (3.62)$$

ou ainda

$$h_{vento}^{\infty} = 1.2396 v_{\infty}^{0.805} \text{ em } \left(\frac{cal}{cm^2.s.^{\circ}C} \right). \quad (3.63)$$

Estipulando uma velocidade média para o vento de $v_{\infty} = 1.3$ m/s, daí

$$h_{vento}^{\infty} = 1.5311 \cdot 10^{-4} \left(\frac{cal}{cm^2.s.^{\circ}C} \right). \quad (3.64)$$

Outros fatores - h_{outros}^{∞}

Com a intenção de identificar a existência de outros fatores a influenciar na quantidade de calor perdida para o ambiente, foi introduzida esta parcela. Entede-se que é possível estar ocorrendo uma perda maior de calor devido, por exemplo, ao calor conduzido para as estruturas metálicas que seguram o reator, ou ainda por radiação entre o reator e outros equipamentos próximos.

Como é impraticável estimar valores baseando-se somente no equacionamento dos prováveis mecanismos, adota-se esta parcela como proporcional à perda por convecção natural e por radiação para o ambiente. Desta forma

$$h_{outros}^{\infty} \propto (h_{NAT}^{\infty} + h_{RAD}^{\infty}) , \quad (3.65)$$

daí o coeficiente global ficará como

$$h_{AMB} = COR_{amb}(h_{NAT}^{\infty} + h_{RAD}^{\infty}) + h_{vento}^{\infty} , \quad (3.66)$$

onde COR_{amb} = índice de correção para considerar outros pequenos efeitos.

3.5.1.6 Troca de Calor por Condução na Parede do Tubo Reator

O calor transferido por condução na parede anular pela direção radial (no sentido externo-interno) do elemento de controle, de altura dz , com a condutividade (k_R) constante, é expresso por

$$dq_{COND_R} = \frac{2\pi k_R dz}{\ln\left(\frac{D_2}{D_1}\right)} (T_{w,r} - T_{w,i}) , \quad (3.67)$$

onde

k_R = condutividade térmica do reator

$T_{w,i}$ = temperatura da parede interna do reator.

3.5.1.7 Troca de Calor por Condução na Parede do Tubo Refratário

De forma idêntica ao reator, somente admitindo que a condutividade varia com a temperatura segundo uma relação do tipo

$$k_{is} = a \cdot T^b , \quad (3.68)$$

onde

a e b são constantes

k_{is} = condutividade em $\left(\frac{\text{cal}}{\text{cm.s.}^\circ\text{C}}\right)$

T = temperatura do refratário (K).

O fluxo de calor conduzido em qualquer ponto é

$$\frac{dq_{REF}}{dA_{REF}} = k_{IS} \cdot \frac{\partial T}{\partial r} , \quad (3.69)$$

onde

r = raio

$A_{REF} = 2\pi r L$ = área de troca térmica

L = altura do elemento de volume anular = dz .

As condições de contorno para resolver a equação acima so:

$$\begin{cases} T = T_{w_T} \longrightarrow r = D_3/2 = r_i \\ T = T_{w_i} \longrightarrow r = D_4/2 = r_e. \end{cases}$$

Procedendo a integração

$$\int_{r_i}^{r_e} q_{REF} \frac{dr}{r} = - \int_{T_{w_T}}^{T_{w_i}} 2\pi L a T^b \cdot dT , \quad (3.70)$$

com $L = dz$

$$dq_{REF} = 2\pi dz \frac{a(T_{w_T}^{b+1} - T_{w_i}^{b+1})}{(b+1) \ln(D_4/D_3)} . \quad (3.71)$$

3.5.1.8 Troca de Calor por Radiação entre o Xisto e o Reator

Sendo os valores de ϵ_X e α_X determinados experimentalmente [46], a quantidade de calor recebida pelo xisto por radiação é de

$$dq_{RXR} = \frac{\sigma \left(T_{w_{ri}}^4 \frac{\epsilon_{Ri}}{\alpha_{Ri}} - T_x^4 \frac{\epsilon_X}{\alpha_X} \right)}{\frac{(1-\alpha_{Ri})}{\alpha_{Ri}\pi D_1} + \frac{1}{\pi D_1 F_{RX}} + \frac{(1-\alpha_X)}{\alpha_X A_X}} , \quad (3.72)$$

onde

σ = constante de Stephan-Boltzman

ϵ_{Ri} = emissividade da parede interna do reator

α_{Ri} = absortividade da parede interna do reator

ϵ_X = emissividade do xisto

α_X = absortividade do xisto

dq_{RXR} = taxa de transferência de calor por radiação entre a parede do reator e o xisto

A_X = área das partículas de xisto

F_{RX} = fator de forma para a radiação entre as superfícies do xisto e do reator

$T_{w,i}$ = temperatura da parede interna do reator

T_x = temperatura do xisto.

Na equação acima 3.72 apresenta-se um fator de forma para a radiação, com o objetivo de adequar os valores obtidos para as condições reais da operação. Por não existir um estudo mais aprofundado com relação a este fator, ele deve ser estimado e ajustado de forma a reproduzir os dados reais do problema.

É importante salientar que a quantidade de calor transferida por radiação para o xisto é significativa, em vista das altas temperaturas verificadas no processo. A questão da escolha das correlações para os coeficientes para a perda de calor da parede por convecção (h_{susp}) e por radiação estão intimamente ligados. Presume-se que, em vários trabalhos onde são apresentadas correlações empíricas para a determinação do h_{susp} , a parcela da radiação não foi expurgada; fato que enquanto dentro dos limites das correlações não oferece problema. Mas como as determinações experimentais, utilizadas nesses trabalhos para encontrar o coeficiente de troca (h_{susp}), são feitas a baixas temperaturas, conclui-se que estas relações não devem ser utilizadas no caso em questão. A escolha da expressão utilizada no programa baseia-se na publicação que cita o fato e recomenda um procedimento para os cálculos a altas temperaturas [9].

3.5.1.9 Troca por Radiação entre o Gás de Aquecimento, o Refratário e o Tubo Reator

O modelo da radiação para o lado onde escoar o gás de combustão é deduzido considerando as paredes do reator e do refratário como opacas, ou seja, só refletem e absorvem a energia radiante incidente, e ainda que o gás não reflete a radiação. Desta forma

$$\begin{cases} \rho_{parede} + \alpha_{parede} = 1 \\ \tau_{parede} = 0 \end{cases} \quad (3.73)$$

$$\begin{cases} \alpha_{gas} + \tau_{gas} = 1 \\ \rho_{gas} = 0 \end{cases} \quad (3.74)$$

onde

ρ = refletividade

τ = transmissividade

α = absorptividade.

Pela definição de radiosidade [29]:

Radiosidade = Energia radiante emitida + Energia radiante

refletida para as placas $\rightarrow \rho_i = (1 - \alpha_i)$

ou transmitida pelo gas $\rightarrow \tau_i = (1 - \alpha_i)$

ou ainda

$$J_i = \epsilon_i E n_i + (1 - \alpha_i) G_i , \quad (3.75)$$

onde

J_i = radiosidade do elemento i (placa ou o gás)

ϵ_i = emissividade do elemento i (placa ou o gás)

α_i = absorptividade do elemento i (placa ou o gás)

$E n_i$ = poder emissivo do corpo negro à mesma temperatura do elemento i $= \sigma T_i^4$

G_i = Irradiação, ou seja, a energia radiante incidente.

Assim tem-se

$$G_i = \frac{J_i - \epsilon_i E n_i}{(1 - \alpha_i)} . \quad (3.76)$$

Definindo a taxa de perda de energia radiante num corpo qualquer (placa ou gás) como

$$\frac{q_i}{A_i} = \epsilon_i E n_i - \alpha_i G_i , \quad (3.77)$$

onde A_i = área de troca térmica.

Substituindo a equação 3.76 em 3.77, tem-se a taxa de perda de energia radiante num corpo qualquer i (placa ou gás)

$$\frac{q_i}{A_i} = \frac{\alpha_i}{(1 - \alpha_i)} \left[\frac{\epsilon_i}{\alpha_i} E n_i - J_i \right] . \quad (3.78)$$

Fazendo uma analogia com circuitos elétricos, a representação do esquema equivalente para a troca de calor por radiação, de acordo com a equação 3.78, seria como o da figura 3.2.

A taxa de transferência de energia radiante entre dois corpos i e j é calculada pela expressão

$$q_{ij} = F_{ij} A_i (J_i - J_j) , \quad (3.79)$$

onde F_{ij} = fator geométrico para a radiação entre os corpos i e j.

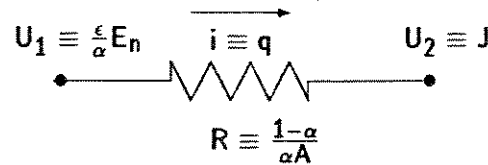


Figura 3.2: Analogia da radiação com circuitos elétricos



Figura 3.3: Analogia para a equação (3.79)

A equação 3.79 também pode ser representada por uma resistência elétrica como na figura 3.3.

Aplicando as equações genéricas 3.76 e 3.79 para o sistema composto pela parede externa do reator (R), mais a parede interna do refratário (T) e o gás de aquecimento (C), tem-se

$$\frac{q_R}{A_R} = \frac{\alpha_R}{(1 - \alpha_R)} \left[\frac{\epsilon_R}{\alpha_R} E n_R - J_R \right] \quad (3.80)$$

$$\frac{q_T}{A_T} = \frac{\alpha_T}{(1 - \alpha_T)} \left[\frac{\epsilon_T}{\alpha_T} E n_T - J_T \right] \quad (3.81)$$

$$\frac{q_C}{A_C} = \frac{\alpha_C}{(1 - \alpha_C)} \left[\frac{\epsilon_C}{\alpha_C} E n_C - J_C \right] \quad (3.82)$$

$$q_{RT} = F_{RT} A_R (J_R - J_T) \quad (3.83)$$

$$q_{RC} = F_{RC} A_R (J_R - J_C) \quad (3.84)$$

$$q_{TC} = F_{TC} A_T (J_T - J_C) \quad , \quad (3.85)$$

onde

ϵ_R = emissividade da parede externa do reator = 0.83

ϵ_T = emissividade da parede interna do refratário = 0.8

ϵ_C = emissividade do gás de combustão

α_R = absortividade da parede externa do reator = 0.78

α_T = absortividade da parede interna do refratário = 0.8

α_C = absortividade do gás de combustão.

O esquema elétrico equivalente para a troca de calor por radiação entre os três corpos com as devidas resistências está representado na figura 3.4.

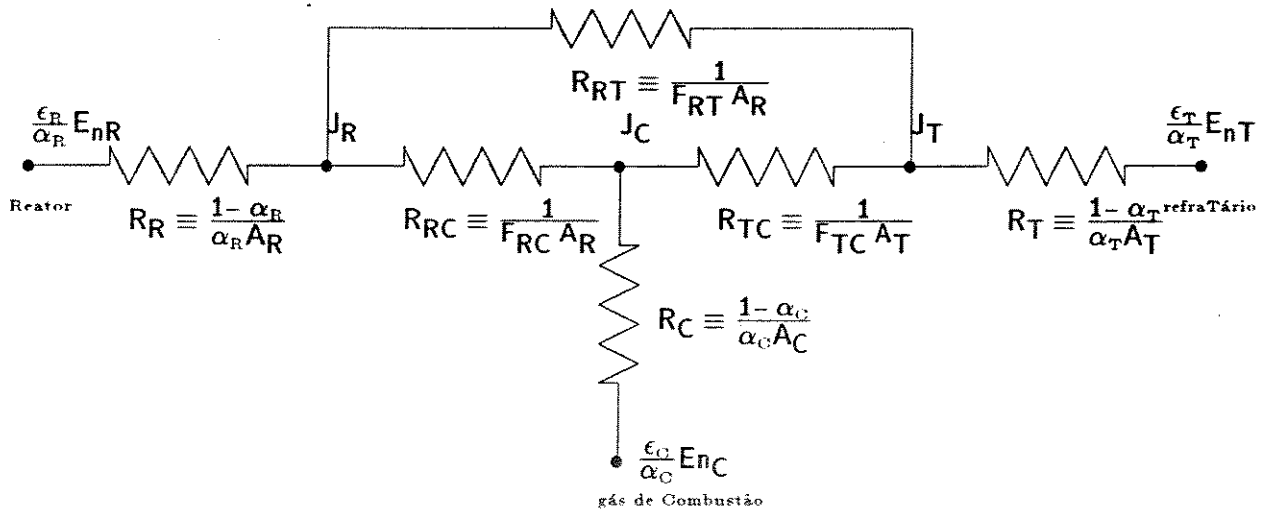


Figura 3.4: Desenho esquemático da interação pela radiação no lado do aquecimento

As resistências representadas na figura 3.4 para o esquema com uma ligação em forma de triângulo, de acordo com as equações 3.76 e 3.79 para a radiação no lado do aquecimento, são:

$$R_R = \frac{1 - \alpha_R}{\alpha_R A_R} \quad (3.86)$$

$$R_T = \frac{1 - \alpha_T}{\alpha_T A_T} \quad (3.87)$$

$$R_C = \frac{1 - \alpha_C}{\alpha_C A_C} \quad (3.88)$$

$$R_{RT} = \frac{1}{F_{RT} A_R} \quad (3.89)$$

$$R_{RC} = \frac{1}{F_{RC} A_R} \quad (3.90)$$

$$R_{TC} = \frac{1}{F_{TC} A_T} \quad (3.91)$$

A área (A_C) para troca térmica do gás é considerada como a área lateral total do anel, ou seja

$$A_C = A_R + A_T , \quad (3.92)$$

assim, aceitam-se ainda as seguintes considerações a serem admitidas para o cálculo das propriedades envolvidas

$$lmr = 4 \frac{V}{A} = D_3 - D_2 \quad (3.93)$$

$$\overline{T_W} = \frac{T_{w_r} + T_{w_T}}{2} . \quad (3.94)$$

Com a intenção de tornar o esquema da figura 3.4 mais simples, procede-se a transformação da ligação em triângulo das resistências R_{RT} , R_{RC} e R_{TC} para a conformação em estrela. A ilustração do esquema resultante é a figura 3.5, e considerando que $F_{RT} = F_{RC} = F_{TC} = 1.0$ as resistências da ligação em estrela são

$$R_{RE} = \frac{\frac{1}{A_R A_C}}{\frac{1}{A_R} + \frac{1}{A_T} + \frac{1}{A_R + A_T}} = \frac{1}{A_R + \frac{A_R^2}{A_T} + \frac{A_R^2}{A_R + A_T}} \quad (3.95)$$

$$R_{TE} = \frac{1}{A_T + A_R + \frac{A_R A_T}{A_R + A_T}} \quad (3.96)$$

$$R_{CE} = \frac{1}{A_T + A_R + \frac{A_R A_T}{A_R + A_T}} . \quad (3.97)$$

No nó J_0 a soma dos fluxos de calor é igual a zero, ou seja

$$i_R + i_T + i_C = 0 , \quad (3.98)$$

onde

i_R = fluxo de calor proveniente do ramo que interliga o nó central (J_0) com a parede do reator

i_T = fluxo de calor proveniente do ramo que interliga o nó central (J_0) com a parede do refratário

i_C = fluxo de calor proveniente do ramo que interliga o nó central (J_0) com a massa de gás quente.

Assim, sabendo que a corrente que passa por um ramo é dada por $i = \frac{\Delta U}{R}$, no nó J_0 tem-se

$$\frac{\left(\frac{\epsilon_C}{\alpha_C} En_C - J_0\right)}{R_C + R_{CE}} + \frac{\left(\frac{\epsilon_R}{\alpha_R} En_R - J_0\right)}{R_R + R_{RE}} + \frac{\left(\frac{\epsilon_T}{\alpha_T} En_T - J_0\right)}{R_T + R_{TE}} = 0 , \quad (3.99)$$

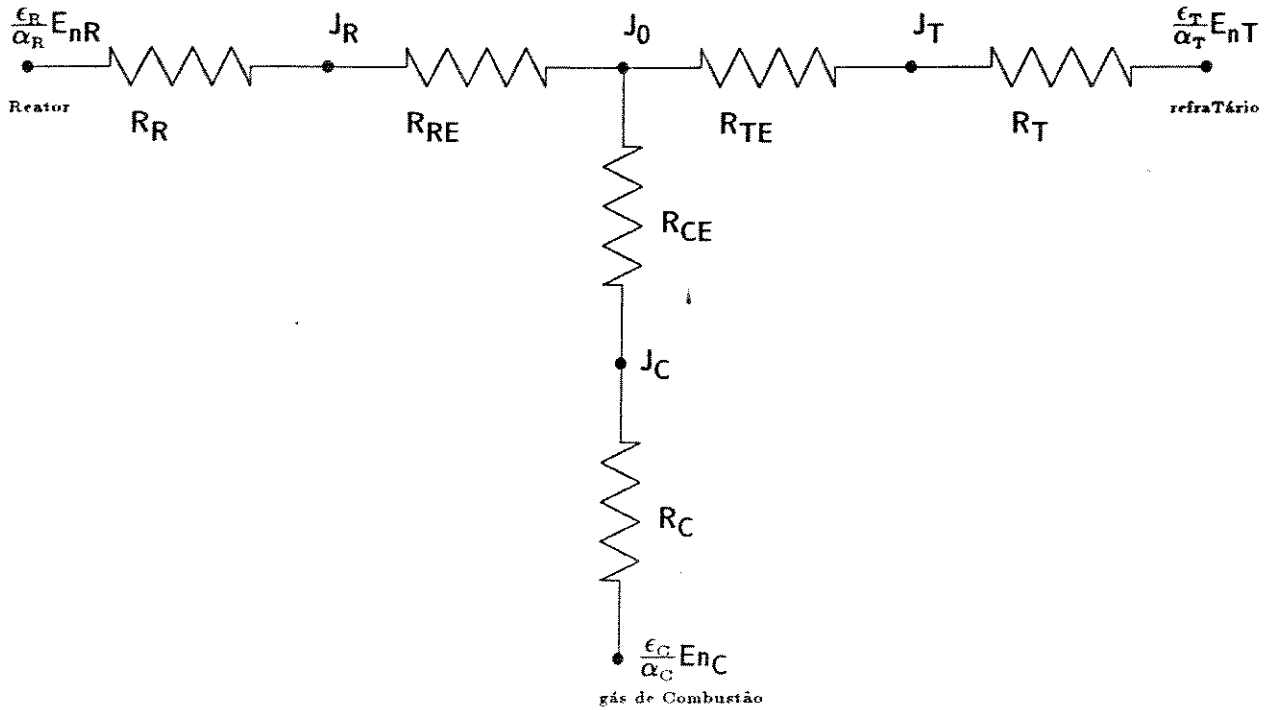


Figura 3.5: Desenho esquemático da transformação para ligação em forma de estrela onde J_0 = corresponde ao potencial de transferência no nó central da ligação em estrela destas resistências. E isolando J_0 , chega-se a expressão

$$J_0 = \frac{\left[\frac{\epsilon_C En_C}{\alpha_C(R_C + R_{CE})} + \frac{\epsilon_R En_R}{\alpha_R(R_R + R_{RE})} + \frac{\epsilon_T En_T}{\alpha_T(R_T + R_{TE})} \right]}{\left[\frac{1}{(R_C + R_{CE})} + \frac{1}{(R_R + R_{RE})} + \frac{1}{(R_T + R_{TE})} \right]} \quad (3.100)$$

Finalmente, as taxas líquidas de perda de energia radiante para a parede do reator, do refratário e do gás de combustão são respectivamente

$$q_{RAD_R} = \frac{En_R \frac{\epsilon_R}{\alpha_R} - J_0}{R_R + R_{Re}} \quad (3.101)$$

$$q_{RAD_T} = \frac{En_T \frac{\epsilon_T}{\alpha_T} - J_0}{R_T + R_{Te}} \quad (3.102)$$

$$q_{RAD_C} = \frac{En_C \frac{\epsilon_C}{\alpha_C} - J_0}{R_C + R_{Ce}} \quad (3.103)$$

3.5.1.10 Outros Efeitos Térmicos

Existem ainda outros fatores igualmente importantes a serem considerados nos balanços de energia

Variação da entalpia do xisto

A taxa de variação da entalpia das partículas ao longo do reator corresponde ao termo

$$\frac{d(\dot{m}_x C_{p_x} T_x)}{dz}, \quad (3.104)$$

onde

C_{p_x} = calor específico do xisto

\dot{m}_x = vazão mássica do xisto.

Variação da entalpia do gás de arraste

A taxa de variação da entalpia do gás de reciclo ao longo do reator corresponde ao termo

$$\frac{d(\dot{m}_g C_{p_g} T_g)}{dz}, \quad (3.105)$$

onde

C_{p_g} = calor específico do gás de arraste

\dot{m}_g = vazão mássica do gás de arraste.

Variação da entalpia do gás de aquecimento

A taxa de variação da entalpia do gás de combustão equivale ao termo

$$\frac{d(\dot{m}_{comb} C_{p_G} T_G)}{dz}, \quad (3.106)$$

onde

C_{p_G} = calor específico do gás de aquecimento

\dot{m}_{comb} = vazão mássica do gás de aquecimento.

Calor consumido pela reação

A quantidade de calor envolvida na pirólise do xisto é considerada no termo

$$\frac{d(\dot{m}_{org})}{dz} \Delta H_r, \quad (3.107)$$

onde

ΔH_r = calor de reação

\dot{m}_{org} = vazão mássica equivalente da matéria orgânica no xisto.

Calor utilizado na secagem do xisto

A evaporação da umidade contida inicialmente nas partículas consome uma quantidade de energia que é dada por

$$\frac{d(\dot{m}_{umi})}{dz} H_{fg_{H_2O}} , \quad (3.108)$$

onde

$H_{fg_{H_2O}}$ = calor latente de vaporização da água

\dot{m}_{umi} = vazão mássica da umidade contida no xisto.

Energia carregada com os produtos

O calor necessário para equalizar a temperatura dos produtos, ou da umidade, que saem do xisto a uma temperatura diferente da do gás é considerada no termo

$$\frac{d(\dot{m}_{org})}{dz} C_{pg} (T_g - T_x) - \frac{d(\dot{m}_{umi})}{dz} C_{p_{vap}} (T_g - T_x) , \quad (3.109)$$

onde $C_{p_{vap}}$ = calor específico do vapor d'água.

3.5.2 Equações dos Balanços de Energia

Pelo balanço na fase sólida (considerando o conjunto de partículas no elemento de volume):

$$\frac{d(\dot{m}_x C_{px} T_x)}{dz} - \frac{d(\dot{m}_{org})}{dz} \Delta H_r - \frac{d(\dot{m}_{umi})}{dz} H_{fg_{H_2O}} - h_{GX} \frac{6(1-\epsilon) A_T}{d_P} (T_G - T_X) - \frac{\sigma (T_{w,i}^4 \frac{\epsilon_{Ri}}{\alpha_{Ri}} - T_x^4 \frac{\epsilon_X}{\alpha_X})}{\frac{(1-\alpha_{Ri})}{\alpha_{Ri} \pi D_1} + \frac{1}{\pi D_1 F_{RX}} + \frac{(1-\alpha_X)}{\alpha_X A_X}} = 0 . \quad (3.110)$$

Balanço de Energia no gás de arraste:

$$\frac{d(\dot{m}_g C_{pg} T_g)}{dz} - \frac{d(\dot{m}_{org})}{dz} C_{pg} (T_g - T_x) - \frac{d(\dot{m}_{umi})}{dz} C_{p_{vap}} (T_g - T_x) + h_{GX} \frac{6(1-\epsilon) A_T}{d_P} (T_G - T_X) - h_{sus} \pi D_1 (T_{w,i} - T_g) = 0 \quad (3.111)$$

Balanço no gás de aquecimento:

$$\frac{d(\dot{m}_{comb} C_{pC} T_C)}{dz} + h_{CT} \pi D_3 (T_C - T_{w_T}) + h_{CR} \pi D_2 (T_C - T_{w_r}) + q_{RAD_C} = 0 . \quad (3.112)$$

Para as equações de balanço serem avaliadas é preciso encontrar os valores de T_{w_r} , T_{w_T} , $T_{w,i}$ e também a taxa de transferência líquida de calor por radiação do gás

de aquecimento. O modelo para a radiação no lado onde escoa o gás de combustão foi deduzido considerando as paredes do reator como superfícies que só refletem e absorvem a energia radiante incidente (seção 3.5.1.9), e que o gás de combustão só transmite e absorve a energia radiante que nele incide. A taxa líquida de perda de energia radiante do gás de combustão é dada pela equação 3.103.

Com o fim de encontrar os valores de T_{w_r} , T_{w_T} , $T_{w_{ri}}$ e T_{w_i} procede-se o balanço nas paredes do reator e do tubo externo (refratário).

Balanço na parede do reator:

$$\frac{2\pi k_R}{\ln\left(\frac{D_2}{D_1}\right)}(T_{w_r} - T_{w_{ri}}) = h_{CR}\pi D_2(T_C - T_{w_r}) - q_{RAD_R} \quad , \quad (3.113)$$

isolando a temperatura da parede interna

$$T_{w_{ri}} = T_{w_r} - \frac{h_{CR}\pi D_2(T_C - T_{w_r}) - q_{RAD_R}}{2\pi K_R} \ln\left(\frac{D_2}{D_1}\right) \quad . \quad (3.114)$$

Considerando o volume anular da parede do reator de altura dz como o elemento diferencial de controle

$$h_{CR}\pi D_2(T_C - T_{w_r}) - q_{RAD_R} - h_{sup}\pi D_1(T_{w_{ri}} - T_g) - \frac{\sigma(T_{w_{ri}}^4 \frac{\epsilon_{Ri}}{\alpha_{Ri}} - T_g^4 \frac{\epsilon_X}{\alpha_X})}{\frac{(1-\alpha_{Ri})}{\alpha_{Ri}\pi D_1} + \frac{1}{\pi D_1 F_{RX}} + \frac{(1-\alpha_X)}{\alpha_X A_X}} = 0 \quad . \quad (3.115)$$

Para achar o valor da temperatura na parede do refratário em contato com o ambiente recorre-se ao balanço na superfície interna do tubo refratário, sendo a condutividade do refratário como $K_{is} = aT^b$,

$$T_{w_i} = \left[\frac{q_{RAD_T} - h_{CT}\pi D_3(T_C - T_{w_T}) + \frac{2\pi a}{(1+b)\ln\left(\frac{D_4}{D_3}\right)} T_{w_T}^{(1+b)}}{\frac{2\pi a}{(1+b)\ln\left(\frac{D_4}{D_3}\right)}} \right]^{\frac{1}{1+b}} \quad , \quad (3.116)$$

A equação do balanço de energia na superfície externa do tubo refratário é

$$\frac{2\pi a}{(1+b)\ln\left(\frac{D_4}{D_3}\right)}(T_{w_T}^{1+b} - T_{w_i}^{1+b}) - h_{AMB}\pi D_4(T_{w_i} - T_\infty) = 0 \quad . \quad (3.117)$$

Para encontrar, finalmente, os valores desejados deve-se resolver o sistema de equações algébricas (equações 3.114, 3.115, 3.116 e 3.117) em T_{w_r} , T_{w_T} , $T_{w_{ri}}$ e T_{w_i} .

3.6 Propriedades Físicas

O sucesso das simulações depende certamente da qualidade dos dados, especialmente aqueles que se referem às propriedades físicas. Nesta questão procura-se não economizar esforços para obter dados que sejam representativos, mas que ao mesmo tempo não gerem maiores complicações nos cálculos. A rapidez nos cálculos das propriedades é um fator importante a ser levado em consideração. Portanto, algumas propriedades seguem princípios e leis já consagradas para serem relacionadas com outras variáveis e por isto têm maior credibilidade. Outras, no entanto, são correlacionadas a partir de dados disponíveis.

3.6.1 Xisto

Todos os dados sobre o xisto foram obtidos experimentalmente na Petrobrás, o que lhes dá maior confiabilidade. Salienta-se, porém, que um problema frequentemente encontrado nesta fase, é a diversidade de valores encontrados em função das diferenças entre amostras oriundas de pontos diferentes da mina.

As propriedades do xisto que são utilizadas no programa são:

3.6.1.1 Massa Específica do Xisto

Para o xisto seco a massa específica depende do teor de orgânicos [46] conforme a equação

$$(\rho_{x_0})_{seco} = 2.29(1 - Y_0) + 0.8Y_0 , \quad (3.118)$$

onde

Y_0 = teor inicial de material orgânico (Querogênio e Betume) no xisto

$(\rho_{x_0})_{seco}$ = massa específica do xisto seco na entrada do reator em $\frac{g}{cm^3}$.

Considerando a umidade inicial (Φ_0),

$$\rho_{x_0} = \frac{(\rho_{x_0})_{seco}}{(1 - \Phi_0)} . \quad (3.119)$$

Finalmente a densidade do xisto, para um ponto qualquer do reator, onde as condições de umidade da partícula (Φ) ou o teor de orgânicos (Y) é diferente do inicial (Y_0)

$$\rho_x = \rho_{x_0}(1 - \Phi_0) \frac{1 - Y_0 X}{1 - \Phi} . \quad (3.120)$$

Desta forma, a variação de ρ_x ao longo do reator pode ser expressa segundo a equação

$$\frac{d\rho_x}{dz} = -\rho_{x_0}(1 - \Phi_0)Y_0\frac{dX}{dz} , \quad (3.121)$$

válida para a zona de reação; e

$$\frac{d\rho_x}{dz} = \rho_{x_0} \frac{(1 - \Phi_0)}{(1 - \Phi)^2} \frac{d\Phi}{dz} , \quad (3.122)$$

que deve ser usada somente na zona da secagem.

Na equação 3.120 está embutida a consideração de que o xisto ao perder sua umidade ou seus orgânicos, perde massa mas mantém seu volume inalterado. Assim a densidade diminui, obrigatoriamente, ao percorrer o reator.

3.6.1.2 Calor Específico do Xisto

Testes experimentais [46] mostram que o calor específico do xisto pode ser representado como uma função do teor de orgânicos e da temperatura do xisto. A correlação proposta para o xisto seco é

$$(C_{p_x})_s = 0.172 + (0.1206 + 0.8179Y) \cdot 10^{-3}T_x , \quad (3.123)$$

onde

Y = teor de orgânicos

T_x = temperatura do xisto

$(C_{p_x})_s$ = calor específico do xisto seco à pressão constante $\left(\frac{\text{cal}}{\text{g}^\circ\text{C}}\right)$.

Para o xisto úmido, admitindo como de $1 \text{ cal/g}^\circ\text{C}$ o calor específico da água

$$C_{p_x} = (C_{p_x})_s(1 - \Phi) + \Phi , \quad (3.124)$$

onde Φ = umidade no xisto.

No desenvolvimento das equações do modelo surge a necessidade do valor da derivada do calor específico em relação a z . Usando as expressões 3.124 e 3.123 chega-se a

$$\begin{aligned} \frac{dC_{p_x}}{dz} = & \left[(0.1206 + 0.8179Y) \cdot 10^{-3} \frac{dT_x}{dz} + 0.8179 \cdot 10^{-3} T_x Y_0 (Y_0 - 1) \frac{dX}{dz} \right] \\ & (1 - \Phi) + (1 - (C_{p_x})_s) \frac{d\Phi}{dz} . \end{aligned} \quad (3.125)$$

3.6.1.3 Emissividade e Absortividade do Xisto

Assim como outros dados para a radiação, ϵ_X e α_X foram determinados experimentalmente pela Coppetec [46]. Assim para o xisto cru

$$\epsilon_X = 0.89 \quad (3.126)$$

$$\alpha_X = 0.88 \quad (3.127)$$

3.6.2 Gás de Arraste

Nos estudos iniciais sobre o processo Plasol o gás usado para arrastar o xisto era o vapor d'água superaquecido. Posteriormente passou-se a utilizar o próprio gás formado na pirólise. O reciclo sofre primeiro a separação dos sólidos na saída do reator, que é o xisto retornado. Em seguida é feita a separação do óleo produzido; e por fim em um condensador retira-se o excesso de água, que é proveniente da umidade do xisto.

3.6.2.1 Composição do Gás de Arraste

Ao entrar no reator, o gás de arraste tem a composição conforme a penúltima coluna da tabela 4.8. A medida que escoa pelo reator, esta composição pode alterar em função tanto da evaporação da umidade do xisto como também dos produtos gasosos da pirólise. A composição deste produto gasoso foi obtida considerando a proporção de óleo e gás formado, que é fornecida através do ensaio Fischer. Uma análise cromatográfica fornece os dados sobre o gás produzido. A coluna da direita da tabela 4.8 mostra os valores para o produto gasoso (óleo + gás).

Desta maneira, para calcular a composição do gás de arraste em um dado ponto do reator, considerando a secagem e a pirólise usa-se:

$$\dot{n}_{g0} = \frac{\dot{m}_{x0}}{\overline{M}_{G0}} \quad (3.128)$$

onde

\dot{n}_{g0} = vazão molar de gás de arraste na entrada do reator

\dot{m}_{x0} = vazão mássica do gás

\overline{M}_{G0} = massa molecular média do gás introduzido;

$$\dot{n}_{EV} = \left(\Phi_0 \dot{m}_{x0} - \frac{\Phi \rho_x}{(1 - \Phi)} v_x (1 - \epsilon) A_T \right) \quad (3.129)$$

onde

\dot{n}_{EV} = vazão molar de vapor produzido na secagem

\dot{m}_{x_0} = vazão mássica de xisto alimentado

Φ = umidade do xisto

Φ_0 = umidade inicial do xisto

v_x = velocidade do xisto

ε = porosidade

A_T = área transversal do reator;

$$\dot{n}_P = \left(\frac{(1 - \Phi_0) \dot{m}_{x_0} Y_0 X}{\overline{M}_{pro}} \right) , \quad (3.130)$$

onde

Y_0 = teor inicial de orgânicos no xisto

\dot{n}_P = vazão molar de produtos da pirólise

X = conversão

\overline{M}_{pro} = massa molecular média dos produtos da pirólise.

Recompondo as frações molares do gás de arraste obtém-se

$$y_i = \frac{y_i^{gas} \dot{n}_{g_0} + y_i^{pro} \dot{n}_P}{\dot{n}_{g_0} + \dot{n}_P + \dot{n}_{EV}} , \quad (3.131)$$

onde

i = é qualquer componente do gás com exceção da água

y_i = fração molar para o componente i na fase fluida

y_i^{gas} = fração molar do componente i para o gás na entrada do reator

y_i^{pro} = fração molar do componente i para o gás produzido na pirólise.

Para encontrar a fração molar da água no gás usa-se

$$y_{H_2O} = \frac{y_{H_2O}^{gas} \dot{n}_{g_0} + y_{H_2O}^{pro} \dot{n}_P + \dot{n}_{EV}}{\dot{n}_{g_0} + \dot{n}_P + \dot{n}_{EV}} . \quad (3.132)$$

Lembrando que $\dot{n}_{EV} = 0$ até que comece a secagem e $\dot{n}_P = 0$ até a pirólise iniciar.

3.6.2.2 Massa Molecular Média

Postulando-se que o gás é uma mistura ideal de gases também ideais daí

$$\overline{M}_G = \sum_{i=1}^{nc} y_i M_i , \quad (3.133)$$

onde

\overline{M}_G = massa molecular média do gás de arraste

M_i = massa molecular do componente i

nc = número de componentes constituintes (24).

3.6.2.3 Massa Específica

Usando as mesmas considerações para a massa molecular média,

$$\rho_g = \frac{p\overline{M}_G}{RT_G} \quad (3.134)$$

Diferenciando a equação 3.134 em relação a z , considerando os diversos termos, chega-se a

$$\frac{d\rho_g}{dz} = \frac{1}{RT_g} \left\{ p \left[\frac{d(\overline{M}_G)}{dz} \right] + \overline{M}_G \frac{dp}{dz} - \frac{p\overline{M}_G}{T_g} \frac{dT_g}{dz} \right\} \quad (3.135)$$

A variação da massa molecular média do gás ao longo do reator é obtida a partir das equações 3.131, 3.132 e 3.133, resultando

$$\begin{aligned} \frac{d(\overline{M}_G)}{dz} = & \left[(\dot{n}_{g0} \overline{M}_{G0} + \dot{n}_P \overline{M}_{Pro} + \dot{n}_{EV} 18) A_T \left(\frac{1}{\overline{M}_{Pro}} \frac{d\dot{m}_{org}}{dz} + \frac{1}{18} \frac{d\dot{m}_{umi}}{dz} \right) \right. \\ & \left. - (\dot{n}_{g0} + \dot{n}_P + \dot{n}_{EV}) A_T \left(\frac{d\dot{m}_{org}}{dz} + \frac{d\dot{m}_{umi}}{dz} \right) \right] \frac{1}{(\dot{n}_{g0} + \dot{n}_P + \dot{n}_{EV})^2} \end{aligned} \quad (3.136)$$

onde

\overline{M}_G = massa molecular média do gás inicialmente introduzido

\dot{m}_{umi} = vazão mássica da umidade contida no xisto

\dot{m}_{org} = vazão mássica equivalente da matéria orgânica no xisto.

3.6.2.4 Calor Específico a Pressão Constante [48,64]

A representação para o calor específico de cada componente é feita por uma função polinomial na forma

$$C_{p,i} = (A_i + B_i T_G + C_i T_G^2 + D_i T_G^3) \frac{1}{M_i} \quad (3.137)$$

onde

$C_{p,i}$ = calor específico para o componente i

M_i = massa molecular do componente i

A_i , B_i , C_i e D_i = constantes da equação 3.137 para o componente i (base molar), os valores constam na tabela 4.8 [48]

T_g = temperatura do gás em K.

Usando uma regra simples de mistura, e transformando para calor específico

$$\overline{A_{Cp}} = \frac{\sum_{i=1}^{nc} y_i A_i}{M_G} \quad (3.138)$$

$$\overline{B_{Cp}} = \frac{\sum_{i=1}^{nc} y_i B_i}{M_G} \quad (3.139)$$

$$\overline{C_{Cp}} = \frac{\sum_{i=1}^{nc} y_i C_i}{M_G} \quad (3.140)$$

$$\overline{D_{Cp}} = \frac{\sum_{i=1}^{nc} y_i D_i}{M_G} \quad (3.141)$$

$$C_{p_g} = \overline{A_{Cp}} + \overline{B_{Cp}}T_G + \overline{C_{Cp}}T_G^2 + \overline{D_{Cp}}T_G^3 \quad (3.142)$$

Facilmente pode ser obtida a expressão da derivada,

$$\frac{dC_{p_g}}{dz} = \overline{B_{Cp}} + \overline{C_{Cp}}T_G + \overline{D_{Cp}}T_G^2 \quad (3.143)$$

3.6.2.5 Viscosidade do Gás

Utilizando a modificação de Bromley e Wilke [45] do método teórico de Hirschfelder, para cálculo das viscosidades de gases puros e vapores a baixas pressões, obtém-se bons resultados (3 % de erro médio e 15 % de máximo) desde que o volume crítico seja conhecido ou calculado precisamente.

$$\mu_i^0 = 33.3 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{M_i T_{CR,i}}}{V_{CR,i}^{2/3}} f(1.33T_R) \quad (3.144)$$

onde

μ_i^0 = viscosidade do componente i puro

M_i = massa molecular de i

$T_{CR,i}$ = temperatura crítica

$V_{CR,i}$ = volume crítico ($cm^3/gmol$).

A variação da função $[f(1.33T_R)]$ pode ser representada analiticamente com boa precisão com a equação de Scheibel [45] que é aplicável quando $T_R > 0.3$.

$$f(1.33T_R) = 1.058T_{R,i}^{0.645} - \frac{0.261}{(1.9T_{R,i})^{0.39087 \ln(1.9T_{R,i})}} \quad (3.145)$$

onde T_{R_i} = temperatura reduzida.

A viscosidade de misturas gasosas pode ser calculada, simplificada, pela viscosidade dos componentes através da relação

$$\mu_G = \frac{\sum_{i=1}^{nc} y_i \mu_i^0 \sqrt{M_i}}{\sum_{i=1}^{nc} y_i \sqrt{M_i}} \quad (3.146)$$

Segundo a literatura [45], esta equação foi testada para misturas de hidrocarbonetos, representando os dados com cerca de 2 % de erro.

3.6.2.6 Condutividade Térmica

A condutividade térmica de gases, a baixas pressões pode ser estimada pela aproximação de Eucken [45].

$$k_i = \mu_i \cdot \left(Cp_i + \frac{2.48}{M_i} \right) \quad (3.147)$$

onde

μ_i = viscosidade do gás

Cp_i = calor específico do gás

M_i = massa molecular do componente i

k_i = condutividade térmica.

Sendo os valores da viscosidade e calor específico conhecidos precisamente, pode-se esperar, da equação 3.147, erros médios da ordem de 5, 8 e 13 % para moléculas lineares e apolares, não-lineares e apolares, e lineares e polares, respectivamente. Erros máximos de 25 a 30 % podem ser detectados.

Para misturas gasosas, simplificada, é possível estimar a condutividade (k_G) através da expressão

$$k_G = \frac{\sum_{i=1}^{nc} y_i k_i \sqrt{M_i}}{\sum_{i=1}^{nc} y_i \sqrt{M_i}} \quad (3.148)$$

Segundo a literatura [45], os erros médio e máximo para esta relação são respectivamente 2.7 e 9.5 %.

3.6.3 Gás de Aquecimento

O calor fornecido ao reator para elevar a temperatura dos reagentes até ocorrer a pirólise provém da combustão realizada num queimador localizado na base do reator. Os gases formados na combustão, escoam pelo espaço anular entre o reator e o refratário, transmitindo calor por convecção e radiação. Assim é necessário saber as

propriedades físicas deste gás para poder estimar o calor transferido. O cálculo das propriedades segue as mesmas equações que para o gás de arraste, porém o gás de combustão tem apenas quatro constituintes. A composição do gás foi estimada via cálculos estequiométricos, e posteriormente uma análise cromatográfica [46] confirmou os valores que estão na tabela 4.8 juntamente com os outros dados necessários.

Observou-se no cálculo do calor específico dos fumos, quando a temperatura é alta, um erro maior da correlação utilizada. Para corrigir este erro, existe uma expressão em forma polinomial [46] para temperaturas acima de 773 K; que fornece o fator a multiplicar o valor encontrado pelas equações 3.137 e 3.142 para o gás de aquecimento.

$$f_{Cp} = 1.06964 - 3.928 \cdot 10^{-4}T_C + 5.84357 \cdot 10^{-7}T_C^2 - 1.20233 \cdot 10^{-10}T_C^3 - 1.41947 \cdot 10^{-13}T_C^4 + 5.90108 \cdot 10^{-17}T_C^5 \quad (3.149)$$

3.6.3.1 Dados para a Radiação

No cálculo da fração de calor cedida pelos fumos através da radiação, são necessários dados sobre a emissividade e a absortividade. Para o caso de gases provenientes da combustão, apenas dois componentes têm real importância na radiação, o dióxido de carbono e a água. Naturalmente, o cálculo da emissividade e absortividade para a mistura necessitará dos valores individuais destas propriedades físicas para cada fração.

Emissividade

Segundo Mikheyev [40], calcula-se a emissividade de um gás onde estão presentes tanto o CO_2 como H_2O pela expressão

$$\epsilon_C = \epsilon_{CO_2} + C_{H_2O} \cdot \epsilon_{H_2O} - \Delta\epsilon_C \quad , \quad (3.150)$$

onde

ϵ_C = emissividade do gás

ϵ_{CO_2} = emissividade do dióxido de carbono

ϵ_{H_2O} = emissividade do vapor de água

C_{H_2O} = fator de correção para a emissividade do vapor de água de acordo com a pressão parcial

$\Delta\epsilon_C$ = correção para a emissividade da mistura de vapor de água e gás carbônico.

Segundo a mesma referência, o poder emissivo do CO_2 e do H_2O são proporcionais a $T_C^{3.5}$ e T_C^3 respectivamente

$$E_{CO_2} = 3.5(p_{CO_2} lmr)^{1/3} \left(\frac{T_C}{100} \right)^{3.5} \quad (3.151)$$

$$E_{H_2O} = 3.5p_{H_2O}^{0.8} lmr^{0.6} \left(\frac{T_C}{100} \right)^3, \quad (3.152)$$

onde

E_{CO_2} = poder emissivo do CO_2 em $\left[\frac{kcal}{m^2h} \right]$

E_{H_2O} = poder emissivo do vapor d'água em $\left[\frac{kcal}{m^2h} \right]$

p_{CO_2} = pressão parcial do CO_2 = $p \cdot y_{CO_2}$ em atm

p_{H_2O} = pressão parcial do vapor d'água = $p \cdot y_{H_2O}$ em atm

lmr = comprimento efetivo do feixe (m) = $D_3 - D_2$

T_C = temperatura do gás (K).

Definindo a emissividade como a relação entre o poder emissivo do corpo e o poder emissivo de um corpo negro (E_n) à mesma temperatura, então

$$\epsilon_{CO_2} = \frac{E_{CO_2}}{E_n} = \frac{3.5(p_{CO_2} lmr)^{1/3} \left(\frac{T_C}{100} \right)^{3.5}}{4.87577 \left(\frac{T_C}{100} \right)^4} \quad (3.153)$$

$$\epsilon_{CO_2} = 7.178352 \frac{(p_{CO_2} lmr)^{1/3}}{\sqrt{T_C}}. \quad (3.154)$$

Para o vapor de água

$$\epsilon_{H_2O} = 71.78352 \frac{p_{H_2O}^{0.8} lmr^{0.6}}{T_C}. \quad (3.155)$$

O fator de correção para a emissividade do vapor de água é estimada por uma correlação. Esta foi obtida a partir dos dados do gráfico existente na literatura [40] considerando que a variação do fator com a pressão parcial é linear. Portanto a seguinte equação se aplica para baixos valores da pressão parcial

$$C_{H_2O} = 1 + \left[1.096(p_{H_2O} lmr)^{-7.01661 \cdot 10^{-3}} - 1 \right] \frac{p_{H_2O}}{0.2}. \quad (3.156)$$

O termo $\Delta\epsilon_C$ é uma correção prevista para valores altos do produto entre a pressão total (em atm) e o comprimento médio de radiação (em m). Como para o sistema em questão, este valor não passa de 0.07 atm.m, vê-se nos gráficos da referência [40] que o valor de $\Delta\epsilon_C$ é insignificante. Assim, para simplificar os cálculos, adota-se que $\Delta\epsilon_C = 0$.

Absortividade

Da mesma forma que para a emissividade, calcula-se a absortividade do gás de aquecimento com a equação

$$\alpha_C = \alpha_{CO_2} + \alpha_{H_2O} - \Delta\alpha_C . \quad (3.157)$$

Continuando com $\Delta\epsilon_C = 0$, devido às características do sistema permitirem esta simplificação. Para encontrar as absortividades do CO_2 e do H_2O podem ser usadas as relações que são funções da temperatura do gás, representadas por $\epsilon_{CO_2}(T_C)$ e $\epsilon_{H_2O}(T_C)$ respectivamente

$$\alpha_{CO_2} = \epsilon_{CO_2}(T_W) \left(\frac{T_C}{T_W} \right)^{0.65} \quad (3.158)$$

$$\alpha_{H_2O} = \epsilon_{H_2O}(T_W) C_{H_2O} \left(\frac{T_C}{T_W} \right)^{0.45} , \quad (3.159)$$

onde

T_W = temperatura da parede

$\epsilon_{CO_2}(T_W)$ = é a função da equação 3.153, somente que o valor da temperatura utilizado deixa de ser a do gás (T_C) e passa a ser a da parede ($\overline{T_W}$)

$\epsilon_{H_2O}(T_W)$ = é a função da equação 3.155, somente que o valor da temperatura utilizado deixa de ser a do gás (T_C) e passa a ser a da parede ($\overline{T_W}$).

No programa utiliza-se para $\overline{T_W}$ a média entre as temperaturas de parede do lado do reator e do lado do refratário

$$\overline{T_W} = \frac{T_{w_r} + T_{w_\tau}}{2} . \quad (3.160)$$

3.6.4 Propriedades do Reator

3.6.4.1 Condutividade Térmica

Segundo [46] a condutividade do material do reator é de $3.8 \cdot 10^{-2} \left(\frac{\text{cal}}{\text{cm.s.}^\circ\text{C}} \right)$

3.6.4.2 Dados para os Cálculos da Radiação Térmica

Por meio de determinação experimental [46] os valores das seguintes propriedades são conhecidos:

ϵ_{Ri} = emissividade da parede interna do reator = 0.85,

ϵ_R = emissividade da parede externa do reator = 0.83,

α_{Ri} = absortividade da parede interna do reator = 0.883,

α_R = absortividade da parede externa do reator = 0.78.

3.6.5 Propriedades do Refratário (Isolamento)

3.6.5.1 Condutividade Térmica

Realizando uma correlação de dados disponíveis [46] para algumas temperaturas, chegou-se à expressão

$$k_{is} = a \cdot T^b, \quad (3.161)$$

onde

$$a = 8.469449 \cdot 10^{-5}$$

$$b = 0.34096$$

$$k_{is} = \text{condutividade em } \left(\frac{\text{cal}}{\text{cm.s.}^\circ\text{C}} \right)$$

T = temperatura do refratário (K).

3.6.5.2 Dados para os Cálculos da Radiação Térmica

Os dados abaixo foram obtidos arbitrariamente em função da dificuldade de encontrá-los na literatura. Considera-se que os valores adotados estão próximos àqueles para materiais similares [29].

ϵ_T = emissividade da parede interna do refratário = 0.8,

α_T = absortividade da parede interna do refratário = 0.8,

ϵ_{is} = emissividade da parede externa do isolamento = 0.9.

Capítulo 4

MÉTODOS NUMÉRICOS APLICADOS

Neste capítulo descrevem-se os métodos numéricos utilizados, realçando as modificações implementadas, e ainda outros procedimentos adotados para padronizar as análises que serão realizadas. Assim, para complementar as informações sobre os procedimentos, fez-se uma breve descrição dos programas utilizados, cujas listagens estão no apêndice. Os dados dos testes experimentais que são utilizados na comprovação dos resultados teóricos também se encontram neste capítulo.

4.1 Discretização do Modelo Matemático Proposto

Considerando o modelo matemático demonstrado, depois da adimensionalização e substituição das variáveis pelas equações 2.95 e 2.104 descritas anteriormente (cap. 2 - Revisão Bibliográfica), observa-se que, por exemplo, para seis elementos (são sete pontos nodais) tem-se catorze parâmetros a determinar para cada variável dependente. No caso em questão, sendo um problema de valor inicial, um desses parâmetros é conhecido. Deve-se aplicar cada uma das equações diferenciais aos doze pontos de colocação internos. Para igualar o número de incógnitas com o número de equações, sugere-se que as equações sejam aplicadas também no final do intervalo ($x=1$).

O sistema das equações discretizadas desta forma gera um sistema algébrico que no caso é não-linear. Para resolver esse sistema, escolheu-se um método que necessita do cálculo do jacobiano do sistema (método de Broyden). O caso é que, de acordo com o número de elementos necessários, a ordem do sistema torna impossível a resolução do problema nos microcomputadores que atualmente estão disponíveis. Para se ter uma idéia, estima-se que, para resolver o modelo proposto, seria preciso

subdividir o reator em cem elementos aproximadamente. Sendo dez equações, para os cem elementos, seriam duzentos e vinte parâmetros para cada variável, o que daria uma ordem para o Jacobiano de dois mil e duzentos !

No caso em questão, por se tratar de equações diferenciais ordinárias e o problema ser de valor inicial, a ordem do jacobiano pode ser reduzida utilizando o artifício da aplicação sequencial do método da colocação ortogonal ao longo do reator. Em outros termos, resolve-se o sistema tomando uma porção menor do reator (onde cinco elementos sejam suficientes para resolver o problema) e considera-se a resposta obtida como sendo os dados iniciais para a porção seguinte até chegar ao fim do reator.

4.2 Solução do Sistema de Equações Algébricas Gerado

Para resolver o sistema discretizado de equações algébricas não-lineares, que é gerado na aplicação do método da colocação ortogonal, optou-se pelo método de Quasi-Newton (Método de Broyden). Este algoritmo é uma variação do método de Newton Estendido e oferece a vantagem sobre este último de não necessitar do cálculo do Jacobiano e de sua inversa a cada iteração. Isto se traduz em um menor número de operações matemáticas e menor tempo para processar cada iteração. O fato é que no Método de Broyden, a inversa do Jacobiano é apenas uma boa estimativa para uma matriz inicial de convergência.

Repara-se também que a exatidão dos valores dessa matriz não é tão importante, pois em várias situações, é possível encontrar a solução do sistema usando a inversa do Jacobiano do conjunto de elementos anterior. Utilizando ou não este artifício, ocorre que se obtém uma sequência com taxa quadrática de convergência igual àquela do método de Newton. Porém, dependendo das estimativas iniciais, a convergência não é alcançada. Para solucionar o problema e padronizar a estimativa inicial dos parâmetros, várias alternativas foram testadas, e a escolhida foi:

a) para os parâmetros ímpares (p_1, p_3, p_5, \dots), ou seja, o valor das variáveis, adota-se que

$$p_1 = p_3 = p_5 = \dots = a_0 ,$$

onde a_0 é a condição inicial para a variável, que é dada em $z=0$ como um dado do problema ($\varepsilon_0, v_{g0}, v_{x0}, T_{x0}$, por exemplo); e em $z \neq 0$ pelos valores calculados na

porção anterior do reator,

b) para os parâmetros pares (p_2, p_4, p_6, \dots), o valor das derivadas portanto, adota-se

$$p_2 = p_4 = p_6 = \dots = 0 .$$

Assim, a estimativa inicial dos parâmetros ímpares (condições iniciais do problema) é uma função constante dentro de cada conjunto de elementos. Os parâmetros pares são estimados somente na primeira iteração para fazer gerar a matriz inicial de convergência.

4.2.1 Cálculo do Jacobiano

Na determinação da matriz inicial de convergência, é necessário calcular o Jacobiano do sistema discretizado. Expressões analíticas para as derivadas parciais em função de cada parâmetro a determinar seriam possíveis, mas criariam um número grande de equações auxiliares. Além disso, uma mudança no modelo envolveria uma revisão dessas equações dificultando o trabalho. Por isso, decidiu-se calcular o Jacobiano numericamente, já que a exatidão de seus valores, até certo ponto, não é a condição necessária para obter convergência. Inicialmente, experimentou-se um método no qual utilizam-se os valores das funções avaliadas para seis diferentes valores do parâmetro em questão, e através de uma aproximação polinomial obtém-se um valor da derivada muito próximo do resultado analítico. Porém, devido ao consumo elevado de tempo para este cálculo foi realizado o teste com apenas dois pontos e mesmo obtendo valores um pouco diferentes do que no caso anterior, a convergência foi alcançada, com um número de interações um pouco maior.

Chamando de $F_{j,i}$ a equação j do modelo discretizado, na forma implícita e aplicada ao ponto de colocação i . Lembrando que as equações são ordenadas da seguinte maneira (*vide* figura 2.2): a) Em primeiro fica a equação que representa a condição inicial para a primeira variável; b) Depois na sequência vem a equação 1 do modelo aplicada ao primeiro ponto interno de colocação, depois aplicada ao segundo ponto e assim até o fim dos pontos internos do passo considerado; c) Finalmente a expressão da condição de contorno, ou se esta não existir, a mesma equação 1 aplicada ao último ponto nodal, ou seja em $x = 1$. Para as variáveis e equações seguintes repete-se a sequência, completando assim o sistema de equações. Para estimar o cálculo das

derivadas parciais componentes do Jacobiano usam-se então as expressões

$$H_{X,Y}^0 = \frac{\partial F_{j,i}(z_i, P_{k,l}, P_{m,n}, P_{m+1,n}, P_{m+2,n}, P_{m+3,n}, P_{m,n+1}, \dots)}{\partial P_{k,l}} \quad (4.1)$$

$$H_{X,Y}^0 = \frac{F_{j,i}(z_i, P_{k,l} + h, P_{m,n}, P_{m+1,n}, P_{m+2,n}, P_{m+3,n}, P_{m,n+1}, \dots) - F_{j,i}(z_i, P_{k,l} - h, \dots, P_{m,n+1}, \dots)}{2h} \quad (4.2)$$

onde

i = indica o ponto de colocação, sendo 1 para o extremo inferior e NP para o extremo superior

j = indica o número corespondente da equação do modelo, sendo 1 as condições iniciais, 2 é a primeira equação do modelo e NV+2 o número das condições de contorno

k = número de sequência do parâmetro para a variável l

l = indica variável a qual se refere o parâmetro $P_{k,l}$

m = índice k genérico

n = índice l genérico

NV = número de variáveis dependentes do modelo = número de equações diferenciais

NP = número de parâmetros totais a determinar para cada variável

X = representa o número da linha do Jacobiano

Y = representa o número da coluna do Jacobiano,

e dessa forma

$$X = (j - 1) \cdot NP + i \quad (4.3)$$

$$Y = (l - 1) \cdot NP + k \quad (4.4)$$

4.2.2 Inversa do Jacobiano

O princípio do método da eliminação para a inversão de matrizes é bastante comentado na literatura [44]. Desejando calcular a inversa utilizando a menor quantidade de memória possível, utilizou-se um procedimento que permite calcular e armazenar a inversa no próprio espaço da matriz original [52].

Outra modificação foi feita no sentido de evitar a escolha de pivôs nulos. Esse tipo de erro foi contornado permitindo-se a troca entre linhas, colocando sempre no pivô o maior valor absoluto que houver na coluna, desde a linha do pivô até a última. Dessa forma, eliminou-se o problema dos pivôs nulos. A verificação dos cálculos foi feita multiplicando a inversa pela matriz original. O resultado comparado com a matriz unidade mostrou desvios, mas não ao ponto de impedir a convergência dos resultados.

4.2.3 Método de Newton Estendido

No desenvolvimento da modelagem verificou-se a necessidade de calcular os valores de duas variáveis (T_{w_r} e T_{w_T}), que devem ser extraídas dos balanços de energia nas paredes do reator e do refratário. Para solucionar este sistema de duas equações algébricas não-lineares, utiliza-se o Método de Newton Estendido com cálculo do Jacobiano e respectiva inversa feito através de expressões analíticas.

As equações do referido sistema são as equações 3.115 e 3.117 demonstradas no capítulo da modelagem

$$h_{CR}\pi D_2 (T_C - T_{w_r}) - q_{RAD_R} - h_{sus}\pi D_1 (T_{w_r,i} - T_g) - \frac{\sigma \left(T_{w_r,i}^4 \frac{\epsilon_{Ri}}{\alpha_{Ri}} - T_g^4 \frac{\epsilon_X}{\alpha_X} \right)}{\frac{(1-\alpha_{Ri})}{\alpha_{Ri}\pi D_1} + \frac{1}{\pi D_1 F_{RX}} + \frac{(1-\alpha_X)}{\alpha_X A_X}} = 0 \quad (4.5)$$

$$T_{w_r,i} = T_{w_r} - \frac{h_{CR}\pi D_2 (T_C - T_{w_r}) - q_{RAD_R}}{2\pi K_R} \ln \left(\frac{D_2}{D_1} \right) \quad (4.6)$$

$$\frac{2\pi a}{(1+b) \ln \left(\frac{D_4}{D_3} \right)} (T_{w_T}^{1+b} - T_{w_i}^{1+b}) - h_{AMB}\pi D_4 (T_{w_i} - T_\infty) = 0 \quad (4.7)$$

$$T_{w_i} = \left[\frac{q_{RAD_T} - h_{CT}\pi D_3 (T_C - T_{w_T}) + \frac{2\pi a}{(1+b) \ln \left(\frac{D_4}{D_3} \right)} T_{w_T}^{(1+b)}}{\frac{2\pi a}{(1+b) \ln \left(\frac{D_4}{D_3} \right)}} \right]^{\frac{1}{1+b}} \quad (4.8)$$

A resolução é alcançada pela fórmula de iteração do método

$$\tilde{x}^{K+1} = \tilde{x}^K - \tilde{H}^K \cdot \tilde{F}^K, \quad (4.9)$$

onde

K = número da iteração

\tilde{x} = vetor das incógnitas

\tilde{F} = vetor com o resíduo das equações (que são colocadas na forma implícita)

\tilde{H} = matriz inversa do Jacobiano.

Assim, para $K = 0$ o \tilde{x}^0 representa as estimativas iniciais para as incógnitas do sistema para o balanço de energia nas paredes, e

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} T_{w_r} \\ T_{w_T} \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

$$\tilde{F} = \begin{pmatrix} F_{T_{w_r}} \\ F_{T_{w_T}} \end{pmatrix}, \quad (4.11)$$

assim o Jacobiano é dado pela equação

$$Jac = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_{T_{w_r}}}{\partial T_{w_r}} & \frac{\partial F_{T_{w_r}}}{\partial T_{w_T}} \\ \frac{\partial F_{T_{w_T}}}{\partial T_{w_r}} & \frac{\partial F_{T_{w_T}}}{\partial T_{w_T}} \end{pmatrix} . \quad (4.12)$$

Como o sistema é de duas equações a duas incógnitas, a inversão do Jacobiano pode ser expressa por

$$\begin{matrix} H \\ \approx \end{matrix} = (Jac)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\Delta} \cdot \frac{\partial F_{T_{w_r}}}{\partial T_{w_r}} & -\frac{1}{\Delta} \cdot \frac{\partial F_{T_{w_r}}}{\partial T_{w_T}} \\ -\frac{1}{\Delta} \cdot \frac{\partial F_{T_{w_T}}}{\partial T_{w_r}} & \frac{1}{\Delta} \cdot \frac{\partial F_{T_{w_T}}}{\partial T_{w_T}} \end{pmatrix} , \quad (4.13)$$

onde Δ = determinante do Jacobiano

$$\Delta = \left(\frac{\partial F_{T_{w_r}}}{\partial T_{w_r}} \right) \cdot \left(\frac{\partial F_{T_{w_T}}}{\partial T_{w_T}} \right) - \left(\frac{\partial F_{T_{w_r}}}{\partial T_{w_T}} \right) \cdot \left(\frac{\partial F_{T_{w_T}}}{\partial T_{w_r}} \right) . \quad (4.14)$$

Substituindo na fórmula iterativa, tem-se

$$(T_{w_r})^{K+1} = (T_{w_r})^K - \frac{\left[\left(\frac{\partial F_{T_{w_T}}}{\partial T_{w_T}} \right)^K \cdot (F_{T_{w_r}})^K - \left(\frac{\partial F_{T_{w_r}}}{\partial T_{w_T}} \right)^K \cdot (F_{T_{w_T}})^K \right]}{\Delta^K} \quad (4.15)$$

$$(T_{w_T})^{K+1} = (T_{w_T})^K - \frac{\left[\left(\frac{\partial F_{T_{w_r}}}{\partial T_{w_r}} \right)^K \cdot (F_{T_{w_T}})^K - \left(\frac{\partial F_{T_{w_T}}}{\partial T_{w_r}} \right)^K \cdot (F_{T_{w_r}})^K \right]}{\Delta^K} . \quad (4.16)$$

Repete-se o processo iterativo até satisfazer o critério de parada

$$|F_i| \leq \text{tolerância} \quad ; i = 1, 2, \dots \quad (4.17)$$

Como estimativa inicial, utilizam-se as relações

$$(T_{w_r})^0 = 0.84 T_C \quad (4.18)$$

$$(T_{w_T})^0 = 0.90 T_C , \quad (4.19)$$

e inicializa-se $T_{w_i} = T_\infty + 70$.

As derivadas parciais são calculadas analiticamente pelas expressões 4.20 a 4.36. A primeira equação do sistema na forma implícita e suas respectivas derivadas parciais são:

$$F_{T_{w_r}} = h_{CR} \pi D_2 (T_C - T_{w_r}) - h_{susp} \pi D_1 (T_{w_{ri}} - T_g) - q_{RAD_R} - \frac{\sigma \left(T_{w_{ri}}^4 \frac{\epsilon_{Ri}}{\alpha_{Ri}} - T_z^4 \frac{\epsilon_X}{\alpha_X} \right)}{\frac{(1-\alpha_{Ri})}{\alpha_{Ri} \pi D_1} + \frac{1}{\pi D_1 F_{RX}} + \frac{(1-\alpha_X)}{\alpha_X A_X}} \quad (4.20)$$

$$\frac{\partial F_{T_{w_r}}}{\partial T_{w_r}} = -h_{CR}\pi D_2 - \frac{\partial q_{RAD_R}}{\partial T_{w_r}} - \left[1 + \frac{h_{CR}\pi D_2 + \frac{\partial q_{RAD_R}}{\partial T_{w_r}}}{\frac{2\pi K_R}{\ln\left(\frac{D_2}{D_1}\right)}} \right] \cdot \left(h_{susp}\pi D_1 + \frac{4\sigma T_{w_{ri}}^3 \frac{\epsilon_{Ri}}{\alpha_{Ri}}}{\frac{(1-\alpha_{Ri})}{\alpha_{Ri}\pi D_1} + \frac{1}{\pi D_1 F_{RX}} + \frac{(1-\alpha_X)}{\alpha_X A_X}} \right) \quad (4.21)$$

$$\frac{\partial F_{T_{w_r}}}{\partial T_{w_T}} = -\frac{\partial q_{RAD_R}}{\partial T_{w_T}} \cdot \frac{\ln\left(\frac{D_2}{D_1}\right)}{2\pi K_R} \cdot \frac{\partial q_{RAD_R}}{\partial T_{w_T}} \cdot \left(h_{susp}\pi D_1 + \frac{4\sigma T_{w_{ri}}^3 \frac{\epsilon_{Ri}}{\alpha_{Ri}}}{\frac{(1-\alpha_{Ri})}{\alpha_{Ri}\pi D_1} + \frac{1}{\pi D_1 F_{RX}} + \frac{(1-\alpha_X)}{\alpha_X A_X}} \right) \cdot \quad (4.22)$$

A segunda equação do sistema e as respectivas derivadas parciais são as seguintes:

$$F_{T_{w_T}} = \frac{2\pi a}{(1+b)\ln\left(\frac{D_4}{D_3}\right)} (T_{w_T}^{1+b} - T_{w_i}^{1+b}) - h_{AMB}\pi D_4 (T_{w_i} - T_\infty) \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial F_{T_{w_T}}}{\partial T_{w_r}} = -\frac{2\pi a T_{w_i}^b}{\ln\left(\frac{D_4}{D_3}\right)} \cdot \frac{\partial T_{w_i}}{\partial T_{w_r}} - \pi D_4 \left[h_{AMB} + (T_{w_i} - T_\infty) \frac{\partial h_{AMB}}{\partial T_{w_i}} \right] \cdot \frac{\partial T_{w_i}}{\partial T_{w_r}} \quad (4.24)$$

$$\frac{\partial T_{w_i}}{\partial T_{w_r}} = \left[\frac{q_{RAD_T} - h_{CT}\pi D_3 (T_C - T_{w_T}) + \frac{2\pi a}{(1+b)\ln\left(\frac{D_4}{D_3}\right)} T_{w_T}^{(1+b)}}{\frac{2\pi a}{(1+b)\ln\left(\frac{D_4}{D_3}\right)}} \right]^{\frac{1}{1+b}-1} \frac{\ln\left(\frac{D_4}{D_3}\right)}{2\pi a} \cdot \frac{\partial q_{RAD_T}}{\partial T_{w_r}} \quad (4.25)$$

$$\frac{\partial h_{AMB}}{\partial T_{w_i}} = COR_{AMB} \left\{ \frac{8.4845 \cdot 10^{-6}}{(T_{w_i} - T_\infty)^{\frac{3}{4}} \left(\frac{D_4}{100}\right)^{\frac{1}{4}}} + \sigma \epsilon_{is} \frac{[(T_{w_i} - T_\infty) 4T_{w_i}^3 - (T_{w_i}^4 - T_\infty^4)]}{(T_{w_i} - T_\infty)^2} \right\} \quad (4.26)$$

$$\frac{\partial F_{T_{w_T}}}{\partial T_{w_T}} = \frac{2\pi a}{\ln\left(\frac{D_4}{D_3}\right)} \cdot \left(T_{w_T}^b - T_{w_i}^b \frac{\partial T_{w_i}}{\partial T_{w_T}} \right) - \pi D_4 \left[h_{AMB} + (T_{w_i} - T_\infty) \frac{\partial h_{AMB}}{\partial T_{w_i}} \right] \cdot \frac{\partial T_{w_i}}{\partial T_{w_T}} \quad (4.27)$$

$$\frac{\partial T_{w_i}}{\partial T_{w_T}} = \left[\frac{q_{RAD_T} - h_{CT}\pi D_3 (T_C - T_{w_T}) + \frac{2\pi a}{(1+b)\ln\left(\frac{D_4}{D_3}\right)} T_{w_T}^{(1+b)}}{\frac{2\pi a}{(1+b)\ln\left(\frac{D_4}{D_3}\right)}} \right]^{\frac{1}{1+b}-1} \cdot \frac{\ln\left(\frac{D_4}{D_3}\right)}{2\pi a} \cdot \left(h_{CT}\pi D_3 + \frac{\partial q_{RAD_T}}{\partial T_{w_T}} + \frac{2\pi a T_{w_T}^b}{\ln\left(\frac{D_4}{D_3}\right)} \right) \cdot \quad (4.28)$$

As outras derivadas parciais que aparecem nas equações acima são:

$$\frac{\partial q_{RADR}}{\partial T_{w_r}} = \frac{\sigma}{(R_R + R_{Re})} \left(4 \frac{\epsilon_R}{\alpha_R} T_{w_r}^3 - \frac{\partial J_0}{\partial T_{w_r}} \right) \quad (4.29)$$

$$\frac{\partial q_{RADR}}{\partial T_{w_T}} = \frac{-\sigma}{(R_R + R_{Re})} \cdot \frac{\partial J_0}{\partial T_{w_T}} \quad (4.30)$$

$$\frac{\partial q_{RADT}}{\partial T_{w_r}} = \frac{-\sigma}{(R_T + R_{Te})} \cdot \frac{\partial J_0}{\partial T_{w_r}} \quad (4.31)$$

$$\frac{\partial q_{RADT}}{\partial T_{w_T}} = \frac{\sigma}{(R_T + R_{Te})} \left(4 \frac{\epsilon_T}{\alpha_T} T_{w_T}^3 - \frac{\partial J_0}{\partial T_{w_T}} \right) \quad (4.32)$$

$$\frac{\partial J_0}{\partial T_{w_r}} = \frac{\left[\frac{4\epsilon_R T_{w_r}^3}{\alpha_R (R_R + R_{Re})} - \frac{\epsilon_C T_C^4}{\alpha_C^2 (R_C + R_{Ce})} \cdot \frac{\partial \alpha_C}{\partial T_{w_r}} \right]}{\left[\frac{1}{(R_R + R_{Re})} + \frac{1}{(R_C + R_{Ce})} + \frac{1}{(R_T + R_{Te})} \right]} \quad (4.33)$$

$$\frac{\partial J_0}{\partial T_{w_T}} = \frac{\left[\frac{4\epsilon_T T_{w_T}^3}{\alpha_T (R_T + R_{Te})} - \frac{\epsilon_C T_C^4}{\alpha_C^2 (R_C + R_{Ce})} \cdot \frac{\partial \alpha_C}{\partial T_{w_T}} \right]}{\left[\frac{1}{(R_R + R_{Re})} + \frac{1}{(R_C + R_{Ce})} + \frac{1}{(R_T + R_{Te})} \right]} \quad (4.34)$$

Presume-se que

$$\frac{\partial \alpha_C}{\partial T_{w_r}} = \frac{\partial \alpha_C}{\partial T_{w_T}} = \frac{\partial \alpha_C}{\partial T_w} \quad (4.35)$$

e $\overline{T_w} = \frac{T_{w_r} + T_{w_T}}{2}$, assim

$$\frac{\partial \alpha_C}{\partial T_w} = \frac{-1.15 \epsilon_{CO_2} [\overline{T_w}, P_{CO_2}, lmr] \frac{T_C^{0.65}}{\overline{T_w}^{1.65}} - 1.45 \epsilon_{H_2O} [\overline{T_w}, P_{H_2O}, lmr] \cdot C_{H_2O} [P_{H_2O}, lmr] \frac{T_C^{0.45}}{\overline{T_w}^{1.45}}}{2} \quad (4.36)$$

4.3 Forma de Utilização das Subrotinas

Para facilitar o uso dos métodos numéricos em outros modelos, procurou-se ao elaborar o programa, uma forma apropriada. Primeiramente incluem-se as condições iniciais ou de contorno. As condições iniciais devem ser programadas na subrotina CONDX0. O argumento único desta é o vetor de saída com o valor das funções que devem ser escritos na forma implícita. Assim é possível utilizar qualquer tipo de condição. Os valores das condições iniciais deverão ser passados pelo bloco /PARM2/. Para obter

o valor das variáveis em $x = 0$, é necessário chamar a função $Y(ord, var, 1)$ usando ord como a ordem desejada, ou seja 0 para o valor da variável, 1 para a primeira derivada e 2 para a segunda derivada. Para indicar a variável substituir em var ; portanto é necessário unir as variáveis a números que as identifiquem. O último argumento da função Y é 1 porque se trata do primeiro ponto (em $x = 0$).¹

Da mesma forma, as condições de contorno (em $x = 1$), devem ser introduzidas na subrotina CONDX1. No caso de não existirem condições no final do intervalo, o que se faz é usar as equações do modelo em $x = 1$; daí é só atribuir o valor do número de parâmetros (NP) à variável J, identificando o último ponto do intervalo e daí chamar $SISEQ(FUN, J)$.

O modelo matemático poderá ser introduzido na subrotina SISEQ depois que estiver com suas equações na forma implícita e adimensionalizadas para a variável independente. Seguindo a mesma numeração adotada anteriormente, atribui-se o valor estimado (naquela iteração) para uma variável qualquer do modelo chamando a função $Y(ord, var, J)$. Para determinar a ordem usar o argumento ord ($=0$ para variável, $=1$ para derivada de primeira ordem em relação à variável independente adimensionalizada e $=2$ para derivada segunda). Necessitando da derivada primeira, não esquecer de dividir o resultado de Y pelo tamanho do passo. Os argumentos da subrotina SISEQ são o vetor com os resíduos das equações (FUN) e o indicador do ponto de colocação (J). Além disso, é necessário passar para esta subrotina os blocos $/CJAC/$ e $/L/$; e se necessário, o bloco $/XX/$.

4.4 Dados Utilizados e Programa para Cálculo das Condições Iniciais

Para proceder a simulação, necessita-se de um conjunto de dados, distribuídos em arquivos distintos, como dados fixos, dados variáveis, propriedades físicas, estimativas iniciais e dados para o plano de execução. Antes porém, de executar o programa principal, deve-se transformar alguns dados para serem adequados ao formato de entrada do programa principal. Com este propósito foi elaborado o programa COND.FOR. Neste programa, calcula-se principalmente as condições de velocidade e porosidade na região de entrada do reator, usando as vazões e os dados de propriedades físicas. A es-

¹x é equivalente à variável z (altura do reator) adimensionalizada no intervalo considerado.

timativa para as velocidades iniciais utiliza equações obtidas empiricamente (equações 2.17, 2.18, 2.19, 2.20 e 2.21,) e dá resultados pouco diferentes das relações usadas na simulação. A resposta dos cálculos é armazenada no arquivo das condições iniciais, facilitando assim a operação do programa principal.

Outro objetivo deste programa é o de ajustar a composição do gás de arraste e do gás produzido na reação. Este ajuste é feito com base nos dados de umidade e de quantidade de matéria orgânica, que são obtidos no ensaio Fischer. Introduce-se nesta fase, via arquivo PFOR (tabela 4.1), a composição do gás de arraste inicial seco e do gás produzido na reação. Além disso, é preciso fornecer os dados do ensaio Fischer, via teclado, e se houver modificação nas condições de operação do condensador ² será necessário mudar o dado de umidade inicial do gás de arraste no programa. Estas composições são obtidas por uma análise de laboratório [PETRO].

Determina-se, então, as composições e os pesos moleculares do gás inicial e do produto³ da reação. Estes dados são armazenados no arquivo de propriedades físicas a ser usado pelo programa principal (tabela 4.8 como exemplo).

Além destas funções, aproveita-se este programa para fazer uma conferência simples na validade dos dados introduzidos no arquivo do plano de passos ⁴.

Outro motivo pelo qual o cálculo das condições iniciais está separado do programa principal, refere-se ao problema do tamanho do programa principal e seu tempo de execução. Na verdade, com a padronização dos arquivos de dados usados nos dois programas, esta situação não prejudica a operação da simulação.

Para operar o programa principal é necessário somente fornecer o nome do arquivo (com extensão .prj - tabela 4.2) que contém todas as outras informações que são, mais especificamente, o nome dos arquivos de dados fixos, dados variáveis, propriedades físicas, condições e estimativas iniciais, e o plano de passos.

No arquivo de dados fixos, são colocados os dados que dificilmente serão modificados (tabela 4.3). Os dados variáveis são as condições de operação da planta, e variam de teste para teste (tabelas 4.5, 4.9 e 4.13). Um arquivo especialmente destinado aos principais dados de propriedades físicas também é utilizado (tabela 4.8). As estimativas e as condições iniciais são colocadas num arquivo a parte, que irá se modificar ao longo da simulação (para cada passo realizado), permitindo a continuação

²o condensador tem a função de retirar a umidade excedente do gás de reciclo

³o produto é constituído do óleo e do gás formados

⁴o plano de passos nada mais é do que a divisão do reator em passos e elementos

da simulação quando for necessário interrompê-la. Nas tabelas 4.6, 4.10 e 4.14 se vê a descrição do significado de cada campo numérico do arquivo de estimativas iniciais, mas o formato de entrada correto está ilustrado na tabela 4.4. Por fim, existe o arquivo do plano de passos, que é o conjunto de dados que definem a distribuição dos passos ao longo do reator, a quantidade de elementos a ser usado em cada região e o tamanho individual de cada elemento (Tabelas 4.7, 4.11 e 4.15).

As tabelas 4.3 a 4.7 mostram os dados relativos ao teste 01, organizados da seguinte forma:

- arquivo principal de dados - vide tabela 4.2
- dados fixos - vide tabela 4.3
- dados variáveis - vide tabela 4.5
- propriedades físicas - vide tabela 4.8
- estimativas iniciais - vide tabela 4.6
- plano de passos - vide tabela 4.7

Tabela 4.1: Estrutura do arquivo de propriedades físicas - dados gerais para uso do programa COND.FOR

* PROPIEDADES FÍSICAS *									
Gás de arraste :									
Número de componentes do gás de reciclo = NGASG =27									
Componente	PM	Tcrit	Vcrit	Constantes da eq. do cp				inic. % mol	prod. % mol
				AG	BG	CG	DG		
VAPOR	18.015	647.3	57.1	+3.224D+01	+1.924D-03	+1.055D-05	-3.596D-09	0.000	0.
H2S	34.080	373.2	98.6	+3.194D+01	+1.436D-03	+2.432D-05	-1.176D-08	12.19	8.048
OXIGENIO	31.999	154.6	73.4	+2.811D+01	-3.680D-06	+1.746D-05	-1.065D-08	0.310	0.205
CO	28.010	132.9	93.2	+3.087D+01	-1.285D-02	+2.789D-05	-1.272D-08	3.08	2.033
CO2	44.010	304.1	93.9	+1.980D+01	+7.344D-02	-5.602D-05	+1.715D-08	5.12	3.38
HIROGENIO	2.016	33.2	65.1	+2.710D+01	+9.259D-03	-1.379D-05	+7.633D-09	7.45	4.918
METANO	16.043	190.4	99.2	+1.925D+01	+5.213D-02	+1.197D-05	-1.132D-08	26.13	17.25
ETANO	30.070	305.4	148.3	+5.409D+00	+1.781D-01	-6.938D-05	+8.713D-09	9.45	6.239
ETENO	28.054	282.4	130.4	+3.806D+00	+1.566D-01	-8.348D-05	+1.755D-08	5.92	3.908
PROPANO	44.094	369.8	203.0	-4.224D+00	+3.063D-01	-1.586D-04	+3.215D-08	5.93	3.915
PROPENO	42.081	364.9	181.0	+3.710D+00	+2.345D-01	-1.160D-04	+2.205D-08	8.68	5.73
ISOBUTANO	58.124	408.2	263.0	-1.390D+00	+3.847D-01	-1.846D-04	+2.895D-08	1.17	0.773
N-BUTANO	58.124	425.2	255.0	+9.487D+00	+3.313D-01	-1.108D-04	-2.822D-09	1.26	0.832
BUTENO-1	56.108	419.6	240.0	-2.994D+00	+3.532D-01	-1.990D-04	+4.463D-08	4.76	3.142
t-BUTENO-2	56.108	428.6	238.0	+1.832D+01	+2.564D-01	-7.013D-05	-8.989D-09	1.29	0.852
c-BUTENO-2	56.108	435.6	234.0	+4.396D-01	+2.953D-01	-1.018D-04	-6.160D-10	1.51	0.997
ISOPENTANO	72.151	460.4	306.0	-9.525D+00	+5.066D-01	-2.729D-04	+5.723D-08	0.49	0.323
BUTADIENO	54.092	443.7	219.0	+1.120D+01	+2.724D-01	-1.468D-04	+3.089D-08	1.00	0.66
N-PENTANO	72.151	469.7	304.0	-3.626D+00	+4.873D-01	-2.580D-04	+5.305D-08	0.36	0.238
1-PENTENO	70.135	464.8	300.0	-1.340D-01	+4.329D-01	-2.317D-04	+4.681D-08	0.41	0.27
2M-BUTENO	70.135	465.0	300.0	+1.057D+01	+3.997D-01	-1.946D-04	+3.314D-08	0.36	0.238
t-PENTENO-2	70.135	475.0	300.0	+1.947D+00	+4.182D-01	-2.178D-04	+4.405D-08	0.200	0.132
c-PENTENO-2	70.135	476.0	300.0	-1.429D+01	+4.601D-01	-2.541D-04	+5.455D-08	0.250	0.165
2M-PENTANO	86.178	497.5	367.0	-1.057D+01	+6.184D-01	-3.573D-04	+8.085D-08	0.92	0.607
3M-PENTANO	86.178	504.5	367.0	-2.386D+00	+5.690D-01	-2.870D-04	+5.033D-08	0.140	0.092
C ₆ e >	86.178	507.5	370.0	-4.413D+00	+5.820D-01	-3.119D-04	+6.494D-08	1.62	0.231
ÓLEO	300.000	791.0	1000.0	-6.664D+01	+2.073D+00	-1.193D-03	+2.667D-07	0.0	34.822
Peso molecular do gás de arraste (no início) = PMGAS = +34.227271									
Peso molecular dos Produtos (gás + óleo) = PMPRO = +125.16739488									
Gás de combustão :									
Número de componentes do gás de combustão=NGASC =4									
Componente	PM	Tcrit	Vcrit	Constantes da eq. do cp				gás % mol	
				AG	BG	CG	DG		
VAPOR	18.015	647.3	57.1	+3.224E+1	+1.924E-3	+1.055E-5	-3.596E-9	5.83	
CO2	44.01	304.1	93.9	+1.980E+1	+7.344E-2	-5.602E-5	+1.715E-8	7.1	
NITROGENIO	28.013	126.2	89.8	+3.115E+1	-1.357E-2	+2.680E-5	-1.168E-8	76.77	
OXIGENIO	31.999	154.6	73.4	+2.811E+1	-3.680E-6	+1.746E-5	-1.065E-8	10.30	
Condutividade térmica do reator (cal/cm.°C.s)= KR =+3.800E-2									
Correção hamb perdas não previstas(cal/cm.°C.s)=CORAMB =+1.010E+0									

Tabela 4.2: Tabela ilustrando as informações contidas nos arquivos com extensão *.prj

* ARQUIVOS *	*50*****	.DAT
Nome do arquivo para os dados fixos	=DATFIX3	.DAT
Nome do arquivo para os dados variáveis	=DATVSI	.DAT
Nome do arquivo para as propriedades físicas	=PROPFIS6	.DAT
Nome do arquivo para as estimativas iniciais	=INTERMED	.DAT
Nome do arquivo para plano de execução (passos)	=PLANPO6	.DAT

Tabela 4.3: Informações incluídas no arquivo de dados fixos do teste 01

* DADOS FIXOS *	variav.	*70*****
Comprimento do reator (cm)	= LF	=1500.
Diâmetro interno do reator (cm)	= D1	=7.792
Diâmetro externo do reator (cm)	= D2	=8.89
Diâmetro interno do tubo refratário (cm)	= D3	=16.83
Diâmetro externo da Camada isolante (cm)	= D4	=45.72
Temperatura ambiente ($^{\circ}C$)	= TIN	=20.
Emissividade do xisto	= EMX	=0.89
Emissividade do reator (sup. interna)	= EMR	=0.85
Emissividade do reator (sup. externa)	=EPSR	=0.83
Emissividade do refratário(sup interna)	=EPST	=0.8
Absortividade do xisto	=ALPX	=0.88
Absortividade do reator (sup. interna)	=ALPRI	=0.78
Absortividade do reator (sup. externa)	=ALPR	=0.883
Absortividade do refratário(sup interna)	=ALPT	=0.8
Emissividade do isolante	=EMIS	=0.9

Tabela 4.4: Ilustração do formato para os dados do arquivo de dados iniciais e/ou intermediários - dados para o teste 01

0.00000000000000E+000										
.0000	.9977182	400.6638124	127.7800000	349.2051172	76.3500000	.9311680	1187.220000	.00000000	.083250	.0002500
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
4.420000000000E-002			0.000000000000E+000			0.00E+00				

Tabela 4.5: Informações contidas no arquivo de dados variáveis para o teste 01

* DADOS VARIÁVEIS *	variav.	*60*****
Número de equações diferenciais a resolver	= NV	=10
Vazão mássica inicial de gás de arraste (kg/h)	= MG0	=61.4997
Vazão mássica inicial de xisto (kg/h)	= MX0	=308.
Teor inicial dos orgânicos (%peso)	= Y0	=0.0925
Teor inicial de umidade no xisto (%peso)	= UMI0	=0.0442
Diâmetro médio das partículas (cm)	= DPART	=0.0218626
Vazão mássica de fumos (kg/h)	= MCOMB	=732.494
Fator de forma para a radiação	= FRX	=0.61

Tabela 4.6: Estrutura para os dados do arquivo de dados iniciais e/ou intermediários

- dados para o teste 01

altura inicial do passo = 0.0											
	Z	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	pressão	T_C	Conversão	Q	E
variável	.0000	.9977182	400.66381	127.7800	349.20511	76.3500	.931166	1187.220	.0000	.08325	.00925
derivada	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
umidade	inicial = 4.420E-002			derivada= 0.00E+000					bandeira= 0		

Tabela 4.7: Estrutura do arquivo com os dados necessários para o plano de execução por passos - dados utilizados para o teste 01

Arquivo do plano de execução por passos:									
Z(inic)	Z(fim)	Passo	NEL	Tamanho de cada elemento no passo					
				1	2	3	4	5	
0.	12.	2.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
12.	18.	1.	1	1.0					
18.	24.	2.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
24.	28.	1.	1	1.0					
28.	40.	2.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
40.	90.	5.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
90.	200.	10.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
200.	400.	20.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
400.	700.	50.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
700.	1500.	100.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	

Tabela 4.8: Estrutura do arquivo de propriedades físicas - dados para o teste 01

* PROPIEDADES FÍSICAS *									
Gás de arraste :									
Número de componentes do gás de reciclo = NGASC =27									
Componente	PM	Tcrit	Vcrit	Constantes da eq. do cp				inic. % mol	prod. % mol
				AG	BG	CG	DG		
VAPOR	18.015	647.3	57.1	+3.224D+01	+1.924D-03	+1.055D-05	-3.596D-09	5.500	.000
H2S	34.080	373.2	98.6	+3.194D+01	+1.436D-03	+2.432D-05	-1.176D-08	11.520	8.192
OXIGENIO	31.999	154.6	73.4	+2.811D+01	-3.680D-06	+1.746D-05	-1.065D-08	.293	.208
CO	28.010	132.9	93.2	+3.087D+01	-1.285D-02	+2.789D-05	-1.272D-08	2.911	2.070
CO2	44.010	304.1	93.9	+1.980D+01	+7.344D-02	-5.602D-05	+1.715D-08	4.838	3.441
HIDROGENIO	2.016	33.2	65.1	+2.710D+01	+9.259D-03	-1.379D-05	+7.633D-09	7.040	5.006
METANO	16.043	190.4	99.2	+1.925D+01	+5.213D-02	+1.197D-05	-1.132D-08	24.693	17.559
ETANO	30.070	305.4	148.3	+5.409D+00	+1.781D-01	-6.938D-05	+8.713D-09	8.930	6.350
ETENO	28.054	282.4	130.4	+3.806D+00	+1.566D-01	-8.348D-05	+1.755D-08	5.594	3.978
PROPANO	44.094	369.8	203.0	-4.224D+00	+3.063D-01	-1.586D-04	+3.215D-08	5.604	3.985
PROPENO	42.081	364.9	181.0	+3.710D+00	+2.345D-01	-1.160D-04	+2.205D-08	8.203	5.833
ISOBUTANO	58.124	408.2	263.0	-1.390D+00	+3.847D-01	-1.846D-04	+2.895D-08	1.106	.786
N-BUTANO	58.124	425.2	255.0	+9.487D+00	+3.313D-01	-1.108D-04	-2.822D-09	1.191	.847
BUTENO-1	56.108	419.6	240.0	-2.994D+00	+3.532D-01	-1.990D-04	+4.463D-08	4.498	3.199
1-BUTENO-2	56.108	428.6	238.0	+1.832D+01	+2.564D-01	-7.013D-05	-8.989D-09	1.219	.867
2-BUTENO-2	56.108	435.6	234.0	+4.396D-01	+2.953D-01	-1.018D-04	-6.160D-10	1.427	1.015
ISOPENTANO	72.151	460.4	306.0	-9.525D+00	+5.066D-01	-2.729D-04	+5.723D-08	.463	.329
BUTADIENO	54.092	443.7	219.0	+1.120D+01	+2.724D-01	-1.468D-04	+3.089D-08	.945	.672
N-PENTANO	72.151	469.7	304.0	-3.626D+00	+4.873D-01	-2.580D-04	+5.305D-08	.340	.242
1-PENTENO	70.135	464.8	300.0	-1.340D-01	+4.329D-01	-2.317D-04	+4.681D-08	.387	.276
2M-BUTENO	70.135	465.0	300.0	+1.057D+01	+3.997D-01	-1.946D-04	+3.314D-08	.340	.242
1-PENTENO-2	70.135	475.0	300.0	+1.947D+00	+4.182D-01	-2.178D-04	+4.405D-08	.189	.134
2-PENTENO-2	70.135	476.0	300.0	-1.429D+01	+4.601D-01	-2.541D-04	+5.455D-08	.236	.168
2M-PENTANO	86.178	497.5	367.0	-1.057D+01	+6.184D-01	-3.573D-04	+8.085D-08	.869	.618
3M-PENTANO	86.178	504.5	367.0	-2.386D+00	+5.690D-01	-2.870D-04	+5.033D-08	.132	.094
C6 e >	86.178	507.5	370.0	-4.413D+00	+5.820D-01	-3.119D-04	+6.494D-08	1.531	1.089
ÓLEO	300.000	791.0	1000.0	-6.664D+01	+2.073D+00	-1.193D-03	+2.667D-07	.000	32.801
Peso molecular do gás de arraste (no início) = PMGAS = 31.6610008168									
Peso molecular dos Produtos (gás + óleo) = PMPRO = 120.2124224030									
Gás de combustão :									
Número de componentes do gás de combustão=NGASC=4									
Componente	PM	Tcrit	Vcrit	Constantes da eq. do cp				gás % mol	
				AG	BG	CG	DG		
VAPOR	18.015	647.3	57.1	+3.224E+1	+1.924E-3	+1.055E-5	-3.596E-9	5.83	
CO2	44.01	304.1	93.9	+1.980E+1	+7.344E-2	-5.602E-5	+1.715E-8	7.1	
NITROGENIO	28.013	126.2	89.8	+3.115E+1	-1.357E-2	+2.680E-5	-1.168E-8	76.77	
OXIGENIO	31.999	154.6	73.4	+2.811E+1	-3.680E-6	+1.746E-5	-1.065E-8	10.30	
Condutividade térmica do reator (cal/cm.°C.s)= KR =+3.800E-2									
Correção hamb perdas não previstas(cal/cm.°C.s)=CORAMB =+1.010E+0									

Para o teste 02, os dados usados (já computadas as respostas do programa COND.FOR) são:

- arquivo principal de dados - idem teste 01 - vide tabela 4.2
- dados fixos - idem teste 01 - vide tabela 4.3
- dados variáveis - vide tabela 4.9
- propriedades físicas - vide tabela 4.12
- estimativas iniciais - vide tabela 4.10
- plano de passos - vide tabela 4.11

Tabela 4.9: Informações contidas no arquivo de dados variáveis para o teste 02

* DADOS VARIÁVEIS *	variav.	*60*****
Número de equações diferenciais a resolver	= NV	=10
Vazão mássica inicial de gás de arraste (kg/h)	= MG0	=61.5
Vazão mássica inicial de xisto (kg/h)	= MX0	=306.
Teor inicial dos orgânicos (%peso)	= Y0	=0.0925
Teor inicial de umidade no xisto (%peso)	= UMI0	=0.0442
Diâmetro médio das partículas (cm)	= DPART	=0.0218626
Vazão mássica de fumos (kg/h)	= MCOMB	=839.7
Fator de forma para a radiação	= FRX	=0.61

Tabela 4.10: Estrutura para os dados do arquivo de dados iniciais e/ou intermediários

- dados para o teste 02

altura inicial do passo = 0.0											
	Z	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	pressão	T_C	Conversão	Q	E
variável	.0000	.9977716	406.859757	134.0000	355.23898	86.0000	.931168	1182.000	.0000	.08325	.00925
derivada	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
unidade	inicial = 4.420E-002					derivada= 0.00E+000			bandeira= 0		

Tabela 4.11: Estrutura do arquivo com os dados necessários para o plano de execução por passos - dados utilizados para o teste 02

Arquivo do plano de execução por passos:									
Z(inic)	Z(fim)	Passo	NEL	Tamanho de cada elemento no passo					
				1	2	3	4	5	
0.	10.	2.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
10.	12.	1.	1	1.0					
12.	18.	2.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
18.	22.	1.	1	1.0					
22.	50.	2.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
50.	200.	5.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
200.	500.	10.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
500.	1500.	100.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	

Tabela 4.12: Estrutura do arquivo de propriedades físicas - dados para o teste 02

* PROPRIEDADES FÍSICAS *									
Gás de arraste :									
Número de componentes do gás de reciclo = NGASG =27									
Componente	PM	Tcrit	Vcrit	Constantes da eq. do cp				inic. % mol	prod. % mol
				AG	BG	CG	DG		
VAPOR	18.015	647.3	57.1	+3.224D+01	+1.924D-03	+1.055D-05	-3.596D-09	5.500	.000
H2S	34.080	373.2	98.6	+3.194D+01	+1.436D-03	+2.432D-05	-1.176D-08	11.520	8.195
OXIGENIO	31.999	154.6	73.4	+2.811D+01	-3.680D-06	+1.746D-05	-1.065D-08	.293	.208
CO	28.010	132.9	93.2	+3.087D+01	-1.285D-02	+2.789D-05	-1.272D-08	2.911	2.071
CO2	44.010	304.1	93.9	+1.980D+01	+7.344D-02	-5.602D-05	+1.715D-08	4.838	3.442
HIDROGENIO	2.016	33.2	65.1	+2.710D+01	+9.259D-03	-1.379D-05	+7.633D-09	7.040	5.008
METANO	16.043	190.4	99.2	+1.925D+01	+5.213D-02	+1.197D-05	-1.132D-08	24.693	17.567
ETANO	30.070	305.4	148.3	+5.409D+00	+1.781D-01	-6.938D-05	+8.713D-09	8.930	6.353
ETENO	28.054	282.4	130.4	+3.806D+00	+1.566D-01	-8.348D-05	+1.755D-08	5.594	3.980
PROPANO	44.094	369.8	203.0	-4.224D+00	+3.063D-01	-1.586D-04	+3.215D-08	5.604	3.987
PROPENO	42.081	364.9	181.0	+3.710D+00	+2.345D-01	-1.160D-04	+2.205D-08	8.203	5.835
ISOBUTANO	58.124	408.2	263.0	-1.390D+00	+3.847D-01	-1.846D-04	+2.895D-08	1.106	.787
N-BUTANO	58.124	425.2	255.0	+9.487D+00	+3.313D-01	-1.108D-04	-2.822D-09	1.191	.847
BUTENO-1	56.108	419.6	240.0	-2.994D+00	+3.532D-01	-1.990D-04	+4.463D-08	4.498	3.200
i-BUTENO-2	56.108	428.6	238.0	+1.832D+01	+2.564D-01	-7.013D-05	-8.989D-09	1.219	.867
c-BUTENO-2	56.108	435.6	234.0	+4.396D-01	+2.953D-01	-1.018D-04	-6.160D-10	1.427	1.015
ISOPENTANO	72.151	460.4	306.0	-9.525D+00	+5.066D-01	-2.729D-04	+5.723D-08	.463	.329
BUTADIENO	54.092	443.7	219.0	+1.120D+01	+2.724D-01	-1.468D-04	+3.089D-08	.945	.672
N-PENTANO	72.151	469.7	304.0	-3.626D+00	+4.873D-01	-2.580D-04	+5.305D-08	.340	.242
1-PENTENO	70.135	464.8	300.0	-1.346D-01	+4.329D-01	-2.317D-04	+4.681D-08	.387	.276
2M-BUTENO	70.135	465.0	300.0	+1.057D+01	+3.997D-01	-1.946D-04	+3.314D-08	.340	.242
i-PENTENO-2	70.135	475.0	300.0	+1.947D+00	+4.182D-01	-2.178D-04	+4.405D-08	.189	.134
c-PENTENO-2	70.135	476.0	300.0	-1.429D+01	+4.601D-01	-2.541D-04	+5.455D-08	.236	.168
2M-PENTANO	86.178	497.5	367.0	-1.057D+01	+6.184D-01	-3.573D-04	+8.085D-08	.869	.618
3M-PENTANO	86.178	504.5	367.0	-2.386D+00	+5.690D-01	-2.870D-04	+5.033D-08	.132	.094
C ₆ < >	86.178	507.5	370.0	-4.413D+00	+5.820D-01	-3.119D-04	+6.494D-08	1.531	1.089
ÓLEO	300.000	791.0	1000.0	-6.664D+01	+2.073D+00	-1.193D-03	+2.667D-07	.000	32.772
Peso molecular do gás de arraste (no início) =PMGAS = 31.6610008125									
Peso molecular dos Produtos (gás + óleo) =PMPRO = 120.1345892254									
Gás de combustão :									
Número de componentes do gás de combustão=NGASC =4									
Componente	PM	Tcrit	Vcrit	Constantes da eq. do cp				gás % mol	
				AG	BG	CG	DG		
VAPOR	18.015	647.3	57.1	+3.224E+1	+1.924E-3	+1.055E-5	-3.596E-9	5.83	
CO2	44.01	304.1	93.9	+1.980E+1	+7.344E-2	-5.602E-5	+1.715E-8	7.1	
NITROGENIO	28.013	126.2	89.8	+3.115E+1	-1.357E-2	+2.680E-5	-1.168E-8	76.77	
OXIGENIO	31.999	154.6	73.4	+2.811E+1	-3.680E-6	+1.746E-5	-1.065E-8	10.30	
Condutividade térmica do reator (cal/cm.°C.s)= KR =+3.800E-2									
Correção hamb perdas não previstas(cal/cm.°C.s)=CORAMB =+1.010E+0									

Para o teste 03:

- arquivo principal de dados - idem teste 01 - vide tabela 4.2
- dados fixos - idem teste 01 - vide tabela 4.3
- dados variáveis - vide tabela 4.13
- propriedades físicas - vide tabela 4.16
- estimativas iniciais - vide tabela 4.14
- plano de passos - vide tabela 4.15

Tabela 4.13: Informações contidas no arquivo de dados variáveis para o teste 03

* DADOS VARIÁVEIS *	variav.	*60*****
Número de equações diferenciais a resolver	= NV	=10
Vazão mássica inicial de gás de arraste (kg/h)	= MG0	=73.18
Vazão mássica inicial de xisto (kg/h)	= MX0	=278.
Teor inicial dos orgânicos (%peso)	= Y0	=0.0925
Teor inicial de umidade no xisto (%peso)	= UMI0	=0.0
Diâmetro médio das partículas (cm)	= DPART	=0.022
Vazão mássica de fumos (kg/h)	= MCOMB	=688.
Fator de forma para a radiação	= FRX	=0.61

Tabela 4.14: Estrutura para os dados do arquivo de dados iniciais e/ou intermediários

- dados para o teste 03

altura inicial do passo = 0.0

	Z	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	pressão	T_C	Conversão	Q	B
variável	.0000	.9981593	458.7203	112.7800	408.77407	100.0000	.931168	1200.000	.0000	.08325	.00925
derivada	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
umidade	inicial = 0.000E+000			derivada= 0.00E+000			bandeira= 0				

Tabela 4.15: Estrutura do arquivo com os dados necessários para o plano de execução

por passos - dados utilizados para o teste 03

Arquivo do plano de execução por passos:									
Z(inic)	Z(fim)	Passo	NEL	Tamanho de cada elemento no passo					
				1	2	3	4	5	
0.	10.	2.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
10.	12.	1.	1	1.0					
12.	18.	2.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
18.	22.	1.	1	1.0					
22.	50.	2.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
50.	200.	5.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
200.	500.	10.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	
500.	1500.	100.	5	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	

Tabela 4.16: Estrutura do arquivo de propriedades físicas - dados para o teste 03

* PROPRIEDADES FÍSICAS *									
Gás de arraste :									
Número de componentes do gás de reciclo = NGASG =27									
Componente	PM	Tcrit	Vcrit	Constantes da eq. do cp				inic. % mol	prod. % mol
				AG	BG	CG	DG		
VAPOR	18.015	647.3	57.1	+3.224D+01	+1.924D-03	+1.055D-05	-3.596D-09	5.500	.000
H2S	34.080	373.2	98.6	+3.194D+01	+1.436D-03	+2.432D-05	-1.176D-08	11.520	8.195
OXIGENIO	31.999	154.6	73.4	+2.811D+01	-3.680D-06	+1.746D-05	-1.065D-08	.293	.208
CO	28.010	132.9	93.2	+3.087D+01	-1.285D-02	+2.789D-05	-1.272D-08	2.911	2.071
CO2	44.010	304.1	93.9	+1.980D+01	+7.344D-02	-5.602D-05	+1.715D-08	4.838	3.442
HIDROGENIO	2.016	33.2	65.1	+2.710D+01	+9.259D-03	-1.379D-05	+7.633D-09	7.040	5.008
METANO	16.043	190.4	99.2	+1.925D+01	+5.213D-02	+1.197D-05	-1.132D-08	24.693	17.567
ETANO	30.070	305.4	148.3	+5.409D+00	+1.781D-01	-6.938D-05	+8.713D-09	8.930	6.353
ETENO	28.054	282.4	130.4	+3.806D+00	+1.566D-01	-8.348D-05	+1.755D-08	5.594	3.980
PROPANO	44.094	369.8	203.0	-4.224D+00	+3.063D-01	-1.586D-04	+3.215D-08	5.604	3.987
PROPENO	42.081	364.9	181.0	+3.710D+00	+2.345D-01	-1.160D-04	+2.205D-08	8.203	5.835
ISOBUTANO	58.124	408.2	263.0	-1.390D+00	+3.847D-01	-1.846D-04	+2.895D-08	1.106	.787
N-BUTANO	58.124	425.2	255.0	+9.487D+00	+3.313D-01	-1.108D-04	-2.822D-09	1.191	.847
BUTENO-1	56.108	419.6	240.0	-2.994D+00	+3.532D-01	-1.990D-04	+4.463D-08	4.498	3.200
t-BUTENO-2	56.108	428.6	238.0	+1.832D+01	+2.564D-01	-7.013D-05	-8.989D-09	1.219	.867
c-BUTENO-2	56.108	435.6	234.0	+4.396D-01	+2.953D-01	-1.018D-04	-6.160D-10	1.427	1.015
ISOPENTANO	72.151	460.4	306.0	-9.525D+00	+5.066D-01	-2.729D-04	+5.723D-08	.463	.329
BUTADIENO	54.092	443.7	219.0	+1.120D+01	+2.724D-01	-1.468D-04	+3.089D-08	.945	.672
N-PENTANO	72.151	469.7	304.0	-3.626D+00	+4.873D-01	-2.580D-04	+5.305D-08	.340	.242
1-PENTENO	70.135	464.8	300.0	-1.340D-01	+4.329D-01	-2.317D-04	+4.681D-08	.387	.276
2M-BUTENO	70.135	465.0	300.0	+1.057D+01	+3.997D-01	-1.946D-04	+3.314D-08	.340	.242
t-PENTENO-2	70.135	475.0	300.0	+1.947D+00	+4.182D-01	-2.178D-04	+4.405D-08	.189	.134
c-PENTENO-2	70.135	476.0	300.0	-1.429D+01	+4.601D-01	-2.541D-04	+5.455D-08	.236	.168
2M-PENTANO	86.178	497.5	367.0	-1.057D+01	+6.184D-01	-3.573D-04	+8.085D-08	.869	.618
3M-PENTANO	86.178	504.5	367.0	-2.386D+00	+5.690D-01	-2.870D-04	+5.033D-08	.132	.094
C ₆ e >	86.178	507.5	370.0	-4.413D+00	+5.820D-01	-3.119D-04	+6.494D-08	1.531	1.089
ÓLEO	300.000	791.0	1000.0	-6.664D+01	+2.073D+00	-1.193D-03	+2.667D-07	.000	32.772

Peso molecular do gás de arraste (no início) = PMGAS = 31.6610008125

Peso molecular dos Produtos (gás + óleo) = PMPRO = 120.1345892254

Gás de combustão :

Número de componentes do gás de combustão=NGASC=4

Componente	PM	Tcrit	Vcrit	Constantes da eq. do cp				gás % mol	
				AG	BG	CG	DG		
VAPOR	18.015	647.3	57.1	+3.224E+1	+1.924E-3	+1.055E-5	-3.596E-9	5.83	
CO2	44.01	304.1	93.9	+1.980E+1	+7.344E-2	-5.602E-5	+1.715E-8	7.1	
NITROGENIO	28.013	126.2	89.8	+3.115E+1	-1.357E-2	+2.680E-5	-1.168E-8	76.77	
OXIGENIO	31.999	154.6	73.4	+2.811E+1	-3.680E-6	+1.746E-5	-1.065E-8	10.30	

Condutividade térmica do reator (cal/cm.²C.s)= KR =+3.800E-2Correção hamb perdas não previstas(cal/cm.²C.s)=CORAMB =+1.010E+0

4.5 Programas para Auxiliar a Análise Paramétrica

Depois de alcançar resultados satisfatórios na simulação, procede-se a análise da dependência dos resultados em relação aos parâmetros do método numérico. Em seguida, procura-se identificar os parâmetros do modelo que influenciam na simulação, para que se possa ter uma idéia da importância de cada um deles, e também para questionar a origem dos valores usados para os principais parâmetros (dados, correlações e estimativas).

Para executar tais análises utiliza-se o mesmo programa principal, com a mudança proposta no parâmetro escolhido (um por vez). As respostas simuladas são comparadas entre os diversos casos. Desenvolveu-se três programas para auxiliar nestas tarefas, que são:

4.5.1 DERIV.FOR

Este pequeno programa tem a finalidade de encontrar a maior diferença e a diferença média entre as derivadas obtidas na interseção de dois passos em sequência. Ou seja, a resposta da simulação pode apresentar na interseção, a derivada pelo elemento a esquerda um pouco diferente do que pelo elemento da direita.

Em resumo, o que se avalia é a condição de continuidade na derivada primeira, já que a continuidade na variável é garantida na formulação da resolução numérica. Assim o resultado será melhor quanto menor for a discrepância entre os valores das derivadas nos pontos nodais.

O programa pede inicialmente pela entrada do caminho de diretório para ler o arquivo DERIV.RES que é gerado pelo programa principal. Depois pergunta se é desejável um gráfico e, em caso positivo, de qual variável. Para o gráfico, cria-se um arquivo (cujo nome também é perguntado) com as diferenças relativas percentuais entre as derivadas em cada ponto nodal que determina passos consecutivos. Depois de calcular todos os pontos, pergunta-se o nome do arquivo para armazenar os dados das diferenças média e maior. A relação percentual apresentada nas tabelas é sempre em função do maior valor para a derivada encontrada para a variável, diferente do caso do gráfico, onde a derivada anterior (pela esquerda) é utilizada. Exemplos destas tabelas estão no item da análise dos resultados no próximo capítulo.

4.5.2 DECISAO.FOR

Com este programa pretende-se agrupar o grande número de dados fornecidos nas simulações em um conjunto de informações essenciais para a análise da influência de um parâmetro qualquer.

A única informação passada ao programa via teclado é o nome do arquivo que contém todas as informações para a execução do programa, que são: a) o número de configurações a avaliar, incluindo o caso base; b) uma bandeira (1=ligado; 0=desligado) para indicar se é desejável relatório na tela do andamento do programa; c) o título a ser impresso no topo da tabela; d) o caminho para encontrar os arquivos VARI.RES, DERIV.RES e TW.RES de cada caso estudado; e) a chamada indicadora de cada caso a ser usada nas linhas e colunas das tabelas; f) o caminho (incluindo o nome sem a extensão) do arquivo de resposta.

O arquivo gerado terá obrigatoriamente a extensão (.ADP) e conterá duas tabelas. Na primeira colocam-se as maiores diferenças absolutas com o caso de referência (caso base) em cada uma das variáveis. A segunda mostra a média das diferenças. As variáveis mostradas na tabela são aquelas do modelo e mais as temperaturas de pele, a saber: porosidade, velocidade e temperatura do gás de arraste, velocidade e temperatura do xisto, pressão, temperatura do gás de aquecimento, concentração do querogênio e do betume e a conversão; a temperatura de parede do reator e a externa ao refratário.

Para as temperaturas de parede, calcula-se a média pela diferença pura e simples entre os valores listados no arquivo TW.RES. Nas variáveis do modelo, calcula-se a média da diferença entre uma curva e outra, utilizando-se a expressão 4.37

$$\overline{\Delta V_i} = \sum_{el=1}^N \frac{h_{el}}{1500} \cdot \left[\frac{(PV_i^1 - PV_0^1 + PV_i^3 - PV_0^3)}{2} + \frac{(PV_i^2 - PV_0^2 - PV_i^4 + PV_0^4)}{12} \cdot h_{el} \right], \quad (4.37)$$

onde

$\overline{\Delta V_i}$ = diferença média da variável V qualquer no caso i ($i = 20el$ = número do elemento dentro do passo considerado)

N = número total de elementos de $Z = 0$ a $Z = 1500$ cm

h_{el} = tamanho do elemento

PV_i^k = parâmetro k para a variável V no caso i; $i=0$ é o caso de referência.

A equação acima é obtida pela média ponderada (usando o tamanho de

cada elemento como peso) da diferença média de cada elemento. Pela integração da diferença no valor das variáveis, para cada caso, no intervalo correspondente, obtém-se a média para o elemento (diferença das áreas de cada curva).

O tempo de residência, é obtido através do valor da velocidade média do xisto. A velocidade média é calculada de acordo com a expressão 4.38

$$\overline{v_{xi}} = \sum_{el=1}^N \frac{h_{el}}{1500} \cdot \left[\frac{(P(v_x)_i^1 + P(v_x)_i^3)}{2} + \frac{(P(v_x)_i^2 - P(v_x)_i^4)}{12} \cdot h_{el} \right], \quad (4.38)$$

onde

$\overline{v_{xi}}$ = velocidade média do xisto para o caso i

$P(v_x)_i^K$ = parâmetro (K) do polinômio da velocidade do xisto para o caso i.

Com a finalidade de avaliar melhor e mais rapidamente o que acontece com os resultados pela variação de um dado parâmetro, utiliza-se um fator $(f_{dif})_i$ para representar uma relação média para todas as variáveis entre todos os casos

$$(f_{dif})_i = \frac{\sum_{nd=1}^{ND} \left(\sum_{v=1}^{12} \left| \frac{PV_i^1}{PV_0^1} - 1 \right| \right)}{N_T}, \quad (4.39)$$

onde

PV_i^1 = valor da variável dependente v , $V = (\varepsilon, v_g, T_g, \dots, T_w, T_{wi})$ no ponto nodal nd

i = identifica o caso estudado, sendo igual a zero para o caso base

ND e nd = referem-se ao número de pontos nodais

N_T = número total de parcelas das somatórias incluindo todas as variáveis.

4.5.3 GRAFICOS.FOR

Este programa é utilizado para organizar as tabelas com informações para construir os gráficos. A filosofia de utilização repete os estilos anteriores, tanto assim que o arquivo de entrada difere do arquivo usado no DECISAO.FOR no nome do caminho do arquivo de resposta (onde o nome do arquivo é dispensado); e incluindo também outros dados: a) abreviatura de dois caracteres para o parâmetro em estudo; e número de configurações a analisar; b) identificação de qual configuração será usada (a primeira sempre será o caso base); c) número identificando o tipo do gráfico; d) nome do arquivo contendo os pontos (Z) que deverão constar na tabela dos gráficos 1 e 2, e (ARQZ3S.PAT) no gráfico 3; e) número da variável a analisar; f) número de sequência.

O número da variável pode ter valor de um a doze, sendo um a dez as variáveis do modelo; onze para a temperatura de parede do reator e doze para a temperatura de parede do isolamento externo.

O tipo do gráfico é identificado por um número, sendo o número 1 para gráficos relacionando uma variável qualquer (V), com os diversos casos, contra a variável independente (Z). O tipo 2 é para a diferença relativa percentual (ΔV_i) contra Z , onde

$$\Delta V_i = \frac{V_i - V_0}{V_i} \cdot 100 . \quad (4.40)$$

Finalmente, no gráfico 3 relaciona-se a influência sobre uma variável qualquer contra os valores adotados para o parâmetro.

Capítulo 5

RESULTADOS E ANÁLISES

Neste capítulo discutem-se os resultados obtidos pela simulação, a comparação com dados experimentais, o ajuste do modelo e a influência dos principais parâmetros utilizados na modelagem.

5.1 Validação do Modelo Matemático

Depois de expor a metodologia utilizada, os resultados obtidos são apresentados e comparados com os dados experimentais.

Para avaliar se o modelo matemático proposto neste trabalho pode representar o modelo físico, procede-se a comparação com três testes experimentais. O teste 01, com a conversão final em 75%, apresentou as melhores condições de estabilidade na operação da planta, e por isto é que este teste torna-se o mais importante.

Os dados coletados na planta que serão usados na comparação, em ordem decrescente de importância, são:

- a) a conversão final;
- b) as temperaturas de pele do reator (T_w), tomadas em sete pontos diferentes, a saber: 129 cm, 392 cm, 448 cm, 787 cm, 1160 cm e 1460 cm;
- c) a temperatura de saída do gás de combustão (T_C);
- d) a temperatura de saída do gás de arraste (T_g), também denominada de temperatura de retortagem;
- e) as temperaturas de pele do isolamento externo, somente para o teste 01.

5.1.1 Teste 01

Os dados utilizados para executar o teste 01 estão nas tabelas 4.2 a 4.7. E o resultado obtido está na tabela 5.1 em forma compacta.

Tabela 5.1: Teste 01 - Resumo do resultado

Altura Z(cm):	ϵ	v_g cm/s	T_g °C	v_x cm/s	T_x °C	Pressão atm	T_C °C	Conv. X	Quer. Q	Bet. B	T_{w_r} °C	T_{w_i} °C
0.00	.99771	400.66	127.78	349.20	76.35	.93116	1187.22	.00000	.08325	.00925	1005.23	97.23
10.00	.99751	394.97	121.99	320.53	96.38	.93114	1178.67	.00000	.08325	.00925	995.66	96.53
20.00	.99739	451.72	97.24	305.80	99.93	.93106	1170.48	.00000	.08325	.00925	974.50	95.07
30.00	.99737	497.65	90.72	303.31	103.37	.93097	1162.59	.00000	.08325	.00925	959.91	94.09
50.00	.99740	524.80	110.52	307.03	124.08	.93079	1147.34	.00000	.08325	.00925	941.34	92.73
100.00	.99770	588.50	157.00	347.88	168.40	.93032	1111.74	.00000	.08325	.00925	907.68	90.19
200.00	.99819	691.57	232.11	441.74	241.00	.92945	1048.54	.00000	.08325	.00925	856.91	86.22
300.00	.99847	773.09	291.37	520.92	298.60	.92870	993.76	.00002	.08087	.01162	816.55	82.93
400.00	.99864	839.56	339.57	587.13	345.50	.92803	945.82	.00023	.07621	.01625	783.23	80.12
500.00	.99876	894.62	379.39	643.06	384.36	.92740	903.62	.00138	.06958	.02278	755.36	77.68
600.00	.99884	940.61	412.57	690.71	416.96	.92681	866.33	.00562	.06143	.03054	731.88	75.55
700.00	.99891	978.93	440.13	731.57	444.46	.92625	833.49	.01735	.05247	.03842	710.06	73.55
800.00	.99896	1010.79	462.96	766.81	467.95	.92571	804.38	.04319	.04340	.04510	693.49	71.94
900.00	.99900	1037.36	481.83	797.62	488.36	.92519	778.45	.09054	.03483	.04928	679.18	70.50
1000.00	.99903	1059.96	497.49	825.10	506.26	.92468	755.32	.16486	.02718	.05006	666.79	69.23
1100.00	.99906	1080.05	510.73	850.20	521.97	.92418	734.65	.26643	.02065	.04719	656.04	68.09
1200.00	.99908	1099.02	522.31	873.65	535.56	.92369	716.18	.38829	.01533	.04124	646.71	67.08
1300.00	.99911	1117.58	532.82	895.76	546.94	.92320	699.66	.51726	.01115	.03349	638.58	66.18
1400.00	.99913	1135.57	542.47	916.33	556.08	.92272	684.88	.63849	.00798	.02544	631.46	65.37
1500.00	.99914	1152.24	551.20	934.91	563.19	.92224	671.63	.74114	.00565	.01829	625.14	64.65

Fazendo uma análise das figuras 5.1 e 5.2 e das tabelas 5.2, 5.3 e 5.4 que comparam os resultados obtidos com os dados experimentais, pode-se afirmar que houve uma boa concordância entre eles. Para a temperatura de parede do reator (T_{w_r}), o perfil calculado passa entre os pontos experimentais, ficando quatro acima e três abaixo da curva do resultado obtido na simulação. Os desvios máximos ocorrem entre $Z = 567$ cm e $Z = 1460$ cm.

É preciso salientar que os dados foram coletados em uma instalação-piloto, onde ocorrem frequentemente problemas no regime de trabalho, assim como numa planta industrial. Portanto, esta instalação não é a ideal para obter dados precisos para a determinação de parâmetros, mas por outro lado oferece um fator de aproximação bem maior para o projeto de uma unidade em escala industrial do que um equipamento de bancada.

A dificuldade principal é prever as influências externas, que dependem de um número grande de fatores, para os quais um tratamento mais rigoroso é inacessível. Como é o caso da interação térmica através dos mecanismos de condução e radiação com a estrutura metálica, com outros equipamentos próximos ao reator e ainda a

TESTE 1**LEGENDA :**

- | | |
|-----------------------------|--------------------------|
| ⊙ T_{xisto} | + $T_{ga} \text{ (exp)}$ |
| □ $T_{gas \text{ arraste}}$ | * $T_{wi} \text{ (exp)}$ |
| * $T_{gas \text{ comb.}}$ | ☆ $T_{wr} \text{ (exp)}$ |
| ☆ $T_{w \text{ reator.}}$ | △ $T_{w \text{ isol.}}$ |
| ◇ $T_c \text{ (exp)}$ | |

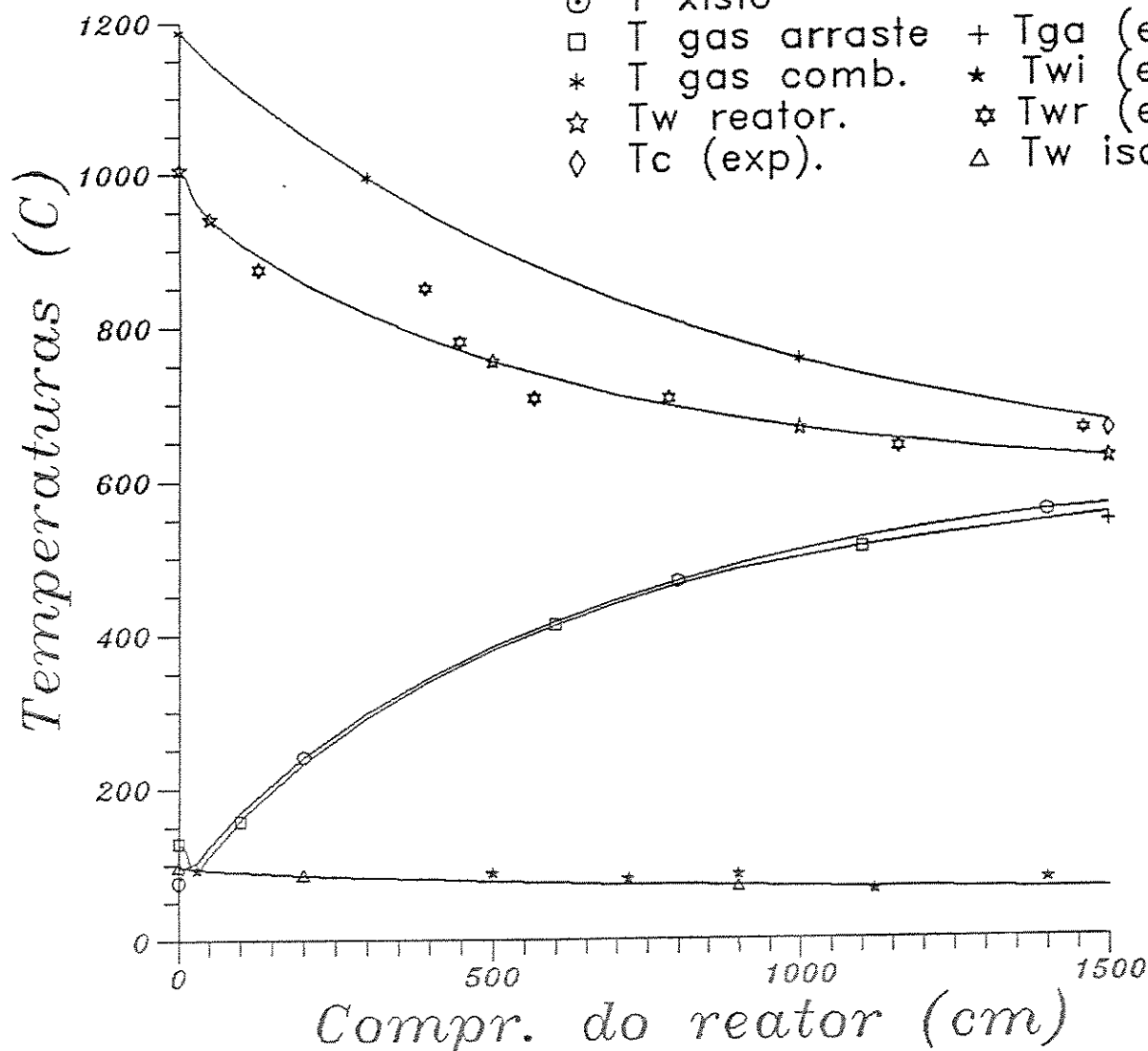


Figura 5.1: Comparação dos resultados numéricos das temperaturas com os dados experimentais — TESTE 01

perda por convecção devido ao vento. Para reforçar este aspecto, observa-se a relação da temperatura externa do isolamento (T_{wi}) com Z . Pelo gráfico 5.1, nos pontos onde as temperaturas experimentais da parede externa do isolamento são maiores do que os valores calculados, ocorre o mesmo com T_{wr} . Assim, sugere-se que a influência

Tabela 5.2: Comparação com os resultados experimentais – T_{w_i} – Teste 01

Altura	T_{w_i} ($^{\circ}C$)		
Z(cm):	Experimental	Simulação	$\frac{(calc-exp)}{exp}$ (%)
129	875	891.47	+1.88
392	850	785.68	-7.57
448	780	769.25	-1.38
567	707	739.21	+4.56
787	705	695.51	-1.35
1160	641	650.28	+1.45
1460	661	627.58	-5.06

de alguns ou um conjunto de fatores citados como, por exemplo, a existência de um ciclone ou um tanque que desviem o vento sobre uma determinada porção do reator, irá modifica os balanços de energia e as temperaturas de parede. Há de se avaliar ainda, o problema da precisão dos instrumentos e os métodos de medida. Ideal seria ter disponíveis os dados experimentais sobre as velocidades e as temperaturas das partículas e do gás de arraste ao longo do reator. Mas estas variáveis individuais não foram determinadas pela dificuldade em obter dados consistentes para elas, devido à influência de fatores pouco estudados; ou ainda pela complicação exigida nos aparatos.

Tabela 5.3: Comparação com os resultados experimentais – T_{w_i} – Teste 01

Altura	T_{w_i} ($^{\circ}C$)		
Z(cm):	Experimental	Simulação	$\frac{(calc-exp)}{exp}$ (%)
30	93	94.09	+1.17
500	88	77.67	-11.74
720	80	73.50	-8.13
900	85	70.51	-17.05
1120	64	68.09	+6.39
1400	76	65.38	-13.97

A figura 5.2.a utiliza toda a faixa da temperatura para que se possa avaliar melhor as diferenças entre o valor simulado e o experimental. As diferenças relativas respectivas encontram-se na figura 5.2.c. Ainda sobre a figura 5.1.a das temperaturas,

Tabela 5.4: Comparação com os resultados experimentais – conversão – Teste 01

Outras variáveis:			
Variável	Experimental	Simulação	$\frac{(calc-exp)}{exp}$ (%)
Conversão (%)	75.0	74.1143	-1.18
$T_C _{z=1500}$ ($^{\circ}C$)	660	671.6	+1.76
$T_g _{z=1500}$ ($^{\circ}C$)	542	551.2	+1.70

observam-se os comportamentos da temperatura do gás de arraste (T_g) e da temperatura das partículas (T_x). No início, T_g é maior que T_x , e o gás aquece o xisto. Em $Z = 30$ cm as temperaturas se igualam. Depois disto, T_x é sempre maior que T_g ; porque existe o efeito do transporte de calor por radiação para a partícula do xisto. Considera-se ainda que as temperaturas do gás de aquecimento (T_C) e do gás de arraste (T_g) calculadas na saída aproximam-se muito bem dos valores experimentais, onde os desvios ficam em torno de 1,7%.

O resultado para a conversão é bastante satisfatório, com uma diferença de 1,2% em relação ao experimental. As curvas da concentração do querogênio e do betume estão próximas ao eixo das abcissas porque seus valores são mostrados em unidades de massa de matéria orgânica pela massa de xisto. Como se pode averiguar, a reação começa entre 200 e 250 cm acima da base do reator, que é onde a concentração de querogênio começa a diminuir. A concentração de betume, em uma primeira fase aumenta até chegar a um ponto de máximo, e daí decresce.

Os perfis de velocidade podem ser visualizados na figura 5.2.d. Pelo problema de resolução do gráfico, uma pequena redução na velocidade do gás de arraste (v_g) no início ($Z < 12$ cm) não é mostrada, e isto ocorre porque T_g diminui em função da troca de calor com o xisto ($T_x < T_g$). Depois desta fase, apesar de T_g continuar a diminuir, v_g aumenta bastante, porque aumenta a vazão de gás com o vapor liberado na secagem do xisto, que ocorre nesta região. Finalmente, quando T_x passa a superar T_g , a velocidade continua a ficar maior. O efeito dessas oscilações na velocidade das partículas de xisto (v_x) também é observado pelo mesmo gráfico. A velocidade das partículas começa a reduzir por causa daquele efeito inicial em v_g . Este fato continua até um pouco além do ponto onde a velocidade do gás recomeça a subir, e daí v_x também passa a aumentar.

TESTE 1

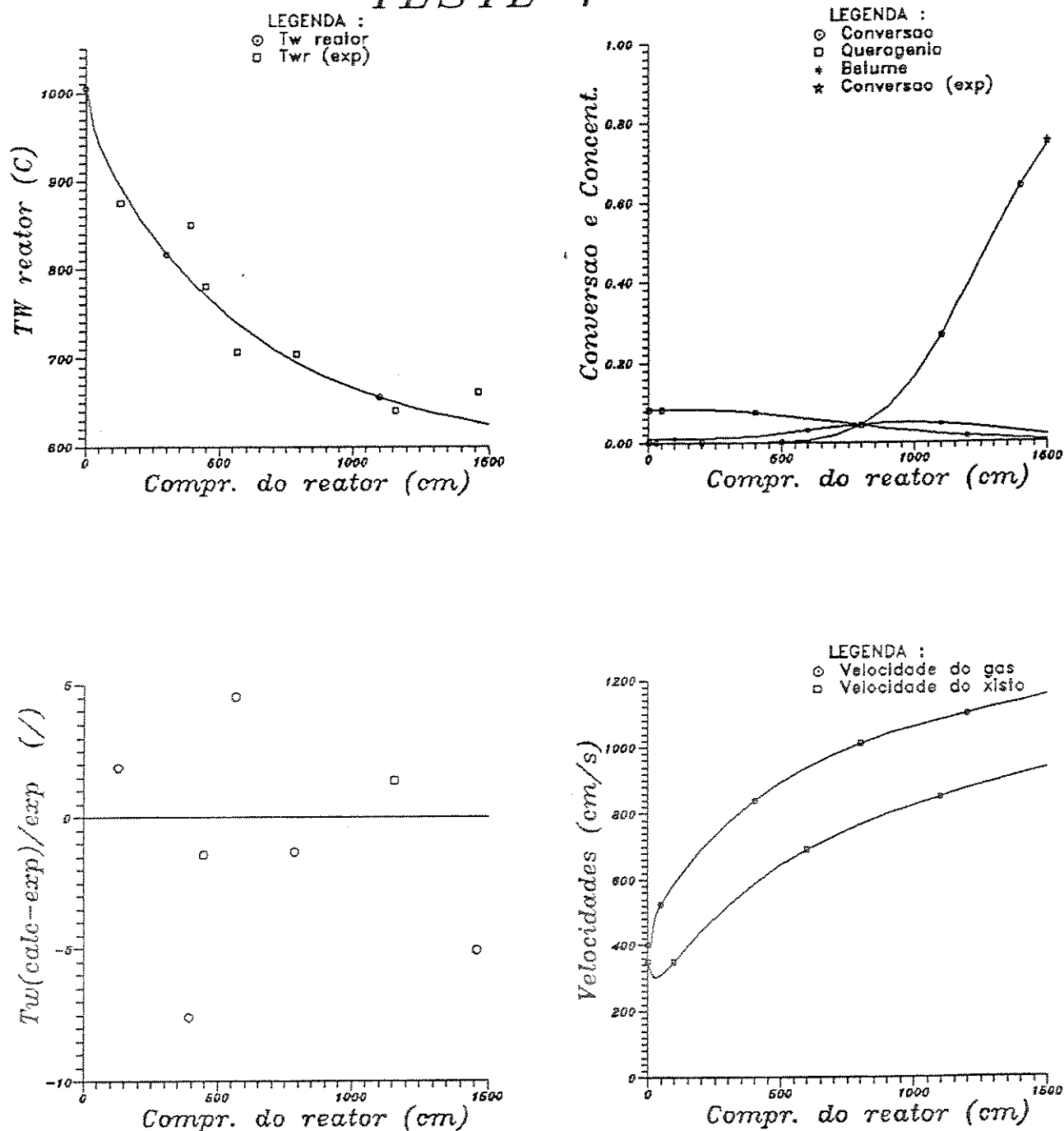


Figura 5.2: Comparação dos resultados numéricos com os dados experimentais para
 (a) T_w , (b) Conversão (c) ΔT_w , (d) velocidades — TESTE 01

Na figura 5.3 relaciona-se a porosidade e a pressão ao longo da variável independente (Z). A pressão decresce com um perfil aproximadamente linear. A po-

rosidade cai no início, acompanhando o perfil de v_z . Depois, até a região intermediária do reator, a porosidade cresce, quando então começa a estabilizar em torno de 0.999, caracterizando o sistema como altamente diluído.

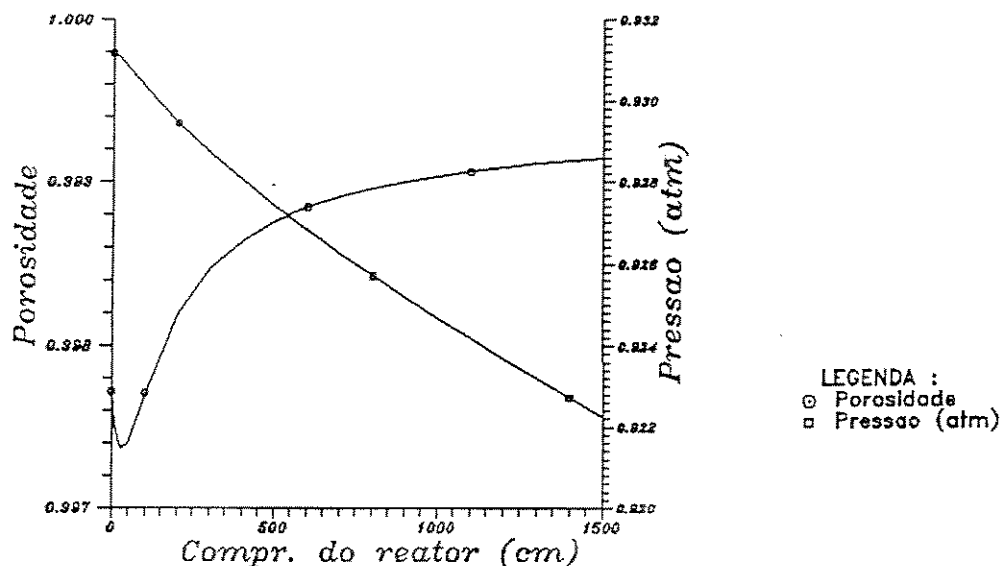


Figura 5.3: Resultados numéricos para a porosidade e pressão — TESTE 01

Estas oscilações e mudanças na inclinação dos perfis, assim como ocorrem em outras variáveis torna a região inicial do reator de difícil resolução. É nesta região que se concentra um grande número de elementos.

5.1.2 Testes 02 e 03

Os dados utilizados para executar estes testes estão nas tabelas 4.2 a 4.15. E os resultados obtidos estão nas tabelas 5.5 e 5.6 em forma compacta. A análise dos resultados é embasada na observação das tabelas 5.7 e 5.8 e figuras 5.4, 5.5, 5.6, 5.7, 5.8 e 5.9.

Repetem-se as mesmas observações feitas no teste 01 para o comportamento das variáveis, porque as novas condições testadas produzem resultados semelhantes. A comparação dos resultados analíticos, com os dados experimentais de mais dois testes, confere ao modelo uma confiabilidade maior na sua comprovação; visto que as condições de operação são distintas, dando inclusive conversões bem superiores àquela obtida no teste 01.

Tabela 5.5: Teste 02 - Resumo do resultado

Altura Z(cm):	ϵ	v_g cm/s	T_g °C	v_x cm/s	T_x °C	Pressão atm	T_C °C	Conv. X	Quer. Q	Bet. B	T_{w_1} °C	T_{w_2} °C
0.00	.99777	406.85	134.00	355.23	86.00	.93116	1182.00	.00000	.08325	.00925	1009.27	97.46
10.00	.99761	428.22	116.42	331.46	100.14	.93112	1174.46	.00000	.08325	.00925	1000.27	96.81
20.00	.99756	496.30	91.93	325.06	100.14	.93103	1167.22	.00000	.08325	.00925	979.81	95.40
30.00	.99752	508.05	100.53	319.51	112.63	.93095	1160.21	.00000	.08325	.00925	966.15	94.49
50.00	.99752	534.63	120.01	320.17	133.91	.93079	1146.68	.00000	.08325	.00925	948.82	93.23
100.00	.99778	598.76	167.07	357.60	179.07	.93033	1114.91	.00000	.08325	.00925	918.02	90.91
200.00	.99824	703.87	244.12	451.97	253.71	.92949	1057.96	.00000	.08313	.00936	872.09	87.30
300.00	.99851	787.93	305.59	533.24	313.61	.92874	1008.06	.00004	.07996	.01252	835.58	84.31
400.00	.99868	857.10	356.05	601.87	362.83	.92807	964.01	.00046	.07444	.01801	805.35	81.74
500.00	.99880	914.80	398.03	660.34	403.94	.92745	924.97	.00270	.06672	.02552	780.02	79.49
600.00	.99888	963.19	433.15	710.57	438.73	.92687	890.30	.01101	.05745	.03402	758.62	77.52
700.00	.99895	1003.45	462.26	754.07	468.31	.92631	859.61	.03376	.04752	.04185	738.48	75.65
800.00	.99900	1036.81	486.17	792.10	494.06	.92577	832.29	.08261	.03782	.04703	723.30	74.15
900.00	.99904	1065.05	505.89	826.19	516.93	.92525	807.87	.16854	.02899	.04791	710.20	72.81
1000.00	.99907	1090.37	522.54	857.71	537.34	.92474	786.02	.29453	.02145	.04380	698.89	71.61
1100.00	.99910	1115.05	537.41	887.65	555.14	.92424	766.47	.44885	.01535	.03562	689.17	70.55
1200.00	.99913	1139.97	551.40	916.09	569.76	.92374	748.98	.60590	.01068	.02576	680.77	69.61
1300.00	.99916	1164.02	564.58	942.23	580.99	.92324	733.33	.73946	.00728	.01681	673.42	68.77
1400.00	.99918	1185.42	576.44	965.11	589.52	.92276	719.30	.83731	.00489	.01015	666.88	68.01
1500.00	.99919	1203.26	586.60	984.34	596.35	.92229	706.71	.90194	.00324	.00582	661.05	67.33

Tabela 5.6: Teste 03 - Resumo do resultado

Altura Z(cm):	ϵ	v_g cm/s	T_g °C	v_x cm/s	T_x °C	Pressão atm	T_C °C	Conv. X	Quer. Q	Bet. B	T_{w_1} °C	T_{w_2} °C
0.00	.99815	458.72	112.78	408.77	100.00	.93116	1200.00	.00000	.08325	.00925	1011.65	97.759
10.00	.99804	463.90	117.08	384.01	117.99	.93114	1190.75	.00000	.08325	.00925	1001.29	97.007
20.00	.99792	472.08	123.90	362.52	133.08	.93111	1181.90	.00000	.08325	.00925	979.77	95.504
30.00	.99782	482.54	132.63	345.33	145.86	.93106	1173.41	.00000	.08325	.00925	966.42	94.550
50.00	.99768	506.69	152.84	325.59	167.43	.93095	1157.09	.00000	.08325	.00925	946.98	93.132
100.00	.99776	564.93	201.64	337.26	212.73	.93055	1119.12	.00000	.08325	.00925	911.92	90.474
200.00	.99819	657.23	278.98	416.27	287.19	.92976	1052.39	.00001	.08160	.01089	860.12	86.352
300.00	.99845	729.24	339.15	486.94	345.78	.92905	995.33	.00023	.07624	.01623	819.78	82.996
400.00	.99862	787.33	387.49	545.62	393.00	.92842	946.02	.00194	.06798	.02433	787.08	80.163
500.00	.99873	835.18	426.77	594.95	431.82	.92783	903.13	.00968	.05765	.03394	760.20	77.738
600.00	.99881	875.64	458.68	637.49	464.26	.92728	865.67	.03371	.04652	.04285	737.87	75.646
700.00	.99888	911.19	484.15	675.72	491.67	.92674	833.03	.08883	.03580	.04847	717.40	73.702
800.00	.99894	944.76	504.61	712.13	515.45	.92622	804.39	.18744	.02638	.04877	702.02	72.149
900.00	.99899	978.53	521.72	748.69	536.20	.92571	779.14	.32949	.01670	.04332	689.00	70.788
1000.00	.99904	1012.73	536.99	785.56	553.77	.92520	756.86	.49565	.01282	.03382	678.00	69.597
1100.00	.99908	1045.51	551.22	820.96	567.72	.92470	737.20	.65430	.00858	.02339	668.63	68.551
1200.00	.99911	1074.23	564.21	852.39	578.23	.92422	719.84	.78058	.00564	.01465	660.52	67.627
1300.00	.99914	1097.43	575.48	878.37	586.21	.92375	704.46	.86800	.00366	.00854	653.41	66.808
1400.00	.99916	1115.29	584.83	898.82	592.59	.92330	690.82	.92315	.00236	.00474	647.12	66.079
1500.00	.99917	1128.81	592.40	914.55	597.92	.92286	678.69	.95598	.00151	.00255	641.54	65.428

Quando T_x alcança 100°C aproximadamente, percebe-se através da figura 5.4, que a temperatura fica constante. Nesta fase, considera-se a ocorrência da evaporação da umidade do xisto. O intervalo em que isto ocorre é pequeno, mas é suficiente para provocar diferenças no resultado final.

As distorções nos resultados numéricos quando comparados com os dados experimentais, para a temperatura de parede dos dois testes, são da ordem de 6%. Como estas distorções seguem a mesma tendência observada para o teste 01, sugere-se

TESTE 2

LEGENDA :

- | | | | |
|---|---------------|---|------------|
| ⊙ | T xisto | + | Tga (exp) |
| □ | T gas arraste | * | Tw i (exp) |
| * | T gas comb. | ☆ | Tw r (exp) |
| ☆ | Tw reator. | △ | Tw isol. |
| ◇ | Tc (exp). | | |

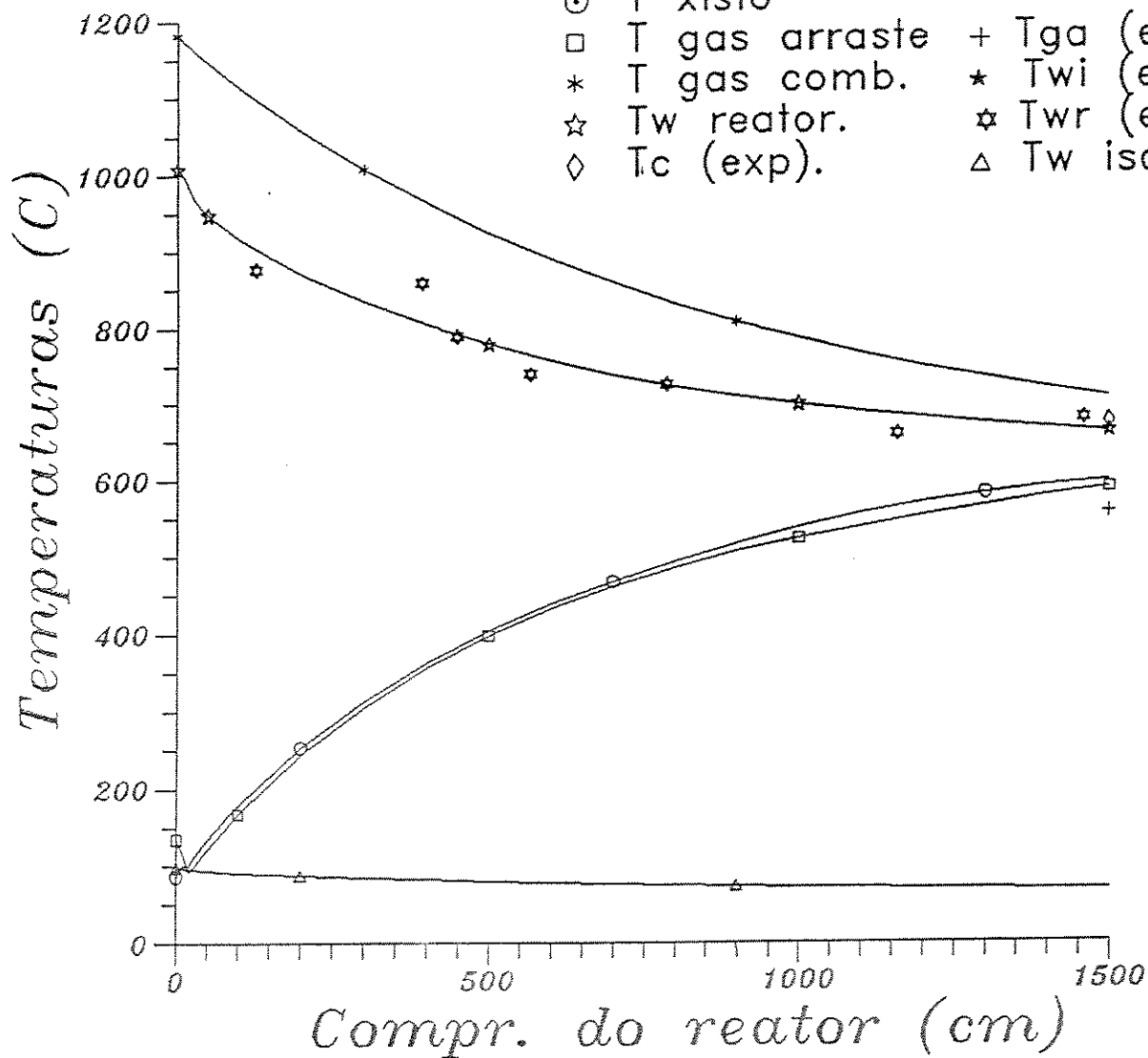


Figura 5.4: Comparação dos resultados numéricos das temperaturas com os dados experimentais — TESTE 02

que estas são consequências de influências externas não computadas. Nas temperaturas finais das correntes gasosas é que o desvio relativo foi um pouco maior, chegando a 10%, mas estas diferenças podem ser consideradas como toleráveis.

Importante é verificar que os resultados na conversão são bem próximos aos

Tabela 5.7: Comparação com os resultados experimentais – T_{w_r} e T_{w_i} – Testes 02 e 03

Altura Z(cm):	$T_{w_r} \text{ (}^{\circ}\text{C)}$					
	Teste 02			Teste 03		
	Experimental	Simulação	$\frac{(calc-exp)}{exp} \text{ (}\%)$	Experimental	Simulação	$\frac{(calc-exp)}{exp} \text{ (}\%)$
129	878	903.3	+2.88	868	895	+3.11
392	860	807.6	-6.09	840	789.5	-6.012
448	790	792.6	+0.33	753	773.5	+2.722
567	740	765	+3.37	709	744.7	+5.03
787	726	725	-0.14	706	703	+0.14
1160	659	684	+3.79	642	663.6	+3.36
1460	678	663.2	-2.18	664	643.7	-3.06

Tabela 5.8: Comparação com os resultados experimentais – conversão – Testes 02 e 03

Outras Variáveis						
Altura Z(cm):	Teste 02			Teste 03		
	Experimental	Simulação	$\frac{(calc-exp)}{exp} \text{ (}\%)$	Experimental	Simulação	$\frac{(calc-exp)}{exp} \text{ (}\%)$
Conversão (%)	92.0	90.195	-1.96	95.0	95.59	+0.62
$T_C _{z=1500} \text{ (}^{\circ}\text{C)}$	673	706.7	+5.01	662	678.7	+2.52
$T_g _{z=1500} \text{ (}^{\circ}\text{C)}$	554	586.6	+5.88	535	592.4	+10.73

encontrados experimentalmente na planta piloto, dando desvios bastante aceitáveis (aproximadamente 2%).

5.2 Identificação de Parâmetros.

Acontece com frequência, quando se trabalha com modelos matemáticos de sistemas físicos reais, a necessidade de determinar o valor de certos parâmetros, com o objetivo de poder reproduzir melhor os resultados experimentais. Para este trabalho, devido às características do modelo adotado e ao fato do número de testes experimentais ser pequeno, tem-se apenas um parâmetro a ajustar.

Ao obter resultados com o modelo inicial, verificou-se que o perfil simulado da temperatura na parede do reator estava muito abaixo do perfil experimental. Isto

TESTE 2

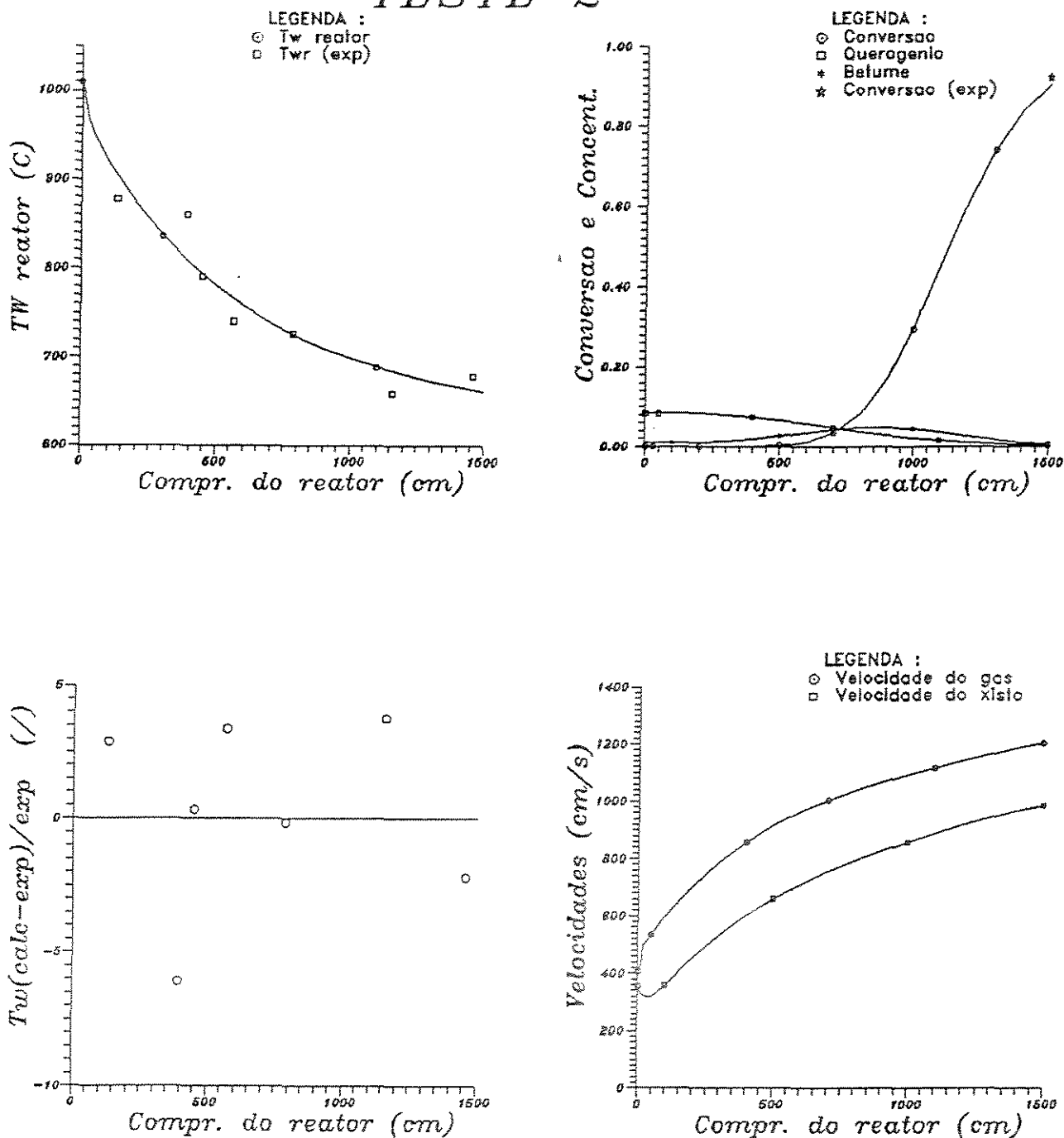


Figura 5.5: Comparação dos resultados numéricos com os dados experimentais para (a) T_w , (b) Conversão (c) ΔT_w , (d) velocidades — TESTE 02

motivou a reavaliação do modelo, introduzindo modificações no tratamento das trocas térmicas por radiação, e testando novas correlações para coeficientes de película. A

TESTE 3

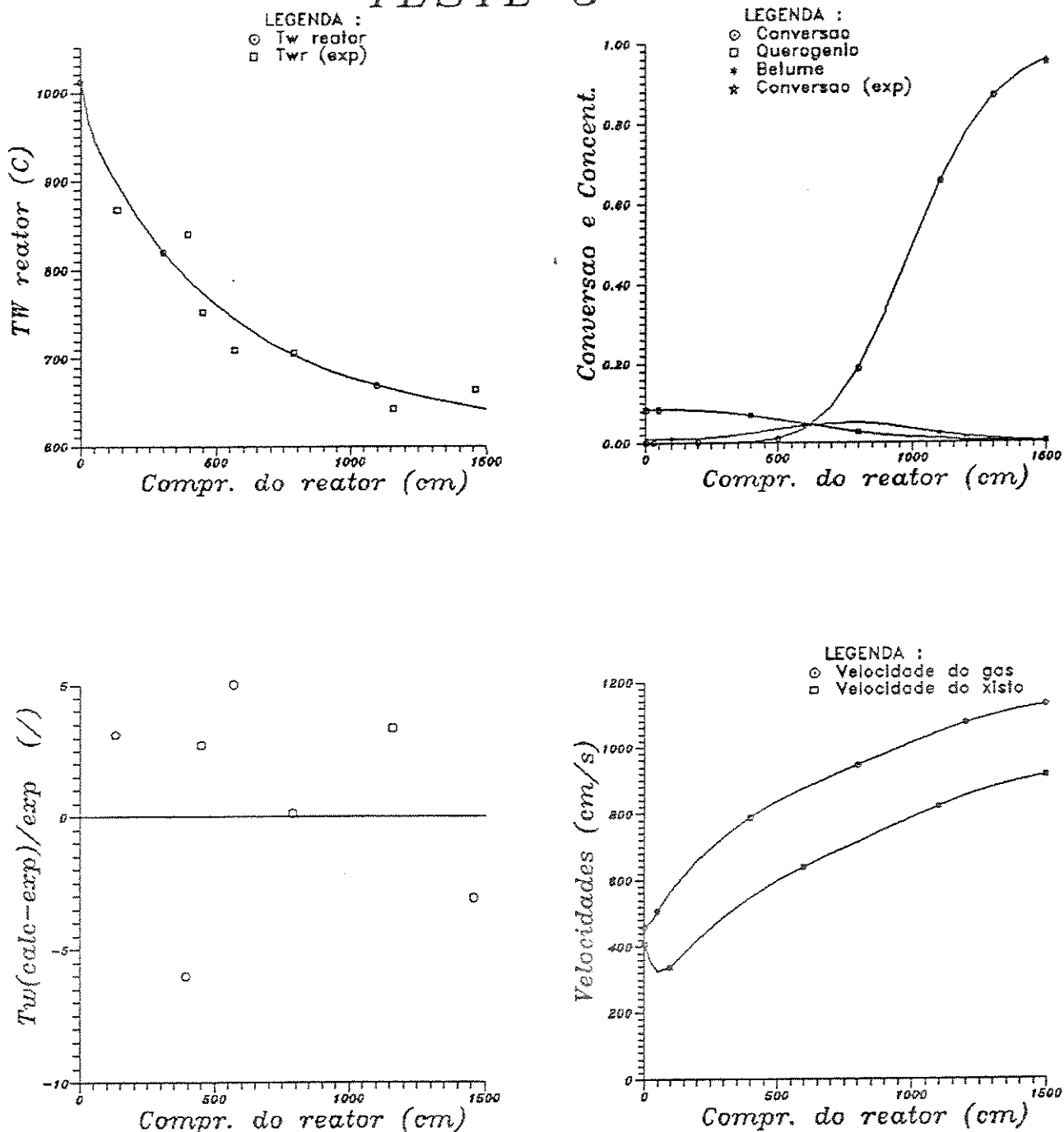


Figura 5.6: Comparação dos resultados numéricos com os dados experimentais para (a) T_w , (b) Conversão (c) ΔT_w , (d) velocidades — TESTE 03

modificação principal consistiu em usar um fator geométrico para a área efetiva de troca térmica, por radiação, das partículas (F_{RX}). Nenhum estudo específico demons-

TESTE 3

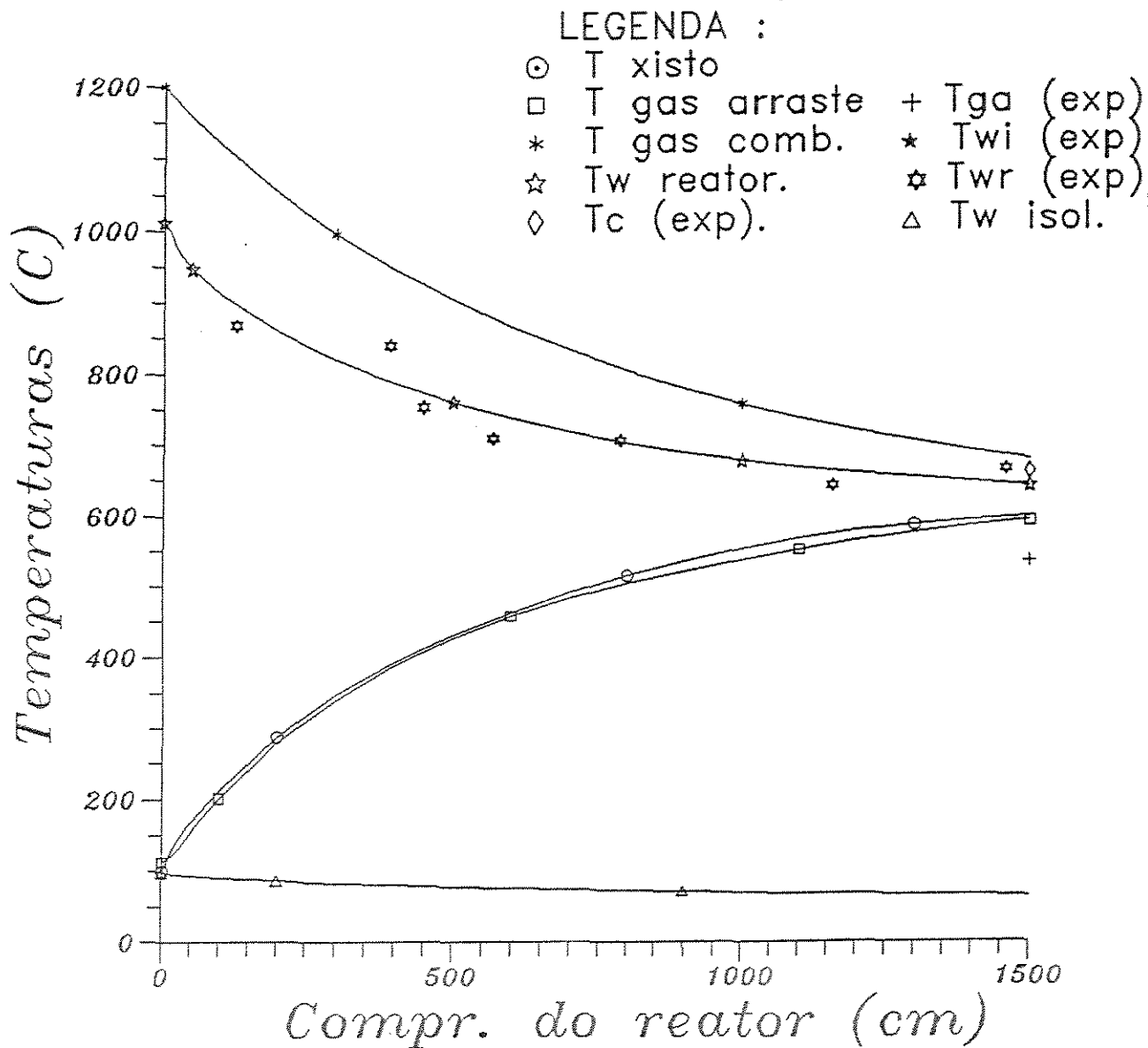


Figura 5.7: Comparação dos resultados numéricos das temperaturas com os dados experimentais — TESTE 03

trando a avaliação deste fator para sistemas particulados foi encontrado, o que obrigou a utilização dos dados experimentais no ajuste.

Com os dados do teste 01, simulou-se o reator para F_{RX} igual a 1.0, 0.7, 0.6, 0.62 e 0.61 sucessivamente (gráfico 5.10). Admite-se o último fator (0.61) como o me-

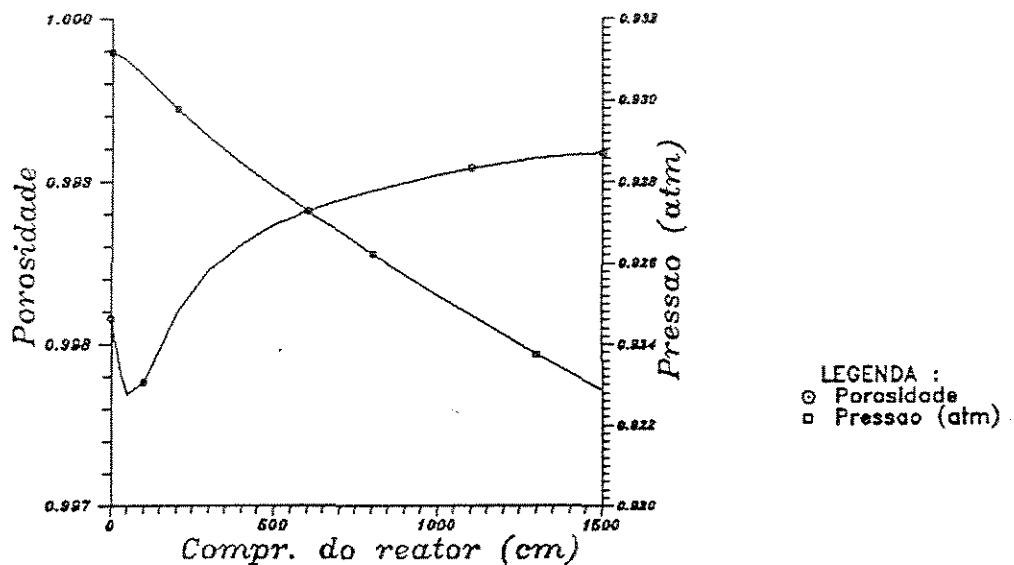


Figura 5.8: Resultados numéricos para a porosidade e pressão — TESTE 02

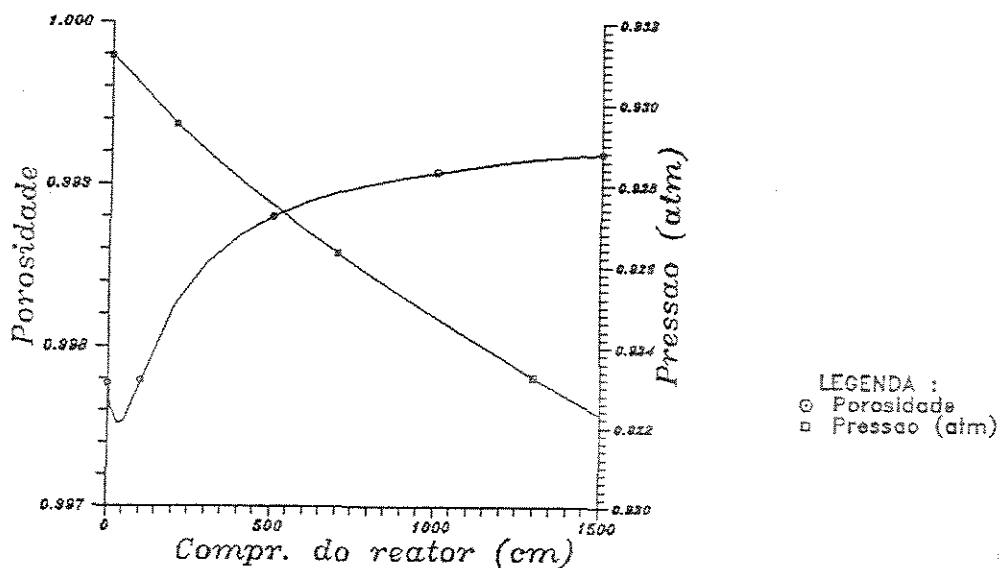
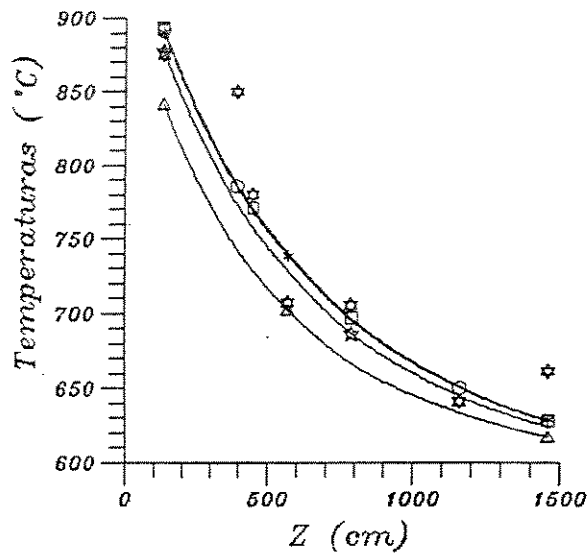
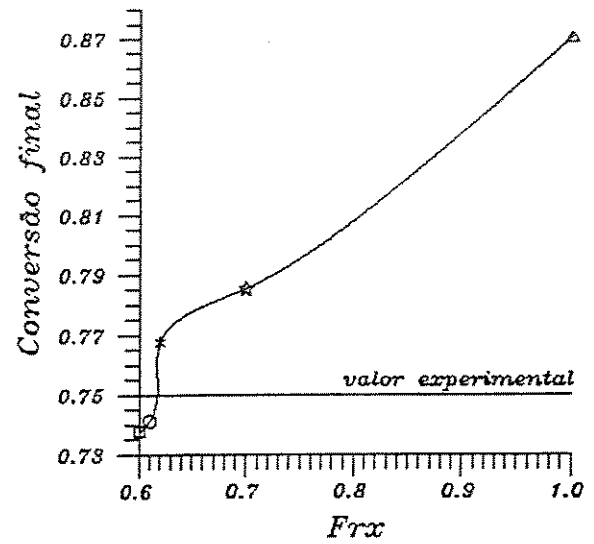


Figura 5.9: Resultados numéricos para a porosidade e pressão — TESTE 03

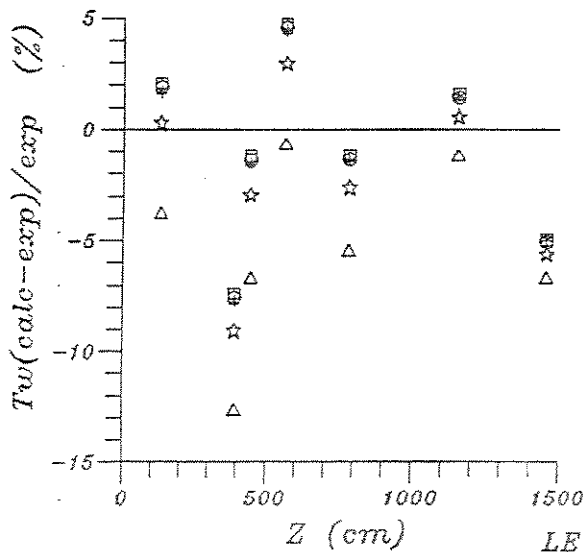
lhor, porque neste caso a conversão final e o perfil da temperatura de parede do reator simulados mais se aproximam dos dados experimentais para este teste. Para comprovação, os dados dos testes 02 e 03 também foram usados, e com $F_{RX} = 0.61$ obteve-se uma resposta muito próxima da condição verificada experimentalmente, como se



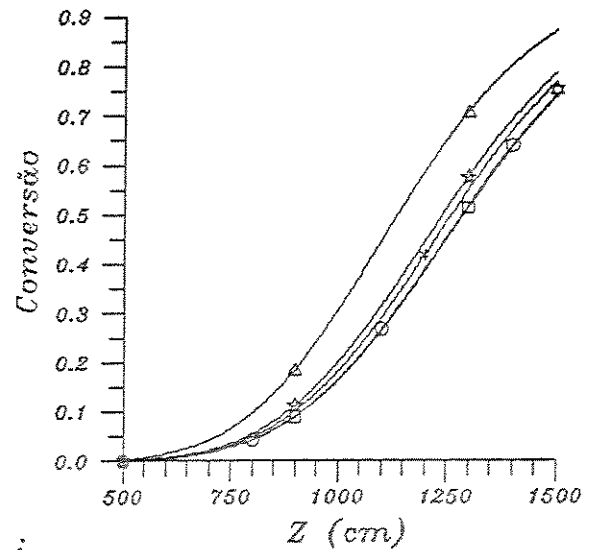
(a)



(b)



(c)



(d)

LEGENDA :

- $Fr_x=0.61$
- $Fr_x=0.6$
- * $Fr_x=0.62$
- ☆ $Fr_x=0.7$
- △ $Fr_x=1.0$

* Experimental

FRX

Figura 5.10: Comparação dos resultados numéricos com os dados experimentais, variando o fator de forma, para (a) T_w , (b) conversão final (c) ΔT_w , (d) conversão

observa nas tabelas 5.9.a e 5.9.b; e nos gráficos 5.1, 5.4 e 5.7.

Tabela 5.9: Comparativo dos resultados de T_w , e da conversão com dados experimentais para vários fatores de forma diferentes

a) Valores obtidos para T_w , e para a conversão (X_f)						
Z(cm)	Experim.	$F_{RX}=0.61$	$F_{RX}=0.60$	$F_{RX}=0.62$	$F_{RX}=0.70$	$F_{RX}=1.00$
129.00	875.000	891.469	893.162	889.955	877.524	842.131
392.00	850.000	785.680	787.271	784.550	773.027	742.626
448.00	780.000	769.248	770.790	768.230	757.080	728.160
567.00	707.000	739.207	740.634	738.436	728.158	702.486
787.00	705.000	695.512	696.712	695.194	686.606	666.816
1160.00	641.000	650.282	651.123	650.637	644.700	633.464
1460.00	661.000	627.583	628.187	628.361	624.010	617.166
X_f (%)	75.0	74.11	73.774	76.7536	78.54	87.0
Erro $\frac{(calc-exp)}{exp}$	–	-1.18%	-1.635%	+2.338%	+4.72%	+16.00%

b) Variação percentual de T_w , em relação ao resultado experimental					
Z(cm)	$F_{RX}=0.61$	$F_{RX}=0.60$	$F_{RX}=0.62$	$F_{RX}=0.70$	$F_{RX}=1.00$
129.00	1.8821714	2.0756571	1.7091429	.2884000	-3.7564571
392.00	-7.5670588	-7.3798824	-7.7000000	-9.0556471	-12.6322353
448.00	-1.3784615	-1.1807692	-1.5089744	-2.9384615	-6.6461538
567.00	4.5554455	4.7572843	4.4463932	2.9926450	-.6384724
787.00	-1.3458156	-1.1756028	-1.3909220	-2.6090780	-5.4161702
1160.00	1.4480499	1.5792512	1.5034321	.5772231	-1.1756630
1460.00	-5.0555219	-4.9641452	-4.9378215	-5.5960666	-6.6314675

5.3 Análise da Convergência do Método Numérico.

Com o objetivo de avaliar a influência dos parâmetros usados no método numérico para resolver o problema, procura-se variar o número e o tamanho dos elementos considerados em cada passo. Como auxílio nas análises, utiliza-se dois tipos de tabelas. Em uma delas, verifica-se a diferença dos vários resultados com aquele do caso base (tabelas 5.16.a, 5.16.b, 5.19.a, 5.19.b, 5.20.a e 5.20.b), na outra avalia-se as diferenças entre as derivadas primeira nas interfaces dos conjuntos sucessivos de elementos (tabelas 5.11, 5.12, 5.13, 5.14, 5.15, 5.17, 5.18, 5.21, 5.22, 5.23).

Na tabela 5.10 estão relacionados todos os casos estudados para avaliar a convergência do método numérico aplicado. Em primeiro lugar, varia-se o tamanho dos elementos numa região escolhida do reator ($Z=900$ cm a $Z=1500$ cm), onde a reação ocorre com maior intensidade. Os elementos são iguais entre si no mesmo passo e os seus tamanhos variam em função do tamanho do passo. Os valores utilizados, nos

Tabela 5.10: Configurações utilizadas para os parâmetros do método numérico — análise da convergência

Nome da configuração	Intervalo		NEL	Tamanho do passo	Tamanho de cada elemento				
	de	até			1	2	3	4	5
NEL5B	900	1500	5	100	20	20	20	20	20
PS200	900	1500	5	200	40	40	40	40	40
PS50	900	1500	5	50	10	10	10	10	10
PS10	900	1500	5	10	2	2	2	2	2
PS2	900	1500	5	2	0.4	0.4	0.4	0.4	0.4
NEL10	900	1500	10	100	10	10	10	10	10
NEL1	900	1500	1	100	100	100	100	100	100
CBASES	0.	12.	5	2.	0.4	0.4	0.4	0.4	0.4
	12.	18.	1	1.	1.0	—	—	—	—
	18.	24.	5	2.	0.4	0.4	0.4	0.4	0.4
	24.	28.	1	1.	1.0	—	—	—	—
	28.	40.	5	2.	0.4	0.4	0.4	0.4	0.4
	40.	90.	5	5.	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
	90.	200.	5	10.	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0
	200.	400.	5	20.	4.0	4.0	4.0	4.0	4.0
	400.	700.	5	50.	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
CBASE1	700.	1500.	5	100.	20.0	20.0	20.0	20.0	20.0
	0.	120.	5	5.	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
	120.	400.	5	10.	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0
	400.	700.	5	50.	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
CBASE2	700.	1500.	5	200.	40.0	40.0	40.0	40.0	40.0
	0.	120.	1	5.	5.0	—	—	—	—
	120.	400.	1	10.	10.0	—	—	—	—
	400.	700.	1	50.	50.0	—	—	—	—
CBASE2	700.	1500.	1	200.	200.0	—	—	—	—

diversos casos analisados, para o tamanho do elemento foram 0.4 cm, 2.0 cm, 10.0 cm, 20.0 cm e 40.0 cm; e o número de elementos por passo (NEL) foi igual a cinco em todos eles. Desta forma os tamanhos dos passos são respectivamente 2 cm, 10 cm, 50 cm, 100 cm e 200 cm. Apesar da grande diferença no tempo de execução para cada caso, os resultados não diferem entre si significativamente (tabelas 5.16.a e 5.16.b).

Tabela 5.11: Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo — diferenças entre os valores da esquerda e da direita — NEL5B

var	Maior diferença			Diferença média	
	Z	Valor	%	Valor	%
1	2.0	.4300000D-09	-.0021887	.7366232D-10	-.0003749
2	600.0	.1994800D-02	.4746777	.6608986D-04	.0157266
3	600.0	.1453400D-02	.4800994	.4242594D-04	.0140145
4	600.0	.2659000D-03	.0603596	.7169565D-05	.0016275
5	600.0	.2634200D-02	.8796400	.1274568D-03	.0425617
6	600.0	-.1268000D-08	.0221160	.1108261D-09	-.0019330
7	600.0	-.2264400D-02	.6460231	.7428116D-04	-.0211921
8	1000.0	-.7900000D-07	-.0089296	.8808108D-08	.0009956
9	600.0	-.2715000D-07	.0312672	.2083696D-06	-.2399681
10	600.0	.2010000D-07	.0250256	.2086261D-06	.2597506

Observa-se o efeito nas derivadas primeira (tabelas 5.11, 5.12, 5.13, 5.14, 5.15), e conclui-se que ao diminuir o passo (consequentemente o tamanho dos elemen-

tos) as diferenças nas derivadas tornam-se cada vez menores, o que já era esperado. Portanto, ao diminuir o tamanho dos elementos o resultado melhora, porém mais em relação à continuidade das variáveis do que no aspecto da convergência; pois de uma resposta para outra os valores das variáveis são praticamente iguais.

Tabela 5.12: Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo – diferenças entre os valores da esquerda e da direita – PS200

var	Maior diferença			Diferença média	
	Z	Valor	%	Valor	%
1	1100.0	-.5260000D-10	-.0197309	.3220000D-10	.0120786
2	1300.0	.4390000D-04	.0238933	.2725000D-04	.0148313
3	1300.0	.2180000D-04	.0216494	.2060000D-04	.0204577
4	1100.0	-.4170000D-04	-.0172440	.2860000D-04	.0118268
5	1100.0	.7370000D-04	.0502755	.6955000D-04	.0474445
6	1100.0	.1550000D-09	-.0031205	.1095000D-09	-.0022045
7	1100.0	-.7410000D-04	.0379518	.6215000D-04	-.0318314
8	1300.0	.5340000D-06	.0419138	.3300000D-06	.0259018
9	1100.0	-.6840000D-08	.0115498	.3755000D-08	-.0063406
10	1300.0	-.4874000D-07	.0598853	.3364000D-07	-.0413324

Tabela 5.13: Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo – diferenças entre os valores da esquerda e da direita – PS50

var	Maior diferença			Diferença média	
	Z	Valor	%	Valor	%
1	950.0	.8900000D-11	.0026822	.2154545D-11	.0006493
2	950.0	.2700000D-04	.0119839	.1432727D-04	.0063591
3	950.0	.1950000D-04	.0124764	.1050364D-04	.0067204
4	1300.0	-.5000000D-05	-.0023358	.2954545D-05	.0013803
5	1100.0	.2640000D-04	.0180096	.1666545D-04	.0113689
6	1050.0	-.1750000D-09	.0034996	.1123636D-09	-.0022470
7	950.0	-.2860000D-04	.0123701	.1823636D-04	-.0078876
8	1350.0	.1200000D-07	.0009861	.7709091D-08	.0006335
9	1100.0	-.3100000D-09	.0005235	.1527273D-09	-.0002579
10	1000.0	.1180000D-08	-.0110179	.7698182D-09	-.0071880

Constata-se que variar o número de elementos por passo, sem modificar o tamanho de cada um (mesmos pontos de colocação) não causa diferenças sensíveis nos resultados (tabelas 5.19.a e 5.19.b). É possível, no entanto, perceber que, as variações são maiores entre NEL=1 e NEL=5 do que entre NEL=5 e NEL=10.

Tabela 5.14: Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo – diferenças entre os valores da esquerda e da direita – PS10

var	Maior diferença			Diferença média	
	Z	Valor	%	Valor	%
1	950.0	.9700000D-11	.0029233	.1557627D-11	.0004694
2	1110.0	.1390000D-04	.0072260	.5971186D-05	.0031042
3	1110.0	.9900000D-05	.0081588	.4248305D-05	.0035011
4	1410.0	.5300000D-05	.0027236	.2383051D-05	.0012246
5	930.0	.1270000D-04	.0069207	.4449831D-05	.0024249
6	1110.0	-.1780000D-09	.0035876	.8847458D-10	-.0017832
7	920.0	-.6400000D-05	.0026754	.3783051D-05	-.0015814
8	1420.0	.3000000D-08	.0002747	.7305085D-09	.0000669
9	1440.0	.1700000D-09	-.0007074	.7067797D-10	-.0002941
10	1420.0	-.3400000D-09	.0004507	.8995085D-10	-.0001192

Tabela 5.15: Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo – diferenças entre os valores da esquerda e da direita – PS2

var	Maior diferença			Diferença média	
	Z	Valor	%	Valor	%
1	962.0	-.9600000D-11	-.0029530	.1500669D-11	.0004616
2	1252.0	.1320000D-04	.0071151	.5596321D-05	.0030165
3	1252.0	.9400000D-05	.0089815	.3962241D-05	.0037858
4	1252.0	-.6000000D-05	-.0027158	.2431104D-05	.0011004
5	962.0	.1020000D-04	.0057894	.3727492D-05	.0021157
6	964.0	-.1770000D-09	.0034895	.8949164D-10	-.0017643
7	968.0	-.1500000D-05	.0006622	.7612040D-06	-.0003360
8	1372.0	.3000000D-08	.0002537	.7819398D-09	.0000661
9	1418.0	.1700000D-09	-.0006603	.7692308D-10	-.0002988
10	1472.0	-.3800000D-09	.0005521	.9706589D-10	-.0001410

Pela análise das tabelas 5.11, 5.17 e 5.18, que mostram as diferenças das derivadas primeira nas interfaces, vê-se que somente as maiores diferenças absolutas das derivadas sofrem reduções ao aumentar-se o número de elementos; mas estas diferenças podem ser consideradas irrelevantes para os resultados finais das simulações.

A tabela 5.10 mostra as configurações utilizadas nos testes relativos a este aspecto do problema.

Tabela 5.16: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) –

Variável analisada : Tamanho do passo

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_z	T_z	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	$T_{w,r}$	$T_{w,l}$
Zmaior	1060.0	940.0	940.0	1020.0	940.0	1500.0	940.0	1020.0	1140.0	1140.0	1100.0	1100.0
N5 ps20	.99905	1046.80	488.44	830.29	405.80	.92224	768.89	.18311	.01839	.04513	656.04	68.10
Relação	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Diferem	-.1D-6	.64D-3	.47D-3	.39D-3	.66D-3	-.1D-6	-.71D-3	.10D-5	-.1D-6	-.2D-6	-.83D-3	-.11D-3
Zmaior	1060.0	500.0	1500.0	1240.0	1240.0	1500.0	1500.0	1360.0	1360.0	1360.0	1300.0	1000.0
N5 ps50	.99905	1152.25	551.21	882.66	540.39	.92224	671.63	.59176	.00915	.02862	638.59	69.23
Relação	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Diferem	-.2D-6	.32D-2	.21D-2	-.98D-3	-.15D-2	-.3D-6	-.41D-3	-.66D-5	.2D-6	.6D-6	-.59D-3	.58D-4
Zmaior	1040.0	500.0	1500.0	1280.0	1240.0	1080.0	1500.0	1360.0	1140.0	1360.0	1300.0	1000.0
N5 ps10	.99905	1152.25	551.21	891.45	540.39	.92429	671.63	.59176	.01839	.02862	638.59	69.23
Relação	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Diferem	-.2D-6	.27D-2	.19D-2	-.12D-2	-.17D-2	.2D-6	-.45D-3	-.92D-5	-.3D-6	.5D-6	-.49D-3	.10D-3
Zmaior	1440.0	1280.0	1280.0	1260.0	1280.0	1180.0	1120.0	1220.0	1320.0	1120.0	1100.0	1100.0
N5 ps2	.99914	1113.90	530.79	887.08	544.85	.92379	730.80	.41401	.01045	.04622	656.05	68.10
Relação	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Diferem	.7D-6	.40D-2	-.28D-2	.16D-2	.18D-2	-.4D-6	.25D-3	-.25D-5	.4D-6	-.3D-6	.13D-2	.13D-3

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :				
Variável	N5 ps2	0 N5 ps5	N5 ps1	N5 ps2
ϵ	5.556D-09	1.444D-07	1.467D-07	2.517D-07
v_g	3.609D-04	1.148D-03	1.032D-03	1.339D-03
T_g	2.469D-04	7.975D-04	7.454D-04	9.497D-04
v_z	1.977D-04	4.780D-04	5.862D-04	6.050D-04
T_z	2.115D-04	7.732D-04	9.322D-04	8.160D-04
Pressão	5.556D-09	1.083D-07	9.333D-08	1.283D-07
T_C	2.233D-04	1.980D-04	2.156D-04	1.100D-04
Conversão	4.833D-07	3.600D-06	4.990D-06	5.317D-07
Querogenio	2.222D-08	6.111D-08	1.417D-07	1.417D-07
Betume	9.444D-08	2.639D-07	2.500D-07	9.833D-08
$T_{w,r}$	6.198D-04	4.243D-04	3.393D-04	3.810D-04
$T_{w,l}$	8.713D-05	1.747D-05	4.448D-05	7.845D-05
FDIF (%) :	.000769	.002705	.603352	.002572

Tabela 5.17: Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo – diferenças entre os valores da esquerda e da direita – NEL10

var	Maior diferença			Diferença média	
	Z	Valor	%	Valor	%
1	1100.0	-.1140000D-10	-.0042762	.7950000D-11	.0029821
2	1100.0	.3500000D-04	.0180994	.3330000D-04	.0172203
3	1100.0	.3200000D-04	.0260280	.2615000D-04	.0212698
4	1300.0	.8600000D-05	.0040177	.7550000D-05	.0035272
5	1100.0	.7770000D-04	.0530039	.6825000D-04	.0465575
6	1300.0	.8700000D-10	-.0017880	.7500000D-10	-.0015414
7	1100.0	-.7490000D-04	.0383614	.6285000D-04	-.0321897
8	1300.0	.1370000D-06	.0107531	.8050000D-07	.0063185
9	1100.0	-.1710000D-08	.0028875	.9450000D-09	-.0015957
10	1300.0	-.1245000D-07	.0152969	.8185000D-08	-.0100566

Tabela 5.18: Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo
– diferenças entre os valores da esquerda e da direita – NEL1

var	Maior diferença			Diferença média	
	Z	Valor	%	Valor	%
1	8.0	.4300000D-09	-.0020317	.4462008D-10	-.0002108
2	630.0	.1638800D-02	.4112363	.1534508D-04	.0038507
3	630.0	.1194000D-02	.4162718	.9710606D-05	.0033855
4	630.0	.3650000D-04	.0086693	.1211970D-05	.0002879
5	630.0	.2812800D-02	.9856750	.3933761D-04	.0137849
6	630.0	-.7380000D-09	.0130595	.7543182D-10	-.0013348
7	630.0	-.2245200D-02	.6642197	.2113750D-04	-.0062533
8	1360.0	.1800000D-07	.0014977	.1940946D-08	.0001615
9	630.0	-.4260000D-08	.0047868	.5435587D-07	-.0610782
10	630.0	.3110000D-08	.0038780	.5447370D-07	.0679250

Tabela 5.19: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Variável analisada : Número de elementos

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Z maior	1060.0	300.0	1300.0	1000.0	1260.0	1080.0	920.0	1500.0	1140.0	1420.0	904.227	904.227
N10 p20	.99905	1117.59	532.82	825.11	542.67	.92429	773.62	.74114	.01839	.02392	678.67	70.46
Relação	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Diferem	-.10D-6	.36D-3	.26D-3	.17D-3	-.29D-3	.10D-6	-.26D-3	-.10D-5	-.10D-6	-.10D-6	.20D-1	.31D-2
Z maior	760.0	400.0	1360.0	1360.0	1100.0	1480.0	1500.0	1320.0	1020.0	1340.0	402.113	704.227
N1 ps20	.99894	1135.61	538.74	908.35	522.00	.92234	671.64	.54275	.02578	.03022	782.60	73.46
Relação	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0001	1.0000	1.0000	1.0003	.9998	.9995	1.0000	1.0000
Diferem	.50D-6	.31D-1	.21D-1	.36D-1	.26D-1	.21D-5	.61D-2	.19D-3	-.49D-5	-.14D-4	-.22D-1	-.34D-2

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :		
Variável	N10 p2	o N1 ps2
ϵ	3.030D-09	2.044D-07
v_g	1.914D-04	8.243D-03
T_g	1.348D-04	6.771D-03
v_x	6.519D-05	7.564D-03
T_x	1.440D-04	8.781D-03
Pressão	6.061D-09	8.744D-07
T_C	9.826D-05	1.047D-03
Conversão	4.333D-07	1.835D-05
Querogênio	2.121D-08	9.022D-07
Betume	3.030D-09	1.471D-06
T_{w_r}	1.417D-03	4.264D-03
T_{w_i}	2.218D-04	3.842D-04
FDIF (%) :	.000979	.163111

Finalmente, avalia-se uma configuração de número e tamanho dos elementos objetivando reduzir o tempo de simulação, sem que isto signifique perda na qualidade dos resultados (tabelas 5.20.a, 5.20.b, 5.21, 5.22 e 5.23).

Tabela 5.20: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) — diversas configurações analisadas

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_z	T_z	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	400.0	980.0	740.0	1020.0	940.0	1380.0	1500.0	980.0	780.0	1020.0	15.211	15.211
CBASE1	.99808	862.17	489.15	664.10	540.51	.92223	687.23	.52157	.02384	.02910	982.92	95.66
Relação	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0001	.9999	.9998	1.0000	1.0000
Diferem	.20D-6	.12D-1	.66D-2	.13D-1	.93D-2	.70D-6	.26D-2	.58D-4	-.12D-5	-.46D-5	.12D-1	.15D-2
Zmaior	400.0	100.0	700.0	1100.0	650.0	1100.0	650.0	1100.0	170.0	170.0	650.0	650.0
CB	.99806	902.84	480.16	692.65	472.64	.92366	854.95	.71858	.08310	.00940	732.11	75.07
Relação	1.0000	.9999	1.0000	1.0000	.9999	1.0000	1.0000	.9996	1.0004	.9969	1.0000	1.0000
Diferem	.20D-6	.49D-1	-.18D-1	-.34D-1	-.25D-1	.60D-6	.27D-1	-.27D-3	.29D-4	-.29D-4	.13D-1	.11D-2

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :		
Variável	CBASE1	CB
ϵ	7.870D-06	6.809D-06
v_g	1.813D-03	5.479D-03
T_g	1.486D-03	4.360D-03
v_z	1.652D-03	4.298D-03
T_z	1.854D-03	4.547D-03
Pressão	1.628D-07	1.660D-07
T_C	1.955D-04	4.210D-03
Conversão	3.377D-06	1.079D-05
Querogenio	1.332D-07	1.029D-05
Betume	2.516D-07	1.071D-05
T_{w_f}	5.906D-04	3.593D-03
T_{w_i}	3.947D-05	3.482D-04
FDIF (%) :	.006407	.617141

Primeiramente, admite-se o xisto seco na entrada do reator e faz-se a simulação com cinco elementos de pequeno tamanho, totalizando trezentos e dez elementos para todo reator (referenciado nas tabelas como CBASES). Uma outra configuração mais simples que a anterior foi usada, com o mesmo número total de elementos – trezentos e dez (referenciada como CBASE1 nas tabelas). A diferença entre as duas está na configuração utilizada para o meio e o início do reator. A primeira (CBASES) concentra maior número de elementos na região de entrada do reator; enquanto que a segunda (CBASE1) refina mais a região intermediária. A escolhida como ideal foi uma terceira (CB), onde o tempo de execução se torna bem menor. Neste caso, adota-se um NEL=1 e o mesmo tamanho dos passos adotados anteriormente, resultando em sessenta e dois elementos totais. Esta última configuração (CB) deverá ser usada futuramente no estudo de sensibilidade paramétrica do modelo.

Para poder ter uma idéia do que acontece com o tempo de execução do programa, quando se altera os parâmetros do método matemático (número de elementos e tamanho do passo), apresenta-se a tabela 5.24, que mostra o tempo médio de cada

Tabela 5.21: Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo – diferenças entre os valores da esquerda e da direita – CBASES

var	Z	Maior diferença		Diferença média	
		Valor	%	Valor	%
1	600.0	.9060000D-09	.0813164	.1358783D-09	.0121955
2	600.0	.1663900D-02	.4921228	.5019462D-04	.0148458
3	600.0	.1615300D-02	.5490201	.4894129D-04	.0166345
4	600.0	.2941000D-03	.0834113	.9227391D-05	.0026170
5	600.0	.2472000D-02	.7983898	.1373670D-03	.0443658
6	600.0	-.1184000D-08	.0189814	.8004348D-10	-.0012832
7	600.0	-.2180800D-02	.6435639	.7184928D-04	-.0212030
8	600.0	.3419000D-06	.0814627	.2578982D-07	.0061448
9	600.0	-.3120000D-07	.0258334	.4318099D-06	-.3575360
10	700.0	.3110000D-07	.1227414	.4324610D-06	1.7067807

interação e uma estimativa do tempo total. Lembra-se que tais dados dependem essencialmente das características do equipamento computacional utilizado. Para coletar estes dados, portanto, tomou-se o cuidado de executar o programa sempre no mesmo microcomputador.

É difícil estabelecer uma configuração ideal para o número de elementos porque dependendo do modelo, e até mesmo da região do reator, uma configuração pode não dar convergência, enquanto que uma outra resolve sem oferecer problemas. Verifica-se que o tamanho do passo, salvo em regiões onde o número de interações por passo é maior, não altera o tempo para resolvê-lo, mas logicamente influi no tempo total.

Da tabela 5.24 conclui-se que diminuindo o número de elementos, o tempo do cálculo do Jacobiano reduz bastante. A influência nos casos onde o Jacobiano não é calculado também é mostrada e nota-se que de dez elementos para cinco elementos o tempo não varia tanto quanto de cinco elementos para um elemento. O tempo total mostrado deve ser avaliado tendo-se em mente que, para não perder a precisão dos resultados, o tamanho individual de cada elemento é sempre igual. Quando, por exemplo, o número de elementos aumenta, diminui o passo total na mesma proporção, requerendo um maior número de passos para resolver o reator todo. Quanto ao número de interações, é possível reduzi-lo modificando a ordem de grandeza do erro admitido na solução do sistema de equações.

Outro dado importante é a redução no tempo total da simulação, conseguida pelo uso de uma configuração mais simples denominada CB. De um tempo total de aproximadamente vinte minutos, usando CBASE1, passou-se a utilizar apenas oito

Tabela 5.22: Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo – diferenças entre os valores da esquerda e da direita – CBASE1

var	Maior diferença			Diferença média	
	Z	Valor	%	Valor	%
1	600.0	.9030000D-09	.0810520	.1015377D-09	.0091139
2	600.0	.1663700D-02	.4920354	.6160213D-04	.0182187
3	600.0	.1615100D-02	.5489264	.5577180D-04	.0189552
4	600.0	.2941000D-03	.0834061	.1487213D-04	.0042177
5	600.0	.2472900D-02	.7986353	.1570551D-03	.0507217
6	600.0	-.1172000D-08	.0187907	.1042295D-09	-.0016711
7	600.0	-.2180800D-02	.6435687	.8169836D-04	-.0241097
8	700.0	-.2007700D-05	-.2291141	.8026225D-07	.0091593
9	700.0	-.4020000D-07	.0377877	.4891731D-06	-.4598187
10	700.0	.2259000D-06	.8919254	.4943495D-06	1.9518499

Tabela 5.23: Avaliação da continuidade na derivada primeira das variáveis do modelo – diferenças entre os valores da esquerda e da direita – CBASE2

var	Maior diferença			Diferença média	
	Z	Valor	%	Valor	%
1	700.0	-.1713270D-07	-1.8220874	.1622836D-08	.1725911
2	700.0	-.6523900D-02	-2.0216704	.3169877D-03	.0982303
3	5.0	-.2281700D-02	.4014332	.1560841D-03	-.0274608
4	700.0	-.6482600D-02	-1.9140381	.2463162D-03	.0727268
5	5.0	-.1163900D-01	-.5314573	.3568669D-03	.0162952
6	700.0	.1504800D-07	-.2501248	.6532951D-09	-.0108589
7	5.0	.5489400D-02	-.6412817	.1614443D-03	-.0188602
8	700.0	-.5589360D-04	-6.3831566	.1916188D-05	.2188324
9	700.0	-.9936000D-06	.9337898	.3872618D-06	-.3639504
10	700.0	.6163700D-05	24.2586752	.5540641D-06	2.1806482

minutos para simular com a configuração CB.

Tabela 5.24: Tempo de processamento de acordo com o número de elementos

NEL	Passos com o cálculo do Jacobiano		Passos sem o cálculo do Jacobiano		Total (*) de Z=900 cm até 1500 cm
	Tempo necessário	número de iterações	Tempo necessário	número de iterações	
5	1min 35seg	6	37 a 42 seg	8 a mais de 15	3.5 min
10	5min 28seg	9	39 a 45 seg	11 a 13	7 min
1	20seg	6	5 a 10 seg	6 a 10	10 min

(*) – incluído o tempo de acesso aos arquivos

5.4 Análise paramétrica dos dados e correlações

No capítulo 4 descreve-se a metodologia adotada para a análise dos resultados do estudo de sensibilidade paramétrica. Para efetuar esta análise, existe um programa para realizar as seguintes funções: a) lê um arquivo com os dados gerais para a sua execução (nome dos arquivos de dados, número de casos, etc.); b) lê os arquivos de todos os casos; c) efetua os cálculos para encontrar as diferenças máxima e média de cada caso com relação ao caso base; d) coloca em arquivo as tabelas para a análise com os dados básicos das diferenças e em outros arquivos os dados necessários para a construção de gráficos. Desta forma, após executar as simulações para um dado parâmetro, podem-se obter gráficos e tabelas de onde as informações para a análise são retiradas.

As simulações são feitas tomando por base sempre uma configuração de fatores que multiplicam o valor do parâmetro usado no caso base. Os valores mais usados para estes fatores são 0.8, 0.9, 0.95 e 1.05, 1.10 e 1.20, que equivale a dizer que o parâmetro usado variou 20%, 10%, 5% abaixo e 5%, 10% e 20% acima do parâmetro inicial respectivamente. Nas tabela gerada encontra-se, para identificar cada caso, uma abreviatura do nome do parâmetro, seguida do fator utilizado. Assim, por exemplo, CPG08 corresponde à simulação obtida com uma correlação do calor específico do gás de arraste que sempre dá um valor 20% menor que o valor avaliado no caso base.

Para avaliar as simulações, os dados de entrada e as correlações foram divididos em dois grupos distintos. O primeiro grupo é formado pelos parâmetros que podem ser mudados apenas pelos arquivos de dados. O que se faz é construir os arquivos com os dados modificados e fazer com que o programa leia o arquivo correspondente. Os parâmetros deste grupo, que foram analisados, são mostrados na tabela 5.28. O outro grupo é constituído pelos outros parâmetros, que para serem alterados exigem a inclusão na programação de um fator de multiplicação (K). Este é o caso das correlações, onde para avaliar o resultado com diversos fatores, modifica-se o programa, simplesmente incluindo o fator K que multiplica o resultado da correlação. Assim, para executar casos diferentes é só ler o K desejado via teclado. Fazem parte deste grupo os parâmetros listados na tabela 5.29. A simbologia adotada encontra-se na tabela 5.25

Tabela 5.25: Nomenclatura utilizada nas análises deste capítulo

Abreviatura	Parâmetro	Significado
E0	ϵ_0	Porosidade Inicial
TC	T_{C0}	Temperatura inicial dos gases de combustão
MX	\dot{m}_{x0}	Vazão mássica inicial de xisto
MG	\dot{m}_{g0}	Vazão de gás de arraste na entrada do reator
DR	$D_1 - D_R$	Diâmetro interno do reator
DR	$D_2 - D_R$	Diâmetro externo do reator
MC	\dot{m}_{comb}	Vazão mássica de gás de aquecimento
P0	p_0	Pressão inicial
EMR	ϵ_{Ri}	Emissividade do reator
VX	v_{x0}	Velocidade inicial das partículas
DP	d_P	Diâmetro médio das partículas
VG	v_{g0}	Velocidade inicial do gás de arraste
ALPR	α_R	Absortividade da parede externa do reator
EPSR	ϵ_R	Emissividade da parede ext. do reator
ARI	α_{Ri}	Absortividade da parede int. do reator
ALPX	α_X	Absortividade do xisto
EPST	ϵ_T	Emissividade do refratário
ALPT	α_T	Absortividade do refratário
UMI	Φ_0	Umidade inicial do xisto
—	D_3	Diâmetro interno do refratário
—	T_∞	Temperatura ambiente
—	ϵ_X	Emissividade do xisto
—	ϵ_{is}	Emissividade do isolamento
—	T_{g0}	Temperatura inicial do gás de arraste
—	T_{x0}	Temperatura do xisto na entrada do reator
—	k_R	Condutividade do reator
—	COR_{amb}	Correção para o h_{AMB}

De posse das tabelas e gráficos, procede-se a análise para cada parâmetro, respeitando-se a divisão já mencionada, e apresentando cada grupo em uma ordem decrescente de importância. Mas com o fim de agrupar os parâmetros, dentro do possível, de acordo com sua origem (propriedades físicas, transmissão de calor,...) podem ocorrer inversões nesta sequência. A ordem foi estipulada através de um fator de diferença que é calculado conforme visto no capítulo 4.

Para facilitar a compreensão das análises, denomina-se como **parâmetro** toda variável do programa que possa ser modificada externamente e que cause modificações no resultado final da simulação. Como **variável** entende-se por aquelas que constituem as incógnitas dos sistemas de equações estipulados no capítulo 3.

Tabela 5.26: cont. da tabela 5.25

Abreviatura	Parâmetro	Significado
E2	E_2	Energia de ativação da reação 2
ROX	ρ_x	Densidade do xisto
E1	E_1	Energia de ativação da reação 1
CPX	C_{px}	Calor específico do xisto
ALPC	α_C	Absortividade do gás de aquecimento
EPSC	ϵ_C	Emissividade do gás de combustão
CPC	C_{pc}	Calor específico do gás de aquecimento
CPG	C_{pg}	Calor específico do gás de arraste
K2O	A_2	Consante da taxa da reação 2
DH	ΔH_r	Calor de reação
K1O	A_1	Constante da taxa para a reação 1
CD	C_D	Coeficiente de arraste entre xisto e gás
—	k_{is}	Condutividade térmica do isolamento
—	l_{mr}	Comprimento médio para radiação
—	h_{vento}^{∞}	Coeficiente de troca de calor para o ambiente devido ao vento
—	h_{CT}	Coef. da convecção parede do refratário - gás de aquecimento
—	h_{susp}	Coef. da convecção parede do reator - suspensão
—	h_{GX}	Coeficiente de troca de calor entre gás e xisto por convecção
—	D_{EQC}	Diâmetro equivalente do ânulo
—	k_G	Condutividade do gás de arraste
—	μ_C	Viscosidade do gás de aquecimento
—	μ_G	Viscosidade do gás de arraste
—	k_C	Condutividade do gás de aquecimento
—	h_{CR}	Coeficiente de película gás de combustão - reator
—	f_{sf}	Coeficiente de atrito xisto-reator
—	f_{gf}	Coeficiente de atrito gás-parede
—	PM_{gas}	Peso molecular do gás de arraste

A seguir apresenta-se a análise para cada parâmetro investigado, pela ordem estipulada anteriormente.

Tabela 5.27: Símbolos utilizados nas tabelas

Símbolo	Significado
ε	porosidade
v_g	velocidade do gás de arraste
T_g	temperatura do gás de arraste
v_x	velocidade das partículas
T_x	temperatura das partículas
p	pressão
T_C	temperatura do gás de combustão
X	conversão em produtos
Q	concentração do querogênio
B	concentração do betume
T_{w_r}	temperatura da parede do reator
T_{w_i}	temperatura de parede do isolamento

5.4.1 Grupo I - Parâmetros introduzidos via arquivos de dados

Dentro deste grupo estão os parâmetros da tabela 5.28 que são distribuídos de acordo com o grau de influência na simulação.

5.4.1.1 Grupo I-A - Parâmetros de influência relevante

Os parâmetros classificados neste grupo são:

Porosidade Inicial (ε_0)

A porosidade inicial juntamente com as estimativas de v_{g0} e v_{x0} são calculadas através de equações empíricas para os dados de propriedades físicas e vazões de gás e xisto. Deseja-se observar o que acontece com os resultados caso haja algum erro na determinação destes valores. A variação isolada dos valores de ε_0 , v_{g0} e v_{x0} permite tirar conclusões a respeito.

Tabela 5.28: Tabela dos valores adotados para os parâmetros em cada um dos casos indicados pelos sufixos - Parâmetros dos arquivos de dados

Parâmetro	sufixos						
	0.8	0.9	0.95	Caso Base	1.05	1.1	1.2
ϵ_0^*	-	0.9876461	0.9966247	0.9976223	0.9986199	-	-
T_{CO}	949.78	1068.5	1127.86	1187.22	1246.58	1250 (*)	1190 (*)
m_{x0}	246.40	277.2	292.6	308.	323.4	338.8	369.6
m_{y0}	49.2	55.35	58.425	61.5	64.575	67.65	73.8
$D_1 - D_R$	-	7.0128	7.4024	7.792	8.1816	8.5712	-
$D_2 - D_R$	-	8.001	8.4455	8.89	9.3345	9.779	-
\dot{m}_{comb}	527.396	659.245	695.869	732.494	769.119	805.743	878.993
p_0	0.74593	0.83805	0.8846	0.93117	0.97726	1.02428	1.11740
ϵ_{Ri}	0.68	0.765	0.808	0.85	0.893	0.935	-
v_{x0}^*	333.0875	347.1122	350.2677	350.61839	350.9690	354.1245	368.1493
d_P	0.017490	0.019676	0.020769	0.0218626	0.022956	0.024049	-
v_{g0}^*	-	396.6953	400.3016	400.70232	401.1030	404.7093	-
α_R	0.706	0.795	0.839	0.883	0.927	0.971	-
ϵ_R	0.664	0.747	0.789	0.83	0.872	0.913	0.996
α_{Ri}	0.624	0.702	0.741	0.78	0.819	0.858	0.936
α_X	0.704	0.792	0.836	0.88	0.924	0.968	-
ϵ_T	0.64	0.72	0.76	0.8	0.84	0.88	0.96
α_T	0.64	0.72	0.76	0.8	0.84	0.88	0.96
Φ_0	-	-	3.0	4.42	6.0	-	-
D_3	13.464	15.147	15.9885	16.83	17.6715	18.513	20.196
T_∞	16	18	10 (*)	20	30(*)	22	24
ϵ_X	0.712	0.801	0.8455	0.89	0.9345	0.979	-
ϵ_{is}	0.72	0.81	0.855	0.9	0.945	0.99	-
T_{g0}	102.224	115.002	121.391	127.78	134.169	140.558	153.336
T_{x0}	61.08	68.715	72.533	76.35	80.168	83.985	91.62
k_R	3.04D-2	3.42D-2	3.61D-2	3.8D-2	3.99D-2	4.18D-2	4.56D-2
$COR_{amb}(\ast)$	-	-	1.0	1.01	1.05	1.1	1.2

Obs: O símbolo (*) indica que a relação do cabeçalho não se aplica.

Tabela 5.29: Tabela dos coeficientes adotados para os parâmetros em cada um dos casos indicados pelos sufixos – K

Parâmetro	$K=0.8$	$K=0.9$	$K=0.95$	$K=1.05$	$K=1.1$	$K=1.2$
E_2	CT	CT	CT	CT	CT	CT
ρ_z	CT	CT	CT	CT	CT	CT
E_1	CT	CT	CT	CT	CT	CT
C_{Fz}	CT	CT	CT	CT	CT	CT
α_C	CT	CT	CT	CT	CT	CT
ϵ_C	CT	CT	CT	CT	CT	CT
C_{pe}	CT	CT	CT	CT	CT	CT
C_{pg}	CT	CT	CT	CT	CT	CT
A_2	CT	CT	CT	CT	CT	CT
ΔH_r	$K=0.001$	$K=0.01$	$K=0.9$	$K=1.1$	$K=10$	$K=1000$
A_1	CT	CT	CT	CT	CT	CT
C_D	CT	CT	CT	CT	CT	CT
k_{is}	NA	CT	CT	CT	CT	CT
l_{mr}	CT	CT	CT	CT	CT	CT
h_{vento}^∞	CT	CT	CT	CT	CT	CT
h_{GT}	CT	CT	CT	CT	CT	CT
h_{exp}	CT	CT	CT	CT	CT	CT
h_{GX}	CT	CT	CT	CT	CT	CT
D_{EQC}	CT	CT	CT	CT	CT	CT
k_G	CT	CT	CT	CT	CT	CT
μ_C	CT	CT	CT	CT	CT	CT
μ_G	CT	CT	CT	CT	CT	CT
k_C	CT	CT	CT	CT	CT	CT
h_{GR}	CT	CT	CT	CT	CT	CT
f_{sf}	CT	CT	CT	CT	CT	CT
f_{GF}	CT	CT	CT	CT	CT	CT
PM_{gas}	NA	CT	CT	CT	CT	NA

Obs: NA – não avaliado ; CT – caso testado

Tabela 5.30: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
 Parâmetro analisado : **Porosidade inicial**

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	100.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	700.0	1500.0	1500.0
E009	.97861	561.42	258.35	361.45	257.37	.88070	656.24	.00001	.08059	.00925	521.05	59.24
Relação	.9818	.5893	.4471	.4830	.4395	.9546	.9204	.0000	36.8295	.1795	.8036	.8971
Zmaior	85.0	300.0	1300.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1300.0	1500.0	1500.0
E0095	.99494	834.74	509.69	624.75	489.43	.91922	693.41	.21698	.04850	.04296	612.94	63.95
Relação	.9983	.8762	.8821	.8349	.8654	.9963	.9726	.3020	1.5292	7.2090	.9454	.9684
Zmaior	75.0	900.0	450.0	900.0	600.0	1300.0	1300.0	900.0	550.0	900.0	1500.0	1500.0
E0105	.99814	965.28	482.74	758.06	559.43	.92577	742.55	.90909	.02732	.00453	694.30	68.92
Relação	1.0016	1.1583	1.2012	1.2250	1.2220	1.0034	1.0415	2.4154	.5544	.1055	1.0708	1.0436

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :			
Variável	E009	E0095	E0105
ϵ	-1.310D-02	-1.027D-03	8.640D-04
v_g	-2.657D+02	-7.670D+01	9.027D+01
T_g	-2.445D+02	-5.632D+01	6.737D+01
v_x	-2.482D+02	-7.462D+01	8.982D+01
T_x	-2.529D+02	-6.101D+01	7.667D+01
Pressão	-2.494D-02	-2.080D-03	1.912D-03
T_C	-2.578D+01	-9.364D+00	1.601D+01
Conversão	-3.470D-01	-2.035D-01	2.055D-01
Querogênio	4.645D-02	8.911D-03	-9.231D-03
Betume	-1.434D-02	9.913D-03	-9.779D-03
T_{w_r}	1.580D+01	6.093D+00	1.234D+01
T_{w_i}	7.311D-01	2.881D-01	5.930D-01
FDIF (%) :	211.688364	82.520530	657.605559
CONV. FINAL	6.290D-05	6.883D-01	9.990D-01
Relação(X_f)	.0	.704	1.023
TRESID	4.960D+00	3.151D+00	2.342D+00
Relação(Tr)	1.821	1.157	.860
TRESID = 2.724D+00 — CBASE			

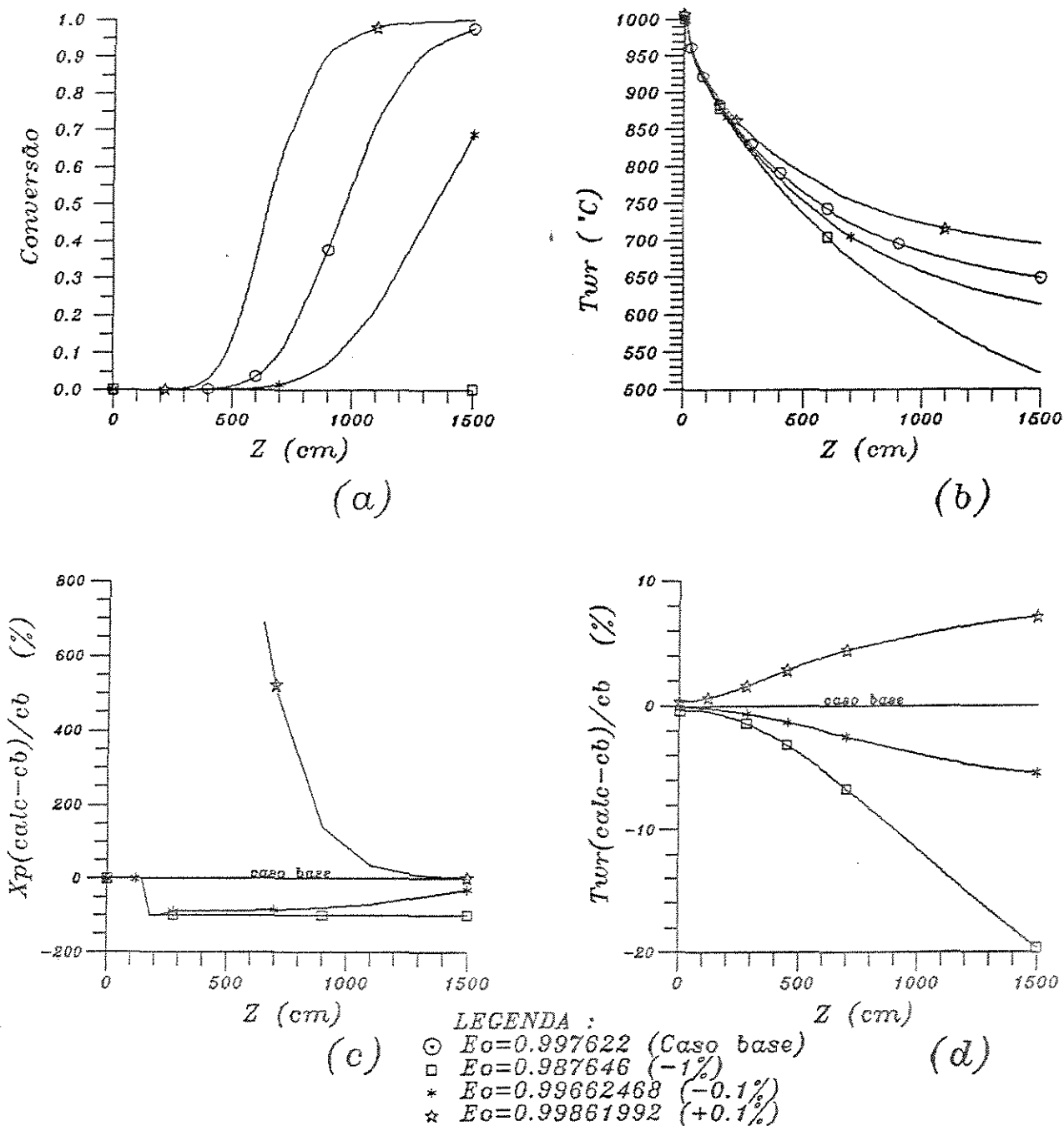


Figura 5.11: Influência da variação da porosidade nos perfis (a) - da conversão; (b) - T_{wr} ; (c) - ΔX e (d) - ΔT_{wr} .

Nota-se, com auxílio das tabelas 5.30.a e 5.30.b e do gráfico 5.11, que pequenas variações em ϵ_0 causam grandes diferenças nos resultados finais. As variações na conversão se explicam pela alteração das velocidades e temperaturas do gás e xisto. Mesmo assim, os resultados obtidos permitem concluir que é importante que os parâmetros ϵ_0 , v_{g0} e v_{x0} tenham uma relação entre si. Portanto, em vista destas grandes alterações que ocorrem, deve-se aprofundar um pouco mais o estudo da condição inicial para estas três variáveis, para assim obter maior confiabilidade nos resultados.

Temperatura inicial dos gases de combustão (T_{C0})

Analisando as figuras 5.12, 5.13 e 5.14 e as tabelas 5.31.a e 5.31.b é possível concluir que o parâmetro T_{C0} influi bastante nos resultados da simulação. As variáveis principais utilizadas na confrontação com os dados experimentais que são a conversão final e o perfil de T_w , mostram-se bastante sensíveis à variação de T_{C0} . Existe, portanto, a necessidade de determinar com maior precisão possível o valor para T_{C0} . Os valores utilizados para este parâmetro nas simulações são estimativas realizadas com base nos cálculos da temperatura de chama e por isto envolvem uma pequena margem de erro. O fato é que este erro causa um desvio em T_w , com a mesma magnitude. Na conversão (X) deve-se observar que existem faixas definidas da curva (X versus Z) onde os desvios não são muito distintos. É o caso onde o reator é longo e a temperatura inicial dos gases de aquecimento suficientemente alta. Simplificaria dizer que este comportamento (sensibilidade menor a T_{C0}) ocorre nos casos onde a conversão é alta, próxima de 95%. No mesmo gráfico, observam-se que existem três zonas distintas da curva. A primeira região é onde a reação não ocorre, ou ocorre em velocidade muito pequena e que vai do início do reator até $Z=600$ cm. Depois vem a faixa onde a maior parte do reagente se transforma, e assim a curva tem uma inclinação ($\frac{dX}{dz}$) elevada. Isto acontece, dependendo de T_{C0} , entre 600 e 1200 cm. É nesta faixa que verificam-se as maiores diferenças absolutas na conversão ao variar T_{C0} . E por fim, existe a faixa acima de 1200 cm, onde há um decréscimo na taxa de reação devido a diminuição da concentração de reagentes. Nesta faixa observa-se que para aumentar a conversão final deve-se aumentar bastante o tamanho do reator, pois a derivada $\frac{dX}{dz}$ nesta região é decrescente e aproxima-se de zero.

Conclusões idênticas podem ser tiradas pela figura 5.13 de X versus T_{C0} , onde as curvas de resposta no final do reator tem um comportamento parecido entre

Tabela 5.31: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : Temperatura inicial do gás de aquecimento

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ε	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_s}
Zmaior	240.0	300.0	1300.0	1300.0	1100.0	1300.0	.0	1300.0	900.0	1300.0	1.057	1.057
TC08	.99712	737.30	447.49	530.52	428.61	.92198	949.78	.11820	.04474	.06278	817.11	82.61
Relação	.9995	.7739	.7745	.7090	.7579	.9993	.8000	.1296	3.0394	10.5366	.8136	.8501
Zmaior	210.0	300.0	1300.0	1300.0	1100.0	1300.0	.0	1100.0	700.0	1300.0	1.057	1.057
TC09	.99724	835.38	509.01	628.90	495.21	.92236	1068.50	.25584	.04657	.03998	911.70	90.00
Relação	.9998	.8769	.8809	.8405	.8757	.9997	.9000	.3560	1.4683	6.7102	.9077	.9261
Zmaior	210.0	100.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	1.057
TC095	.99736	843.15	542.32	633.09	530.36	.92250	1127.86	.47300	.03906	.03906	958.27	93.62
Relação	.9999	.9339	.9386	.9140	.9378	.9999	.9500	.6582	1.2316	1.9403	.9541	.9633
Zmaior	180.0	100.0	1100.0	1100.0	900.0	1300.0	.0	900.0	650.0	900.0	1.057	1.057
TC105	.99742	959.68	587.08	749.92	568.51	.92275	1246.58	.60888	.03028	.02629	1049.94	100.69
Relação	1.0001	1.0630	1.0643	1.0827	1.0671	1.0001	1.0500	1.6178	.8129	.6119	1.0454	1.0361
Zmaior	180.0	100.0	1100.0	1100.0	900.0	1300.0	.0	900.0	650.0	900.0	1.057	1.057
TC110	.99743	962.62	589.12	752.90	570.52	.92276	1250.00	.62211	.02991	.02530	1052.55	100.89
Relação	1.0001	1.0662	1.0680	1.0870	1.0709	1.0001	1.0529	1.6529	.8028	.5888	1.0480	1.0382
Zmaior	160.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	1.057
TC120	.99719	905.63	579.46	695.45	534.42	.92263	1190.00	.72886	.03140	.01932	1006.50	97.35
Relação	1.0000	1.0031	1.0029	1.0040	1.0031	1.0000	1.0023	1.0143	.9899	.9597	1.0021	1.0017

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	TC08	TC09	TC095	TC105	TC110	TC120
ε	-4.277D-04	-2.027D-04	-9.705D-05	8.656D-05	9.135D-05	4.001D-06
v_g	-1.359D+02	-7.352D+01	-3.738D+01	3.689D+01	3.897D+01	1.734D+00
T_g	-1.037D+02	-5.310D+01	-2.690D+01	2.729D+01	2.885D+01	1.264D+00
v_x	-1.303D+02	-7.082D+01	-3.604D+01	3.546D+01	3.745D+01	1.669D+00
T_x	-1.100D+02	-5.623D+01	-2.825D+01	2.832D+01	2.994D+01	1.316D+00
Pressão	-3.533D-04	-1.449D-04	-6.642D-05	5.511D-05	5.801D-05	2.274D-06
T_C	-1.386D+02	-6.708D+01	-3.300D+01	3.190D+01	3.370D+01	1.516D+00
Conversão	-3.091D-01	-1.883D-01	-9.360D-02	7.971D-02	8.378D-02	4.027D-03
Querogênio	1.746D-02	7.823D-03	3.670D-03	-3.207D-03	-3.368D-03	-1.487D-04
Betume	1.114D-02	9.596D-03	4.988D-03	-4.167D-03	-4.381D-03	-2.238D-04
T_{w_r}	1.483D+02	7.245D+01	3.579D+01	3.488D+01	3.686D+01	1.653D+00
T_{w_s}	1.148D+01	5.584D+00	2.752D+00	2.670D+00	2.821D+00	1.268D-01
FDIF (%) :	188.181416	108.413006	60.572732	90.371610	96.109707	2.966088
CONV. FINAL	2.268D-01	7.056D-01	9.002D-01	9.941D-01	9.945D-01	9.785D-01
Relação(X_f)	.232	.722	.921	1.018	1.018	1.002
TRESID	3.568D+00	3.126D+00	2.915D+00	2.559D+00	2.551D+00	2.716D+00
Relação(Tr)	1.310	1.148	1.070	.939	.936	.997

TRESID = 2.724D+00 — CBASE

si e diferente daquele da fase intermediária. Continuando no mesmo gráfico é possível avaliar que existe uma relação entre o comprimento do reator e a quantidade de calor fornecido pelo sistema de aquecimento que oferece uma performance mais adequada sem, contanto, diminuir a conversão final.

Pelas características já discutidas, salienta-se que o controle de T_{C0} deve ser eficiente, pois é possível corrigir o sistema, principalmente para a conversão desejada, atuando sobre T_{C0} com uma resposta bastante rápida. Mas o mais importante é manter T_{C0} suficientemente alta para que no final do reator se alcance a terceira fase

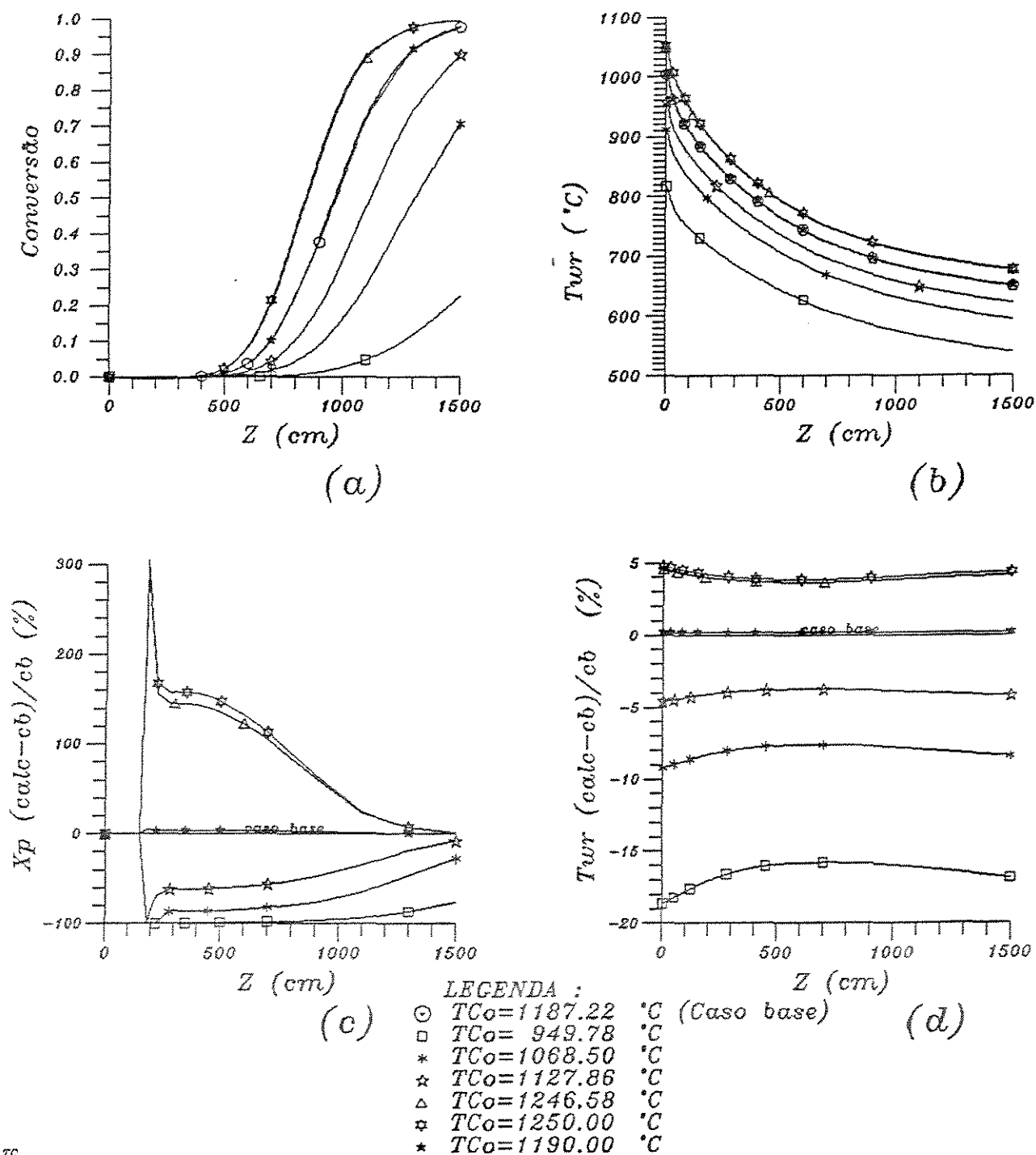


Figura 5.12: Influência da variação da temperatura inicial dos gases da combustão nos perfis (a) - da conversão; (b) - T_{wr} ; (c) - ΔX e (d) - ΔT_{wr} ,

da reação citada acima; caso contrário, a conversão tornar-se-ia insatisfatória.

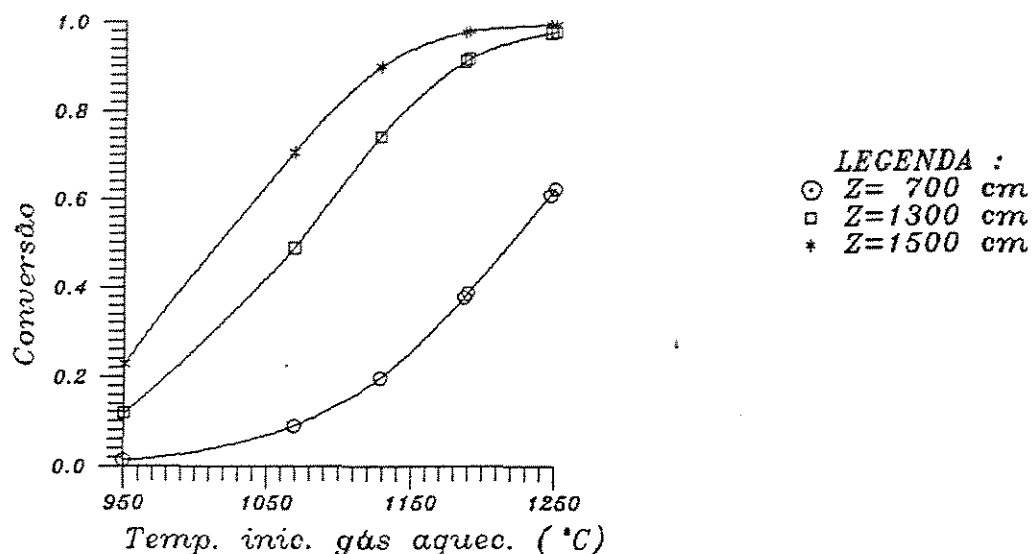


Figura 5.13: Variação da conversão com a temperatura inicial dos gases de aquecimento

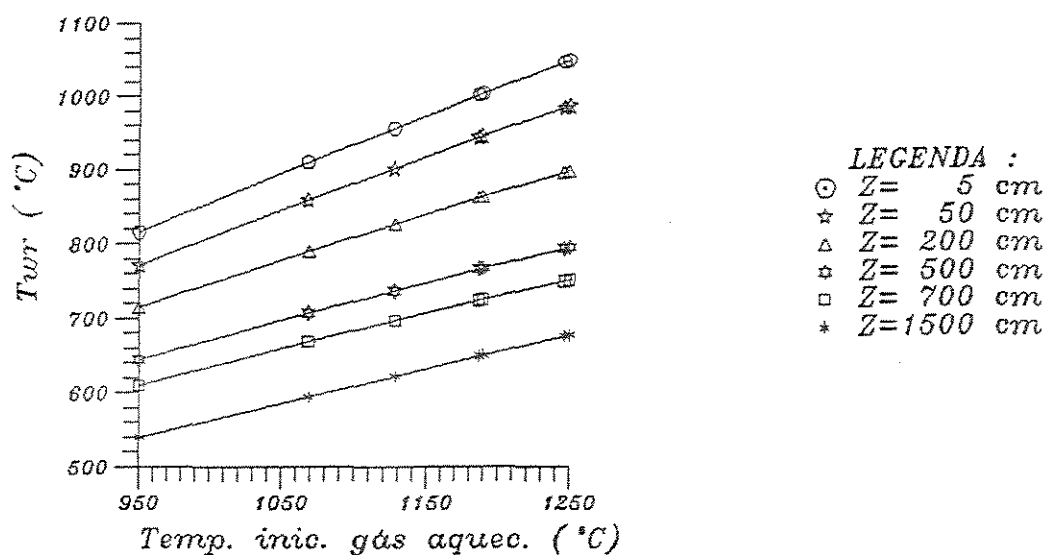


Figura 5.14: Variação da temperatura de parede do reator com a temperatura inicial dos gases de aquecimento

Quanto a T_{wr} , nota-se que a curva de resposta observada na figura 5.14 de T_{wr} versus T_{C0} tem um comportamento linear e os desvios causados em T_{wr} são iguais ou pouco menores que o desvio relativo no parâmetro (T_{C0}).

Vazão mássica inicial de xisto (\dot{m}_{z0})

A vazão inicial de xisto é um dado do programa que tem muita influência nos resultados da simulação. Pelas figuras 5.15, 5.16 e 5.17 e ainda pelas tabelas 5.32.a e 5.32.b, pode-se averiguar a extrema sensibilidade da conversão a \dot{m}_{z0} , principalmente se o reator em questão tiver conversão próxima a 60% (reator de até 7 metros de altura) que é onde as maiores diferenças absolutas na conversão são encontradas.

Tabela 5.32: Tabelas das maiores diferenças absolutas(a) e diferenças médias (b) —

Parâmetro analisado : **Vazão inicial do xisto**

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_z	T_z	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	$T_{w,r}$	$T_{w,i}$
Zmaior	80.00	900.0	1100.0	900.0	900.0	1300.0	1300.0	900.0	650.0	900.0	1500.0	1500.0
MX08	.99735	897.89	600.54	684.50	583.18	.92418	728.45	.70969	.02733	.01879	675.45	67.68
Relacao	1.0008	1.0774	1.0887	1.1062	1.0946	1.0017	1.0217	1.8856	.7336	.4374	1.0418	1.0248
Zmaior	80.00	900.0	1100.0	900.0	900.0	1300.0	1300.0	900.0	650.0	900.0	1500.0	1500.0
MX09	.99697	864.36	575.02	650.11	557.06	.92341	720.11	.53423	.03245	.03185	661.22	66.81
Relação	1.0004	1.0372	1.0424	1.0506	1.0456	1.0009	1.0100	1.4194	.8711	.7414	1.0198	1.0116
Zmaior	85.0	1100.0	1100.0	1100.0	900.0	1300.0	1300.0	900.0	650.0	1100.0	1500.0	1500.0
MX095	.99681	918.01	562.98	708.58	544.60	.92302	716.40	.45125	.03487	.01463	654.62	66.41
Relação	1.0002	1.0168	1.0206	1.0230	1.0222	1.0004	1.0048	1.1989	.9359	.7266	1.0097	1.0056
Zmaior	85.0	1100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
MX105	.99642	887.31	566.77	676.51	521.58	.92223	709.78	.64339	.03397	.02602	642.42	65.69
Relação	.9998	.9828	.9809	.9767	.9790	.9996	.9955	.8954	1.0712	1.2926	.9908	.9947
Zmaior	85.0	1100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
MX110	.99622	871.80	556.14	660.54	511.03	.92183	706.84	.56708	.03622	.03192	636.77	65.36
Relação	.9996	.9656	.9625	.9536	.9592	.9991	.9914	.7892	1.1421	1.5856	.9821	.9897
Zmaior	85.0	1100.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
MX120	.99583	842.34	536.45	630.61	523.85	.92102	701.60	.42574	.04044	.04247	626.33	64.76
Relação	.9992	.9330	.9284	.9104	.9263	.9983	.9841	.5925	1.2751	2.1097	.9660	.9806

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	MX08	MX09	MX095	MX105	MX110	MX120
ϵ	4.204D-04	2.155D-04	1.090D-04	-1.117D-04	-2.263D-04	-4.627D-04
v_g	3.995D+01	1.978D+01	9.847D+00	-9.743D+00	-1.937D+01	-3.803D+01
T_g	3.741D+01	1.787D+01	8.730D+00	-8.345D+00	-1.632D+01	-3.116D+01
v_z	3.924D+01	1.944D+01	9.679D+00	-9.567D+00	-1.901D+01	-3.723D+01
T_z	3.974D+01	1.894D+01	9.248D+00	-8.850D+00	-1.733D+01	-3.321D+01
Pressão	9.387D-04	4.739D-04	2.373D-04	-2.400D-04	-4.824D-04	-9.725D-04
T_C	7.518D+00	3.433D+00	1.643D+00	-1.512D+00	-2.906D+00	-5.376D+00
Conversão	1.105D-01	5.633D-02	2.843D-02	-2.860D-02	-5.728D-02	-1.127D-01
Querogênio	-4.538D-03	-2.257D-03	-1.148D-03	1.095D-03	2.232D-03	4.432D-03
Betume	-5.685D-03	-2.954D-03	-1.481D-03	1.551D-03	3.066D-03	5.989D-03
$T_{w,r}$	5.005D+00	2.266D+00	1.081D+00	9.896D-01	1.898D+00	3.502D+00
$T_{w,i}$	2.401D-01	1.083D-01	5.158D-02	4.708D-02	9.017D-02	1.659D-01
FDIF (%) :	124.279952	46.705556	21.693964	16.081640	29.957898	51.052854
CONV. FINAL	9.967D-01	9.915D-01	9.861D-01	9.624D-01	9.405D-01	8.709D-01
Relação(X_f)	1.020	1.015	1.009	.985	.963	.891
TRESID	2.543D+00	2.631D+00	2.677D+00	2.772D+00	2.822D+00	2.922D+00
Relação(Tr)	.933	.966	.983	1.018	1.036	1.073

TRESID = 2.724D+00 — CBASE

Quanto a influência de \dot{m}_{z0} sobre T_w , pode-se dizer que uma variação de 20% em \dot{m}_{z0} modifica o valor de T_w , no máximo em 5%, no final do reator. O gráfico de

T_{w_r} , versus Z , pelo fato de se ter pouca diferença entre um caso e outro, não apresenta uma resolução aceitável, e exclui-se aqui a sua apresentação. Mesmo assim, de modo geral, aumentando-se a carga de xisto, sem mudar outra variável operacional, tem-se um perfil de T_{w_r} menor. Ao observar o gráfico 5.16 de T_{w_r} x \dot{m}_{x_0} nota-se que isto só acontece na região de saída do reator que é a curva onde se tem a maior inclinação ($\frac{dT_{w_r}}{d\dot{m}_{x_0}}$). Na região de entrada $\frac{dT_{w_r}}{d\dot{m}_{x_0}}$ é próximo de zero.

A influência de \dot{m}_{x_0} sobre a conversão, pode ser explicada porque, por exemplo, ao diminuir o valor de \dot{m}_{x_0} ocorrem mudanças na fluidodinâmica que favorecem o escoamento do gás, ou seja, aumenta v_g . Com isto, v_z também aumenta e por consequência, diminui-se o tempo de residência. Como a conversão final depende do tempo de residência das partículas, seria de se esperar que a conversão baixasse. Mas o que acontece é justamente o contrário, ao diminuir \dot{m}_{x_0} , aumenta a conversão. Isto porque há um outro efeito de importância sobre as temperaturas. Por existir menos xisto na unidade de tempo para retirar energia do sistema, e ainda o favorecimento das condições de troca de calor (coeficiente de película) provocado pelo aumento da velocidade do gás (turbulência) é que a temperatura média do xisto aumenta $39,7^\circ C$ e do gás $37,4^\circ C$ para o caso de $\dot{m}_{x_0} = 0,8 * \dot{m}_{x_0}(\text{casobase})$. Como a taxa de reação sofre influência da temperatura em razão exponencial, a conversão se eleva. Há então uma mútua competitividade entre estes dois efeitos, onde os efeitos de temperatura superam os de velocidade.

Partindo então para o gráfico 5.17 de X versus \dot{m}_{x_0} , nota-se que para $Z = 1500$ cm e \dot{m}_{x_0} entre 240 e 310 kg/h, a inclinação ($\frac{dX_r}{d\dot{m}_{x_0}}$) tende a zero. É fácil perceber que para processar quantidades maiores de xisto, mantendo a mesma conversão, poderia ser usado um reator mais longo. Seria necessário um estudo de otimização para descobrir se a melhor alternativa é aumentar o reator e processar mais xisto, ou, pelo contrário, diminuir o tamanho do reator e \dot{m}_{x_0} . Mas, não se deve esquecer que ao aumentar \dot{m}_{x_0} , pode-se chegar a uma condição tal que o xisto não consiga mais ser arrastado, ocorrendo o entupimento do leito. Por outro lado diminuir \dot{m}_{x_0} pode ser inviável por motivos óbvios. Deste modo, a questão é encontrar uma condição ótima, considerando questões como o investimento necessário para a produção máxima de óleo e gás com um reator o menor possível, funcionando com uma conversão alta. A conversão também terá um ponto ótimo, em função da energia

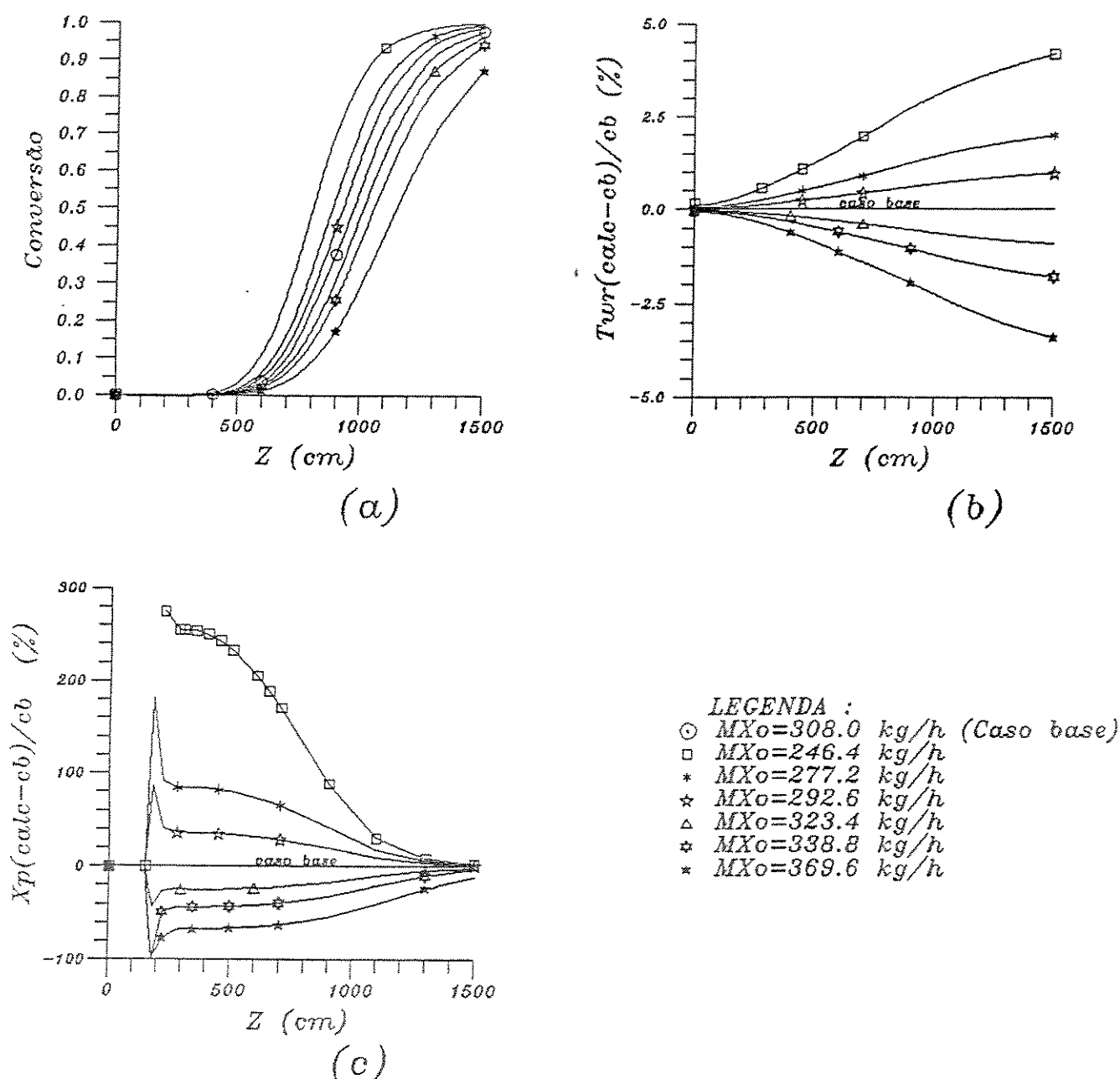


Figura 5.15: Influência da variação da vazão mássica de xisto nos perfis (a) - da conversão; (b) - ΔT_{wr} ; e (c) - ΔX

necessária para obtê-la. Pelas tabelas 5.32.a e 5.32.b, ao diminuir \dot{m}_x , aumenta T_C médio, aumenta também a X . Isto quer dizer que, mesmo retirando uma quantidade menor do calor dos gases de combustão, a conversão aumenta.

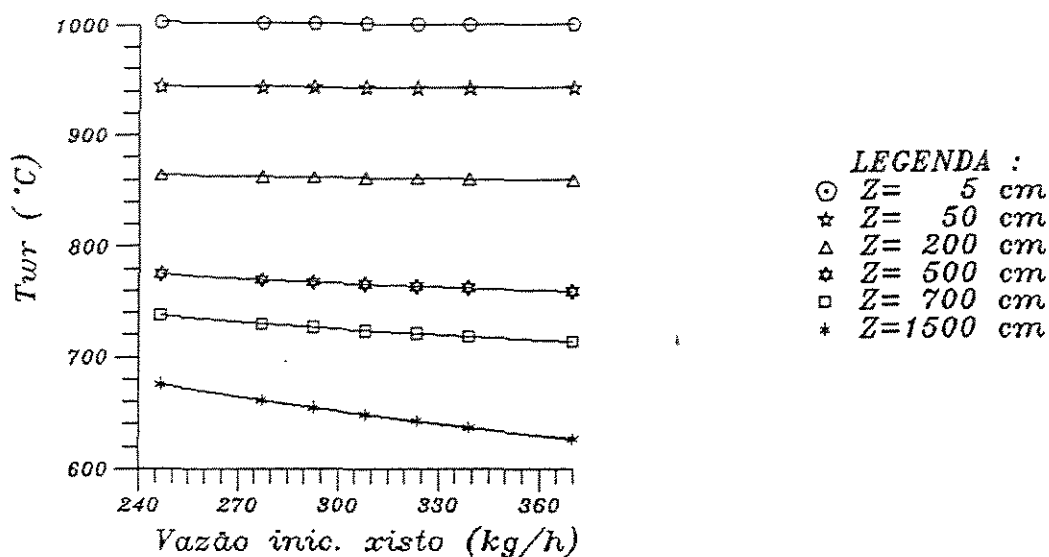


Figura 5.16: Variação da temperatura de parede do reator com a vazão mássica de xisto

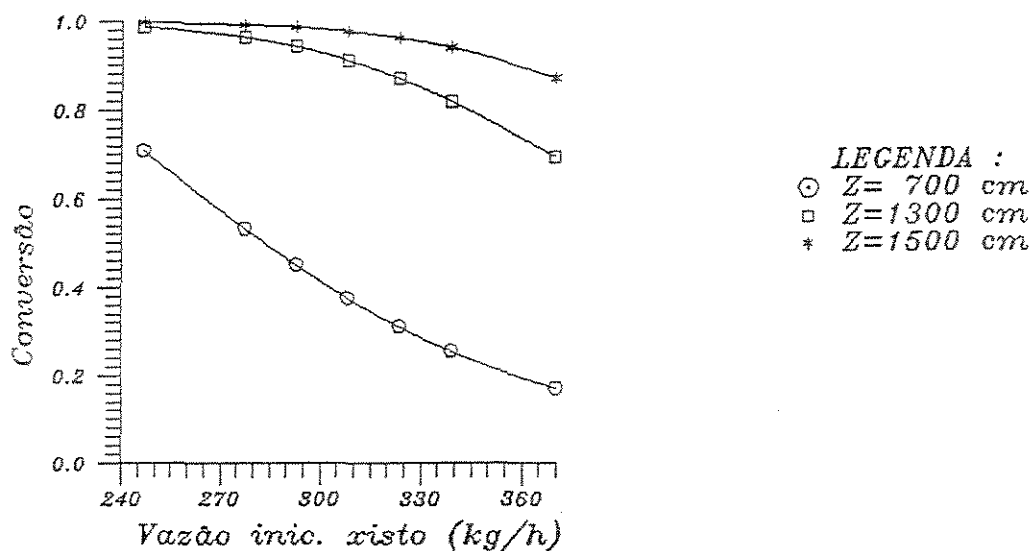


Figura 5.17: Variação da conversão com a vazão mássica de xisto

Assim seriam duas funções objetivas para a otimização: custo total das instalações (investimento fixo) que deve ser minimizado e a quantidade líquida de energia produzida (na forma dos produtos óleo e gás), a ser maximizada. Ou ainda, se poderia minimizar o tempo de retorno do investimento.

O controle da vazão de entrada do xisto pode ser feito pela medição de T_{w_r} , mas deve-se colocar o sensor no final do reator que é onde se tem maior sensibilidade a \dot{m}_{x_0} .

Vazão do gás de arraste na entrada do reator (\dot{m}_{g_0})

A sensibilidade do modelo ao parâmetro \dot{m}_{g_0} pode ser considerada como grande (tabela 5.33). Se fosse comparado apenas o resultado final da conversão e de T_{w_r} , provavelmente este fato não seria notado. Mas é na figura 5.18.a, de X versus Z , que se consegue observar as diferenças entre cada caso. Para reatores de conversão média, em torno de 65%, a diferença entre um caso e outro é máxima. Assim como para outros parâmetros com o mesmo comportamento, há a necessidade de um número maior de dados experimentais com baixa conversão final, para comprovar melhor o modelo.

A conversão varia com a \dot{m}_{g_0} , porque ao aumentar \dot{m}_{g_0} , por exemplo, aumenta a velocidade de escoamento do gás e do xisto, e diminui o tempo de residência que irá fazer com que a conversão final diminua. Também, por causa da maior velocidade, a temperatura do xisto não aumenta na mesma razão que no caso base, e este efeito soma-se ao anterior para reduzir a conversão final. Nota-se que a temperatura do gás de aquecimento é menor, significando que uma quantidade de calor maior é retirada do gás, o que é natural, pois sendo maior a quantidade de gás de arraste, precisa-se mais energia para aquecê-lo.

Na figura 5.19, de X versus \dot{m}_{g_0} , que tem semelhanças com a figura 5.17, de X versus \dot{m}_{x_0} , também é possível notar que deve haver uma relação ótima da vazão de gás em função dos outros parâmetros que proporciona o menor consumo de energia, obedecendo à produção desejada e às altas conversões. Repara-se que para alcançar conversões acima de 95%, o esforço que se faz é cada vez maior; ou aumenta-se o reator ou modifica-se outra variável operacional. Por isto é que mesmo com um reator menor ($Z = 1300$ cm) e uma vazão baixa de gás (49,20 kg/h) pode-se obter uma conversão bem próxima do que em $Z = 1500$ cm. É importante notar também a mudança da curvatura nas curvas ao longo de Z (900 cm, 1300 cm, 1500 cm).

A temperatura de parede do reator não sofre alterações tão evidentes na variação de \dot{m}_{g_0} , não alcançando a 2% no caso de 20% abaixo do valor do caso base para \dot{m}_{g_0} . O gráfico 5.20, de T_{w_r} versus \dot{m}_{g_0} , revela o que acontece em T_{w_r} ao longo do reator variando \dot{m}_{g_0} . Nas regiões iniciais quase não há alteração de T_{w_r} ;

Tabela 5.33: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : Vazão inicial do gás de arraste

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_z	T_z	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_o}
Zmaior	50.0	300.0	1100.0	1300.0	900.0	1300.0	1300.0	900.0	650.0	900.0	1500.0	1500.0
MG08	.99468	810.99	575.20	623.61	553.16	.92151	719.61	.63684	.02472	.02704	660.13	66.74
Relação	.9980	.8513	1.0427	.8334	1.0383	.9988	1.0093	1.6920	.6635	.6292	1.0181	1.0107
Zmaior	55.0	300.0	1100.0	1300.0	900.0	1100.0	1300.0	900.0	650.0	1100.0	1500.0	1500.0
MG09	.99583	883.96	563.01	688.10	542.94	.92321	716.20	.49760	.03132	.01250	654.10	66.38
Relação	.9992	.9278	1.0206	.9196	1.0191	.9995	1.0045	1.3221	.8408	.6210	1.0088	1.0052
Zmaior	55.0	300.0	1300.0	1300.0	900.0	1100.0	1300.0	900.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
MG095	.99624	918.89	583.43	718.75	537.85	.92346	714.57	.43439	.02879	.01618	651.21	66.21
Relação	.9997	.9645	1.0097	.9605	1.0095	.9998	1.0022	1.1541	.9079	.8039	1.0044	1.0026
Zmaior	55.0	300.0	1300.0	1300.0	900.0	1100.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
MG105	.99687	985.50	572.25	776.89	527.78	.92384	711.40	.66036	.03444	.02416	645.60	65.87
Relação	1.0003	1.0344	.9904	1.0382	.9906	1.0002	.9978	.9190	1.0860	1.1999	.9957	.9975
Zmaior	60.0	300.0	1300.0	1300.0	900.0	1100.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
MG110	.99709	1017.41	566.83	804.71	522.94	.92399	709.89	.60152	.03708	.02810	642.91	65.71
Relação	1.0005	1.0679	.9810	1.0754	.9816	1.0004	.9957	.8371	1.1692	1.3959	.9916	.9951
Zmaior	60.0	700.0	1300.0	700.0	900.0	1100.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
MG120	.99747	892.81	556.46	658.79	513.62	.92422	706.96	.48832	.04187	.03529	637.71	65.40
Relação	1.0009	1.1660	.9631	1.2023	.9641	1.0006	.9916	.6796	1.3202	1.7529	.9836	.9904

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	MG08	MG09	MG095	MG105	MG110	MG120
ϵ	-5.003D-04	-2.140D-04	-9.985D-05	8.825D-05	1.669D-04	3.013D-04
v_g	-1.207D+02	-5.976D+01	-2.972D+01	2.950D+01	5.878D+01	1.168D+02
T_g	1.671D+01	8.131D+00	4.023D+00	-3.914D+00	-7.707D+00	-1.498D+01
v_z	-1.056D+02	-5.227D+01	-2.599D+01	2.580D+01	5.142D+01	1.022D+02
T_z	1.532D+01	7.492D+00	3.718D+00	-3.638D+00	-7.189D+00	-1.409D+01
Pressão	-8.742D-04	-3.539D-04	-1.609D-04	1.341D-04	2.462D-04	4.196D-04
T_C	3.513D+00	1.708D+00	8.441D-01	-8.213D-01	-1.619D+00	-3.151D+00
Conversão	9.006D-02	4.512D-02	2.265D-02	-2.244D-02	-4.468D-02	-8.784D-02
Querogênio	-5.467D-03	-2.699D-03	-1.367D-03	1.304D-03	2.638D-03	5.208D-03
Betume	-2.863D-03	-1.474D-03	-7.284D-04	7.715D-04	1.494D-03	2.917D-03
T_{w_r}	2.934D+00	1.415D+00	6.959D-01	6.726D-01	1.323D+00	2.562D+00
T_{w_o}	1.398D-01	6.738D-02	3.311D-02	3.197D-02	6.265D-02	1.216D-01
FDIF (%) :	94.059439	40.779329	20.464987	16.647003	33.833196	62.710784
CONV. FINAL	9.975D-01	9.915D-01	9.856D-01	9.649D-01	9.488D-01	9.034D-01
Relação(X_f)	1.021	1.015	1.009	.988	.971	.925
TRESID	3.370D+00	3.010D+00	2.859D+00	2.602D+00	2.492D+00	2.298D+00
Relação(Tr)	1.237	1.105	1.050	.955	.915	.843

TRESID = 2.724D+00 — CBASE

enquanto que no final do reator já se percebe que a reta que relaciona T_{w_r} com $\dot{m}_{g\ 0}$ tem inclinação negativa, pois o aumento de $\dot{m}_{g\ 0}$ significará a redução de T_{w_r} , mas a medida da temperatura deveria ser feita no final do reator que é o local onde T_{w_r} mais varia ao alterar $\dot{m}_{g\ 0}$.

Diâmetro do reator (D_R)

Deseja-se simular o que aconteceria se, ao invés de usar a atual configuração do reator da planta-piloto, fosse utilizado um tubo reator de diâmetro diferente. Introduz-se, então, no programa outros diâmetros (interno e externo), que obede-

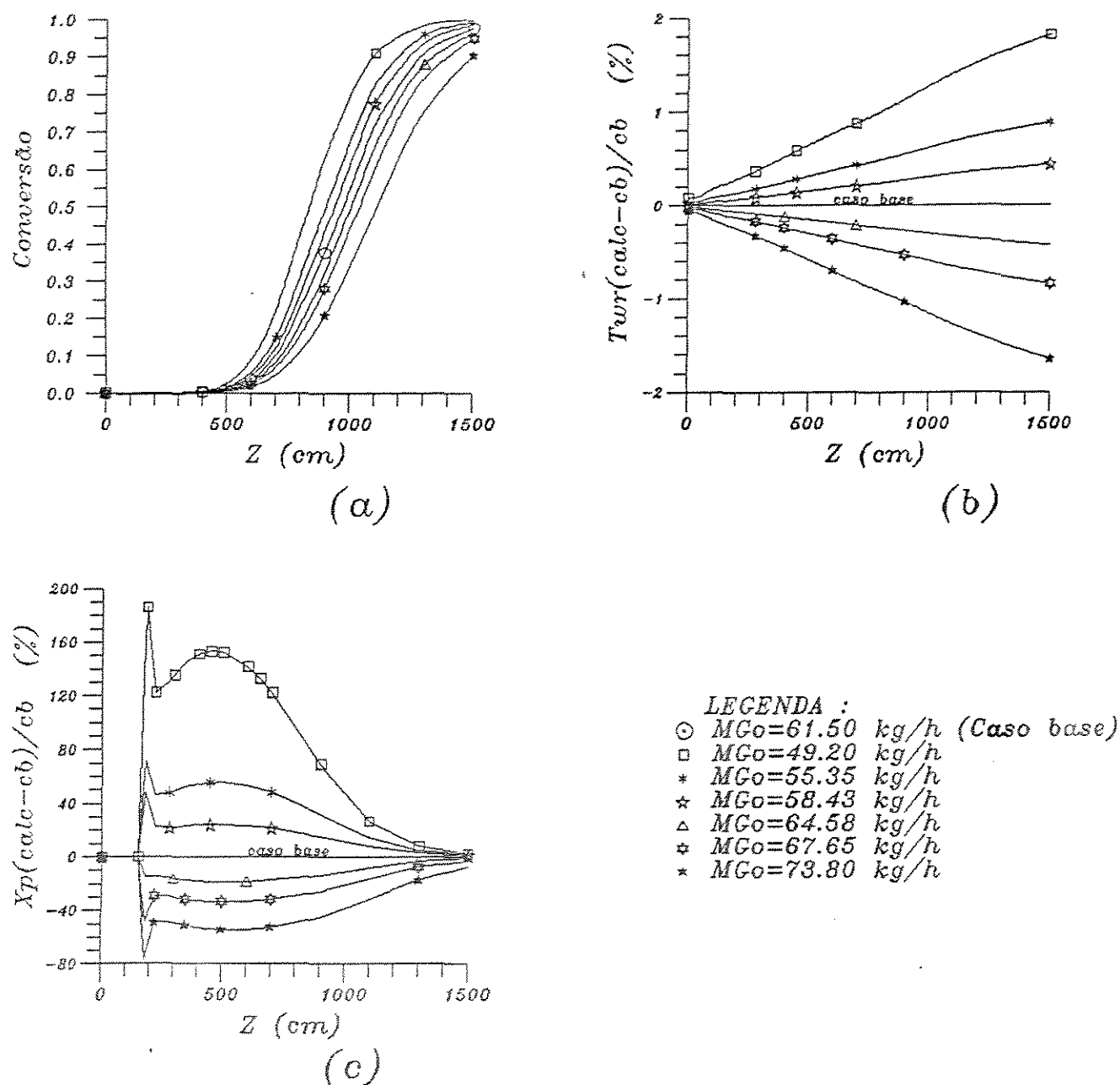


Figura 5.18: Influência da variação da vazão mássica do gás de arraste introduzido nos perfis (a) - da conversão; (b) - ΔT_{wr} ; e (c) - ΔX

cem a variação do diâmetro interno em 5 e 10%, mantendo a espessura da parede do reator constante. Os resultados obtidos são claramente influenciados por esta escolha do diâmetro do reator. A figura 5.21.a de X versus Z mostra que existe diferença visível em cada caso, porém, no final do reator, onde as conversões são próximas a

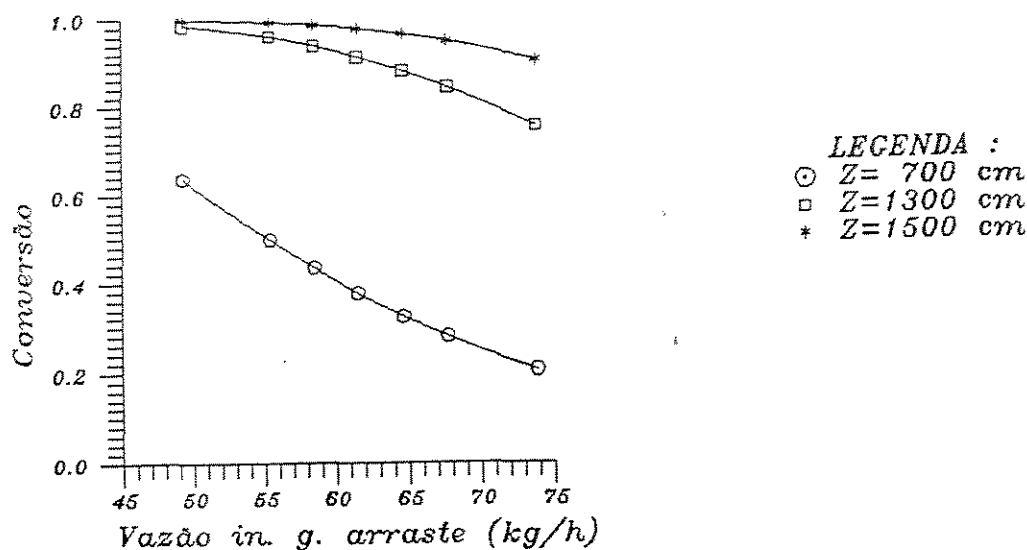


Figura 5.19: Variação da conversão com a vazão mássica do gás de arraste introduzido

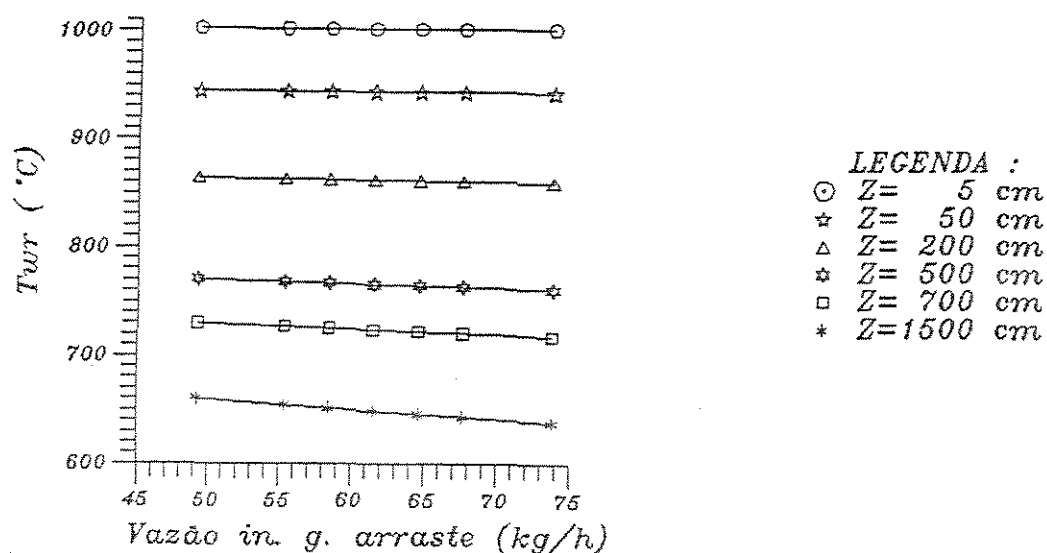


Figura 5.20: Variação da temperatura de parede do reator com a vazão mássica de gás de arraste introduzido

95%, todas as curvas se aproximam. As maiores diferenças finais nesta variável seriam encontradas em reatores menores, com 10 m de comprimento, e de baixa conversão (50% aproximadamente).

Tabela 5.34: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : **Diâmetro do reator**

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	55.0	300.0	1300.0	1300.0	900.0	1300.0	650.0	1100.0	700.0	1100.0	639.434	639.434
DR09	.99703	1137.51	562.76	907.35	516.36	.92150	868.78	.48882	.04328	.03455	740.73	76.17
Relação	1.0004	1.1940	.9740	1.2126	.9692	.9988	1.0162	.6803	1.3647	1.7163	1.0092	1.0122
Zmaior	55.0	300.0	1100.0	1300.0	900.0	1300.0	650.0	1100.0	700.0	1100.0	639.434	639.434
DR095	.99683	1039.83	544.02	823.55	524.70	.92213	861.80	.60774	.03748	.02742	738.40	75.78
Relação	1.0002	1.0915	.9862	1.1006	.9849	.9995	1.0080	.8458	1.1817	1.3622	1.0060	1.0070
Zmaior	50.0	300.0	1100.0	1300.0	700.0	1300.0	700.0	900.0	650.0	1100.0	600.0	600.0
DR105	.99632	874.56	559.38	680.06	494.25	.92300	832.78	.48396	.03151	.01358	739.26	75.62
Relação	.9997	.9180	1.0141	.9088	1.0162	1.0004	.9918	1.2858	.8458	.6746	.9940	.9933
Zmaior	50.0	300.0	1100.0	1300.0	700.0	1300.0	700.0	900.0	650.0	900.0	589.434	589.434
DR110	.99594	804.46	566.98	618.11	502.14	.92327	825.94	.59600	.02595	.03003	739.27	75.49
Relação	.9993	.8444	1.0278	.8260	1.0324	1.0007	.9837	1.5835	.6965	.6990	.9912	.9890

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :				
Variável	DR09	DR095	DR105	DR110
ϵ	3.961D-05	2.193D-05	-2.767D-05	-6.126D-05
v_g	1.520D+02	7.041D+01	-6.131D+01	-1.151D+02
T_g	-1.259D+01	-6.269D+00	6.207D+00	1.236D+01
v_x	1.307D+02	6.065D+01	-5.300D+01	-9.968D+01
T_x	-1.275D+01	-6.230D+00	6.020D+00	1.191D+01
Pressão	-5.608D-04	-2.371D-04	1.657D-04	2.733D-04
T_C	1.132D+01	5.600D+00	-5.553D+00	-1.105D+01
Conversão	-8.773D-02	-4.275D-02	4.018D-02	7.749D-02
Querogênio	5.926D-03	2.821D-03	-2.642D-03	-5.030D-03
Betume	2.189D-03	1.133D-03	-1.075D-03	-2.138D-03
T_{w_r}	2.977D+00	1.465D+00	1.361D+00	2.569D+00
T_{w_i}	5.664D-01	2.738D-01	2.530D-01	4.835D-01
FDIF (%) :	74.503261	37.868187	44.449733	94.879776
CONV. FINAL	9.087D-01	9.520D-01	9.900D-01	9.960D-01
Relação(X_f)	.930	.974	1.013	1.020
TRESID	2.202D+00	2.454D+00	3.014D+00	3.326D+00
Relação(Tr)	.808	.901	1.107	1.221

TRESID = 2.724D+00 — CBASE

O perfil de T_{w_r} não sofre alteração significativa com a mudança nos diâmetros, de acordo com o critério adotado.

A velocidade do xisto é uma variável importante que depende profundamente do parâmetro em questão. Pela figura 5.21.b de v_x versus Z , é possível averiguar este fato. Ao aumentar o diâmetro do reator, v_g diminui, e com isto v_x também fica menor que no caso base. O ponto de mínimo existente para todas as curvas é devido a queda na temperatura do gás de arraste, que ao entrar mais quente que o xisto no reator, perde calor para este até certo ponto, quando o calor que entra no reator passa a ser fornecido pela combustão na região anular e daí as temperaturas aumentam. Na entrada, T_g diminui ao longo do reator e, conseqüentemente, a sua densidade aumenta. Com isto a velocidade de escoamento do gás diminui, o que irá refletir na velocidade do xisto. Quando a temperatura do gás começa a aumentar, acontece o processo inverso.

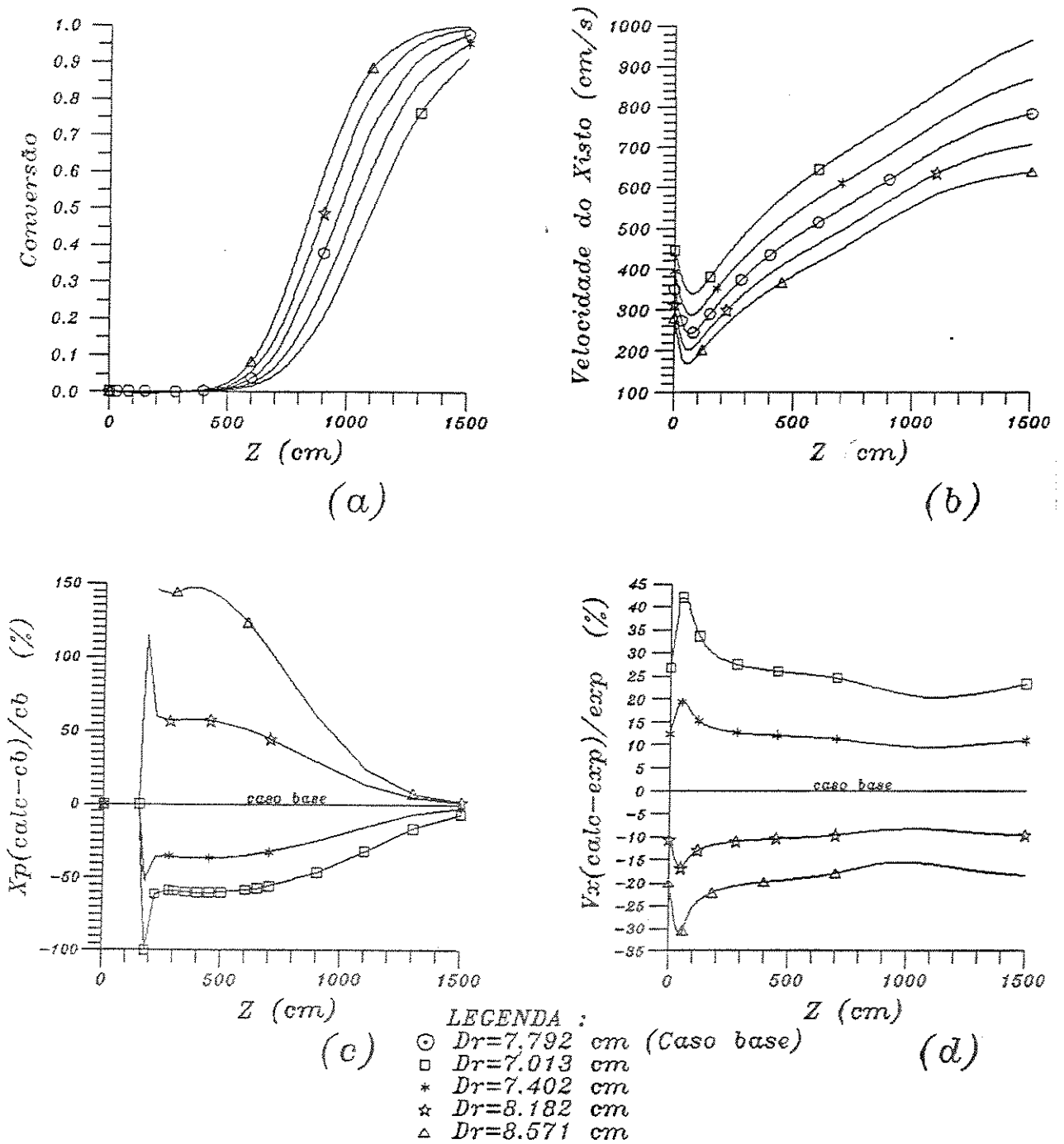


Figura 5.21: Influência da variação do diâmetro do reator nos perfis (a) - da conversão; (b) - v_z ; (c) - ΔX e (d) - Δv_z

Na figura 5.21.d das diferenças relativas percentuais em v_z com Z de acordo

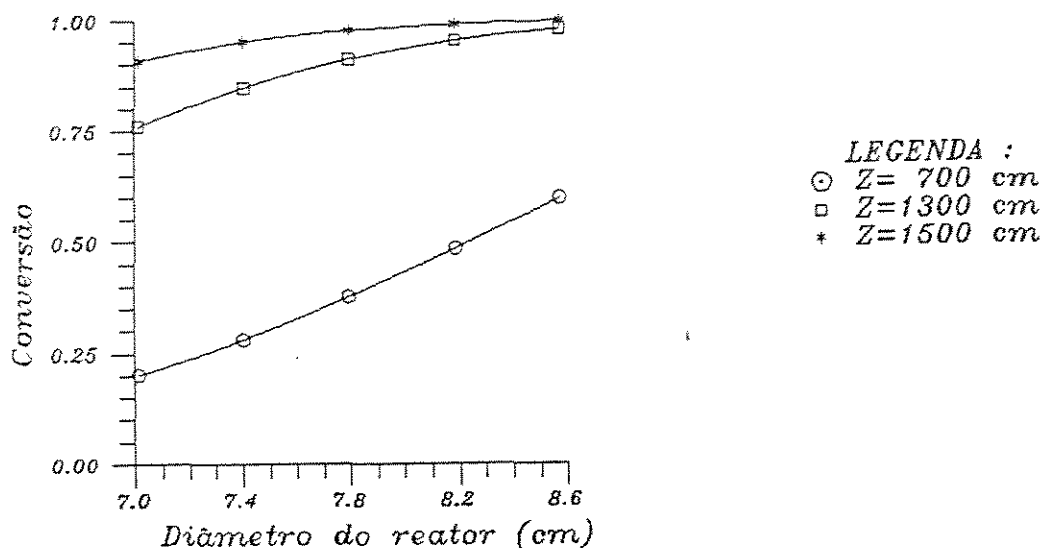


Figura 5.22: Variação da conversão com o diâmetro do reator

com as várias configurações do diâmetro do reator, existem pontos de máximo e de mínimo. Os pontos de máximo acontecem para os casos onde o diâmetro é menor que o do caso base. Estes pontos de máximo ocorrem porque ao diminuir o diâmetro do reator, as velocidades do gás e do xisto aumentam, como já foi dito, e nestas condições a variação da temperatura do gás com a dimensão axial ($\frac{dT_G}{dz}$) é menor que no caso base.

Como T_g precisará de maior comprimento para perder a temperatura, o processo da influência na densidade ocorre numa proporção menor. Como já foi visto, T_g é quem comanda as velocidades e aí é possível explicar porque há este ponto de máximo.

Toda variação em v_x irá significar um tempo de residência diferente. Continuando com o caso de reduzir o diâmetro, a velocidade média do xisto aumenta e o tempo de residência diminui em relação ao caso base. Este efeito sobre o tempo de residência é que vai fazer com que a conversão também diminua. O tempo de residência das partículas irá variar aproximadamente no dobro da proporção da variação do diâmetro do reator.

Certamente, o diâmetro do reator, assim como o seu comprimento, são características geométricas que podem ser otimizadas, pois na figura 5.22 que mostra a variação de X com D_1 se vê as diversas possibilidades de combinar comprimento final

do reator e diâmetro para dar a conversão final desejada.

Vazão mássica do gás de aquecimento (m_{comb})

A sensibilidade do modelo para a vazão de gás de combustão é alta. É o que se conclui após analisar as tabelas 5.35.a e 5.35.b e as figuras 5.23 e 5.24 principalmente com relação às variáveis principais usadas na validação do modelo, que são a conversão final e o perfil da temperatura de parede do reator.

Tabela 5.35: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : Vazão de gás de aquecimento

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ε	v_g	T_g	v_z	T_z	Pressão	T_c	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_s}
Zmaior	1100.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1300.0	1500.0	1500.0
MC08	.99858	834.56	505.86	630.48	513.65	.92253	629.28	.30275	.04131	.03843	564.07	59.63
Relação	.9998	.8760	.8755	.8426	.8771	.9999	.8826	.4213	1.3027	6.4495	.8700	.9029
Zmaior	1100.0	100.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
MC09	.99873	866.66	553.72	712.49	562.96	.92260	686.49	.58233	.03469	.03098	621.35	63.99
Relação	.9999	.9599	.9583	.9522	.9612	1.0000	.9629	.8104	1.0939	1.5387	.9583	.9690
Zmaior	1100.0	100.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
MC095	.99877	885.21	566.04	675.46	574.67	.92261	700.13	.65440	.03312	.02527	635.24	65.04
Relação	1.0000	.9805	.9796	.9752	.9812	1.0000	.9820	.9107	1.0443	1.2550	.9797	.9849
Zmaior	1100.0	100.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
MC105	.99882	919.41	588.96	708.79	596.02	.92264	725.05	.77393	.03035	.01571	660.80	66.98
Relação	1.0000	1.0184	1.0193	1.0233	1.0177	1.0000	1.0170	1.0770	.9570	.7802	1.0192	1.0142
Zmaior	1100.0	100.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	900.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
MC110	.99885	934.95	599.61	723.94	605.97	.92265	736.49	.48099	.02911	.01201	672.64	67.87
Relação	1.0001	1.0356	1.0378	1.0452	1.0347	1.0000	1.0330	1.2779	.9179	.5964	1.0374	1.0278
Zmaior	900.0	100.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	900.0	700.0	900.0	1500.0	1500.0
MC120	.99875	962.33	619.14	750.64	624.53	.92267	757.55	.58054	.02683	.02805	694.56	69.52
Relação	1.0001	1.0659	1.0715	1.0837	1.0664	1.0001	1.0625	1.5425	.8460	.6529	1.0713	1.0528

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	MC08	MC09	MC095	MC105	MC110	MC120
ε	-1.478D-04	-4.418D-05	-2.093D-05	1.885D-05	3.674D-05	6.735D-05
v_g	-6.319D+01	-2.036D+01	-9.851D+00	9.242D+00	1.800D+01	3.396D+01
T_g	-4.419D+01	-1.440D+01	-7.018D+00	6.672D+00	1.309D+01	2.498D+01
v_z	-6.020D+01	-1.934D+01	-9.343D+00	8.742D+00	1.701D+01	3.200D+01
T_z	-4.723D+01	-1.519D+01	-7.385D+00	6.994D+00	1.371D+01	2.613D+01
Pressão	-4.231D-05	-1.112D-05	-4.809D-06	3.034D-06	7.520D-06	1.267D-05
T_c	-6.503D+01	-2.021D+01	-9.755D+00	9.129D+00	1.771D+01	3.337D+01
Conversão	-1.715D-01	-5.095D-02	-2.383D-02	2.103D-02	3.969D-02	7.080D-02
Querogênio	5.231D-03	1.502D-03	6.886D-04	-6.701D-04	-1.243D-03	-2.288D-03
Betume	1.063D-02	3.211D-03	1.516D-03	-1.275D-03	-2.428D-03	-4.261D-03
T_{w_r}	4.545D+01	1.419D+01	6.861D+00	6.443D+00	1.252D+01	2.368D+01
T_{w_s}	3.386D+00	1.052D+00	5.082D-01	4.763D-01	9.243D-01	1.745D+00
FDIF (%) :	70.707478	24.145899	10.952730	12.762250	23.097591	45.923882
CONV. FINAL	7.029D-01	9.388D-01	9.628D-01	9.851D-01	9.899D-01	9.946D-01
Relação(X_f)	.719	.961	.986	1.008	1.013	1.018
TRESID	3.059D+00	2.823D+00	2.771D+00	2.682D+00	2.643D+00	2.575D+00
Relação(Tr)	1.123	1.036	1.017	.984	.970	.945

TRESID = 2.724D+00 — CBASE

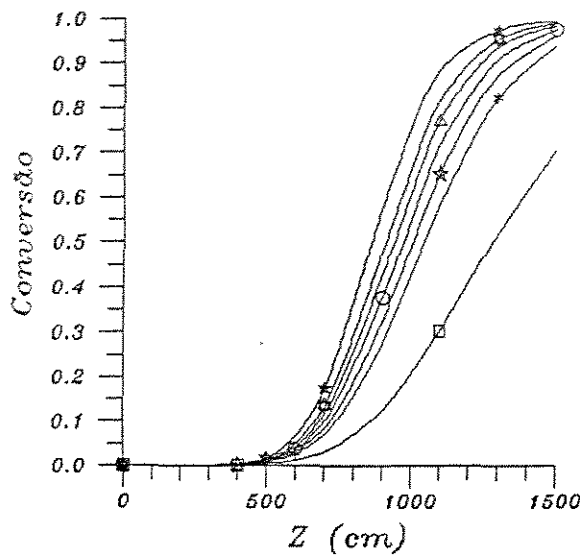
Verifica-se que T_{w_r} cresce com o aumento da vazão. Neste caso, como a massa de gás na unidade de tempo que fornece o calor necessário é maior, a sua queda

de temperatura é menor, o que equivale dizer que T_C será superior que a do caso base. É exatamente pelo fato de T_C cair menos, que T_w , passa a ter valores superiores aos do caso base.

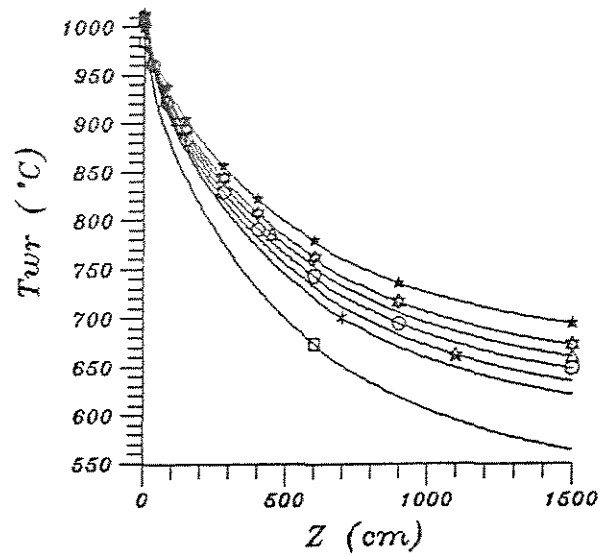
O efeito observado sobre a conversão, quando se altera o valor de \dot{m}_{comb} , é que ela aumenta para vazões maiores de gás. A explicação deste fato é que o calor transferido ao sistema é menor, aumentando assim as temperaturas do gás de arraste e xisto. A elevação da temperatura média do xisto influencia na conversão provocando o aumento. Existe o efeito atenuador pela redução no tempo de residência das partículas, que é causado pela elevação na velocidade do xisto e é consequência, portanto, dos aumentos na temperatura e velocidade do gás de arraste. No entanto, este efeito exerce influência menor que o da temperatura da partícula.

Quanto à validação feita para o teste 01, onde o perfil é bastante parecido com o que ocorre na curva de $\dot{m}_{comb} = 527,4 \text{ kg/h}$, inclusive dando conversões finais bem próximas, observa-se que qualquer variação no valor de \dot{m}_{comb} altera bastante os valores finais. Neste caso, conclui-se que quanto mais exato for o valor de \dot{m}_{comb} , maior será a confiança no resultado simulado. Este fato é específico para o teste 01, porque dá para notar nas figuras 5.23.a e 5.24 e tabelas 5.35 que é na região onde a conversão gira em torno de 70% que se tem as maiores diferenças absolutas na conversão. O caso poderia até ser resolvido com uma outra simulação que confrontasse com dados experimentais de um caso onde a conversão esteja próxima a 70%. Se nesta simulação os resultados forem confirmados, as conclusões feitas anteriormente, principalmente sobre o fator de forma para a radiação, certamente terão maior credibilidade.

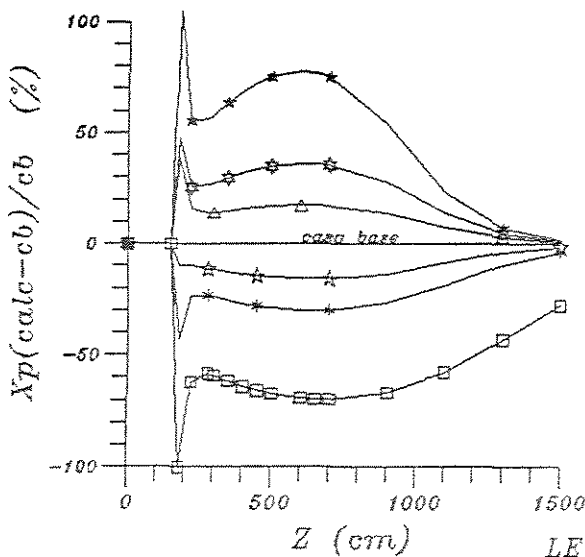
Mais uma vez as considerações a respeito do tamanho do reator e de \dot{m}_{comb} irão influir na análise da viabilidade econômica. Partindo-se do princípio que a conversão deve ser a maior possível e que T_w , não deve ser muito alta; então o reator deve ter um tamanho elevado. Mas o que se observa na figura 5.24, de X versus \dot{m}_{comb} , é que a medida que se deseja aumentar a conversão usando reatores maiores, o aumento da vazão de gás surte cada vez menos efeito. Como a vazão de gás representa o gasto de combustível, e por consequência grande parte do custo operacional, a otimização desta planta teria que levar em consideração os fatores observados. É bem provável que a quantidade ótima de combustível seja menor que aquelas usadas nas simulações, dando uma conversão final próxima, porque num estudo de otimização é possível incluir efeitos de outras variáveis operacionais. O que se quer dizer é que pode haver



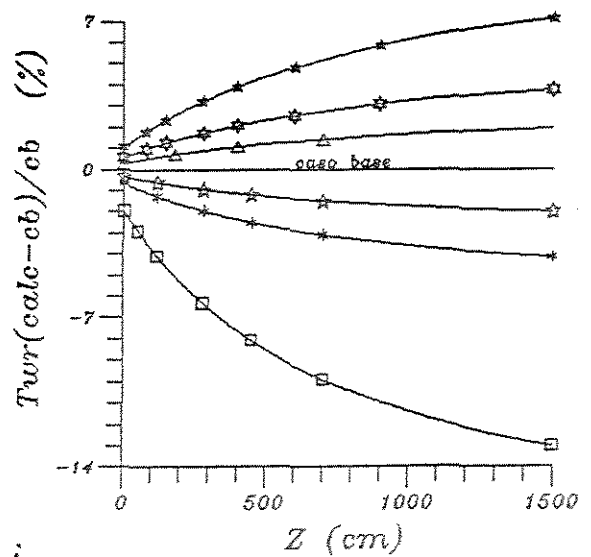
(a)



(b)



(c)



(d)

LEGENDA :

- $MCo=732.49 \text{ kg/h}$ (Caso base)
- $MCo=527.40 \text{ kg/h}$
- * $MCo=659.25 \text{ kg/h}$
- ☆ $MCo=695.87 \text{ kg/h}$
- △ $MCo=769.12 \text{ kg/h}$
- ✱ $MCo=805.74 \text{ kg/h}$
- ★ $MCo=878.99 \text{ kg/h}$

Figura 5.23: Influência da variação da vazão do gás de aquecimento nos perfis (a) - da conversão; (b) - T_{wr} ; (c) - ΔX e (d) - ΔT_{wr} ,

uma outra variável que proporcione o aumento de conversão de 96% até 99%, por

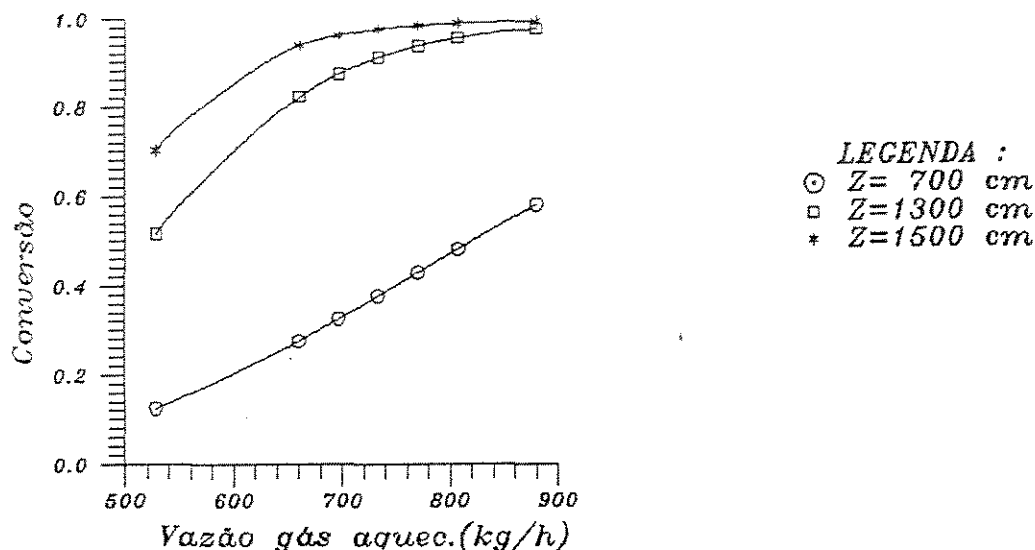


Figura 5.24: Variação da conversão com a vazão do gás de aquecimento

exemplo, a um custo menor do que utilizar mais 120 kg/h na vazão de gás.

O controle da vazão de gás combustível poderá ser feito pela medida de sua temperatura final, ou pela temperatura de parede do reator (T_w). Neste último caso, o ponto mais indicado para a leitura seria o final do reator, que é onde se observa as maiores diferenças na temperatura provocadas pelas alterações na vazão de gás.

Pressão inicial (p_0)

Pelas figuras 5.25 e 5.26 pode-se notar que a p_0 influi no resultado final da simulação, porém sem muita intensidade. Com relação à conversão final, quanto menor for a pressão do gás na entrada do reator diminui a conversão cada vez mais. Por outro lado, aumentar a pressão indefinidamente pode melhorar a conversão, mas o acréscimo obtido a partir de um certo valor de p_0 , não é expressivo. Este fato leva à conclusão de que p_0 também deve ter um ponto ótimo.

O efeito na conversão explica-se pela variação na velocidade do xisto, o que irá modificar o tempo de residência das partículas. Diminuindo a pressão, a densidade do gás diminui o que altera a fluidodinâmica, no caso, a velocidade de escoamento do gás de arraste aumenta e com isto arrasta mais o xisto, pois v_z também aumenta. Com o aumento de v_z o tempo de residência diminui quase na mesma proporção em que diminui p_0 . Neste caso, deveria se esperar que a conversão final também variasse

Tabela 5.36: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : Pressão inicial

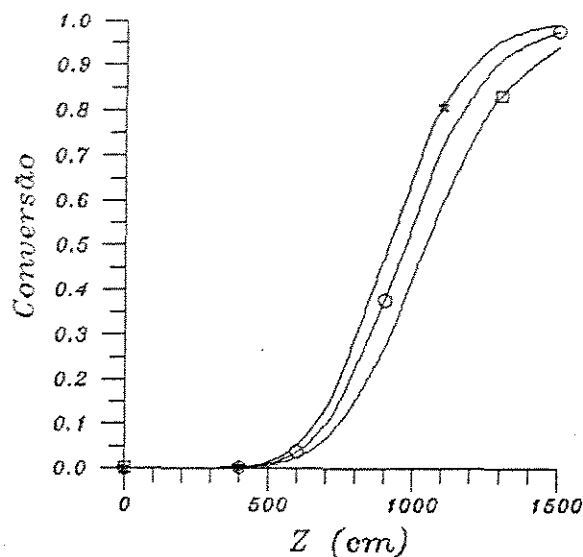
a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_z	T_z	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	60.0	300.0	1100.0	1300.0	900.0	.0	1100.0	1100.0	700.0	1100.0	410.566	742.265
P008	.99758	1174.75	547.90	935.93	530.98	.74593	747.01	.59106	.03959	.02729	790.53	73.69
Relação	1.0010	1.2331	.9932	1.2508	.9967	.8011	1.0020	.8225	1.2483	1.3555	1.0026	1.0016
Zmaior	55.0	300.0	1100.0	1300.0	900.0	.0	1100.0	1100.0	700.0	1100.0	439.434	857.735
P009	.99713	1052.93	549.85	833.27	532.00	.83805	746.21	.65929	.03553	.02360	781.52	71.96
Relação	1.0005	1.1052	.9968	1.1136	.9986	.9000	1.0009	.9175	1.1203	1.1722	1.0012	1.0008
Zmaior	55.0	300.0	1100.0	1300.0	700.0	.0	1100.0	1100.0	700.0	1100.0	410.566	857.735
P0095	.99687	1000.34	550.76	788.74	485.99	.88462	745.85	.69005	.03359	.02183	788.92	71.93
Relação	1.0003	1.0500	.9984	1.0541	.9992	.9500	1.0004	.9603	1.0590	1.0844	1.0006	1.0004
Zmaior	55.0	300.0	1100.0	1300.0	700.0	.0	1100.0	1100.0	700.0	1100.0	439.434	857.735
P0105	.99629	909.29	552.43	711.31	486.70	.97773	745.23	.74484	.02991	.01852	780.19	71.88
Relação	.9997	.9544	1.0015	.9506	1.0007	1.0500	.9996	1.0366	.9432	.9199	.9995	.9997
Zmaior	50.0	300.0	1100.0	1300.0	700.0	.0	1100.0	900.0	700.0	1100.0	742.265	857.735
P0110	.99602	869.58	553.17	677.38	486.99	1.02429	744.95	.42734	.02819	.01700	716.08	71.86
Relação	.9994	.9128	1.0028	.9053	1.0013	1.1000	.9992	1.1354	.8888	.8445	.9989	.9994
Zmaior	50.0	300.0	1100.0	1300.0	700.0	.0	1100.0	900.0	650.0	1100.0	742.265	857.735
P0120	.99533	799.52	554.49	617.31	487.52	1.11740	744.44	.47639	.03046	.01424	715.40	71.82
Relação	.9987	.8392	1.0052	.8250	1.0024	1.2000	.9985	1.2657	.8177	.7074	.9980	.9988

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	P008	P009	P0095	P0105	P0110	P0120
ϵ	3.792D-04	1.946D-04	9.814D-05	-1.003D-04	-2.030D-04	-4.150D-04
v_g	1.803D+02	8.091D+01	3.836D+01	-3.481D+01	-6.654D+01	-1.223D+02
T_g	-2.103D+00	-9.536D-01	-4.597D-01	4.178D-01	7.929D-01	1.461D+00
v_z	1.478D+02	6.650D+01	3.156D+01	-2.868D+01	-5.486D+01	-1.009D+02
T_z	-6.310D-01	-2.621D-01	-1.276D-01	1.090D-01	1.959D-01	3.287D-01
Pressão	-1.846D-01	-9.279D-02	-4.638D-02	4.638D-02	9.275D-02	1.855D-01
T_C	1.200D+00	5.461D-01	2.592D-01	-2.380D-01	-4.588D-01	-8.532D-01
Conversão	-4.926D-02	-2.314D-02	-1.122D-02	1.053D-02	2.042D-02	3.853D-02
Querogênio	3.984D-03	1.861D-03	8.995D-04	-8.423D-04	-1.632D-03	-3.077D-03
Betume	5.722D-04	2.791D-04	1.384D-04	-1.322D-04	-2.569D-04	-4.876D-04
T_{w_r}	1.880D+00	8.477D-01	4.020D-01	3.658D-01	7.009D-01	1.293D+00
T_{w_i}	9.035D-02	4.072D-02	1.930D-02	1.756D-02	3.364D-02	6.207D-02
FDIF (%) :	68.959127	32.595795	15.664040	15.017225	29.679436	57.362691
CONV. FINAL	9.408D-01	9.627D-01	9.706D-01	9.820D-01	9.860D-01	9.916D-01
Relação(X_f)	.963	.985	.994	1.005	1.009	1.015
TRESID	2.148D+00	2.431D+00	2.577D+00	2.874D+00	3.026D+00	3.335D+00
Relação(Tr)	.788	.892	.946	1.035	1.111	1.224

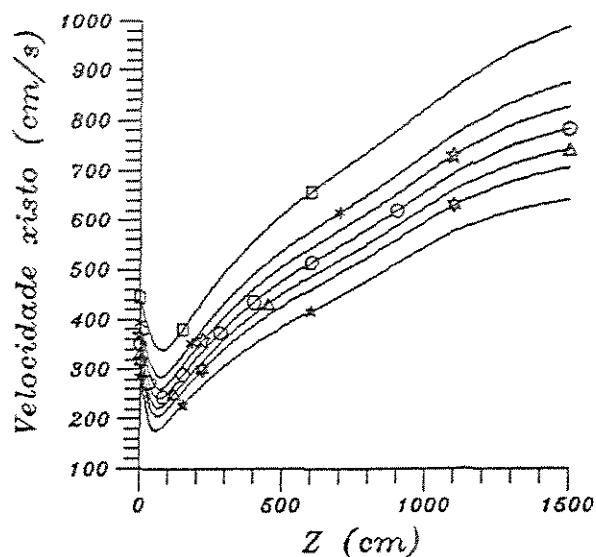
TRESID = 2.724D+00 — CBASE

de acordo com o tempo de residência das partículas, o que não é observado porque o reator é longo e a conversão final se aproxima de 98%. Sabe-se que nesta faixa, o esforço para aumentar a conversão deve ser muito grande. Mas tomando uma fração menor do reator, $Z = 1100$ por exemplo, (onde ocorrem as maiores diferenças absolutas na conversão) verifica-se que a proporção da variação da conversão é bem parecida com a da pressão inicial.

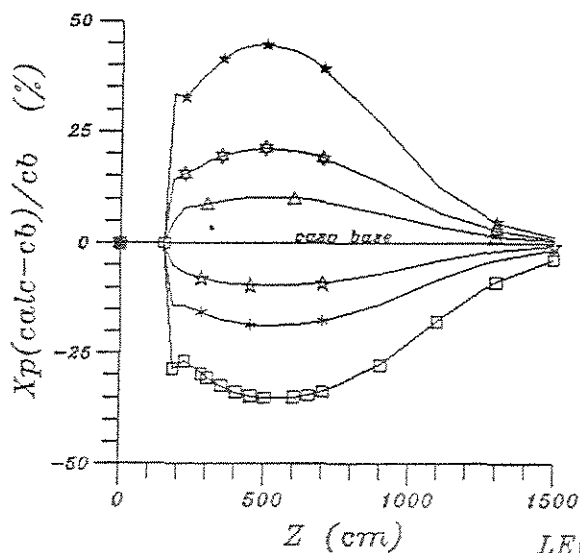
Como a pressão é uma variável operacional fácil de medir e também de controlar, mesmo tendo pouca influência em reatores maiores, deve ser monitorada. O ponto ideal para a colocação dos sensores é onde existe a maior diferença absoluta,



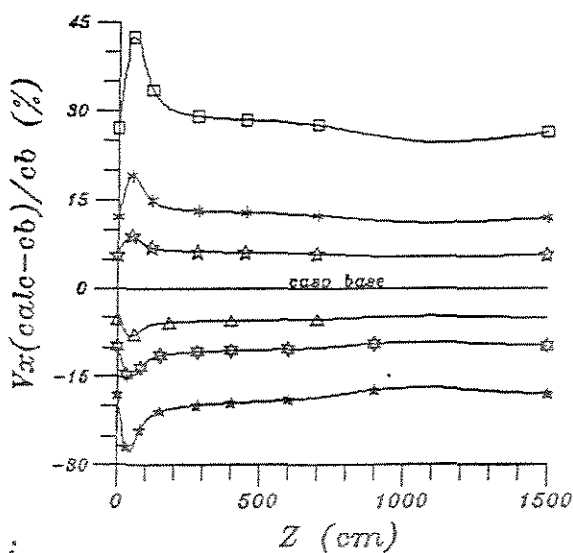
(a)



(b)



(c)



(d)

LEGENDA :
 ○ $Po=0.9312$ atm (Caso base)
 □ $Po=0.7459$ atm
 * $Po=0.8381$ atm
 ☆ $Po=0.8846$ atm
 △ $Po=0.9777$ atm
 ☆ $Po=1.0243$ atm
 * $Po=1.1174$ atm

Figura 5.25: Influência da variação da pressão inicial nos perfis (a) - da conversão; (b) - v_z ; (c) - ΔX e (d) - Δv_z

ou seja, na base do reator.

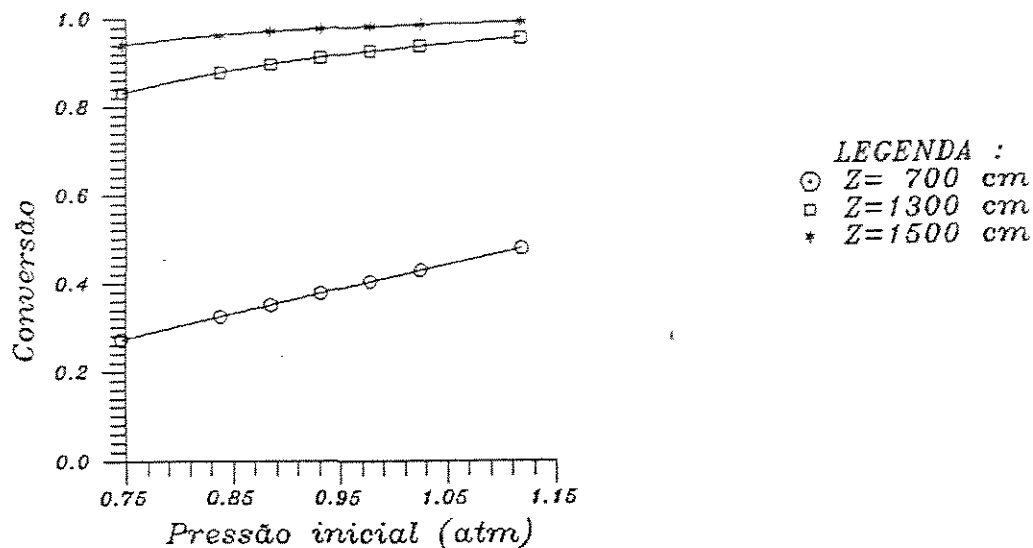


Figura 5.26: Variação da conversão com a pressão inicial

Emissividade do reator (ϵ_{Ri})

Como o valor de ϵ_{Ri} introduzido no programa é baseado em uma determinação experimental [46], considera-se que a incerteza neste parâmetro é pequena, mas para avaliar a validade dessa determinação experimental, apresenta-se a seguir uma análise da sua influência.

De maneira geral, as respostas das simulações que sofrem a confrontação com os dados experimentais (testes 1,2 e 3) não dependem tanto do valor de ϵ_{Ri} . No entanto, seria preciso mais um teste com conversão final baixa para se ter certeza se este valor de ϵ_{Ri} se aplica ao caso. Usando os dados da tabela 5.37 pode-se notar que na fase intermediária do reator, onde a conversão gira em torno de 65% ($Z = 1100 \text{ cm}$), a influência do parâmetro (ϵ_{Ri}) é maior, por isto é que se necessita de um outro teste para este nível da conversão.

As consequências de um erro na determinação experimental de ϵ_{Ri} , podem ser explicadas da seguinte forma (como observadas nos gráficos 5.27.a e 5.27.b). Supondo que a ϵ_{Ri} usada fosse 5% abaixo do valor real. A simulação irá avaliar uma taxa de calor, da parede interna do reator para as partículas de xisto, menor de que a real, resultando em T_x menor (5,7 °C máxima e 4,63 °C média). A diminuição de T_x diminui a taxa de reação e a conversão. Esta influência só não é maior porque existe a

Tabela 5.37: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : Emissividade do Reator

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_z	T_z	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	180.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	287.887	689.434
EMR08	.99722	861.98	555.03	651.50	507.97	.92252	807.49	.54519	.03733	.03353	856.20	76.04
Relação	.9999	.9548	.9606	.9406	.9535	.9999	1.0261	.7587	1.1771	1.6655	1.0352	1.0219
Zmaior	180.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	650.0	1100.0	277.887	660.566
EMR09	.99727	883.42	567.01	673.06	520.93	.92258	796.69	.63904	.03989	.02633	844.59	75.67
Relação	1.0000	.9785	.9813	.9717	.9778	.9999	1.0124	.8893	1.0708	1.3080	1.0168	1.0103
Zmaior	170.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	650.0	1100.0	267.887	660.566
EMR095	.99723	893.56	572.64	683.28	527.08	.92260	791.64	.68137	.03852	.02304	841.05	75.27
Relação	1.0000	.9897	.9911	.9865	.9893	1.0000	1.0060	.9482	1.0340	1.1444	1.0081	1.0050
Zmaior	160.0	100.0	1100.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	900.0	650.0	1100.0	257.887	660.566
EMR105	.99721	911.75	556.62	701.66	538.30	.92264	782.34	.41154	.03603	.01746	831.40	74.53
Relação	1.0000	1.0099	1.0091	1.0130	1.0104	1.0000	.9942	1.0934	.9672	.8675	.9921	.9951
Zmaior	170.0	100.0	1100.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	900.0	650.0	1100.0	257.887	650.0
EMR110	.99729	920.05	561.39	710.08	545.56	.92267	778.06	.44601	.03489	.01511	825.16	74.37
Relação	1.0000	1.0191	1.0177	1.0252	1.0203	1.0000	.9887	1.1850	.9365	.7505	.9846	.9906

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :					
Variável	EMR08	EMR09	EMR095	EMR105	EMR110
ϵ	-6.828D-05	-3.162D-05	-1.504D-05	1.400D-05	2.737D-05
v_g	-2.578D+01	-1.219D+01	-5.836D+00	5.639D+00	1.094D+01
T_g	-1.844D+01	-8.743D+00	-4.194D+00	4.068D+00	7.909D+00
v_z	-2.500D+01	-1.182D+01	-5.658D+00	5.464D+00	1.060D+01
T_z	-2.038D+01	-9.653D+00	-4.630D+00	4.491D+00	8.730D+00
Pressão	-5.154D-05	-2.368D-05	-1.146D-05	9.659D-06	1.973D-05
T_C	1.704D+01	8.090D+00	3.902D+00	-3.819D+00	-7.377D+00
Conversão	-6.579D-02	-3.054D-02	-1.447D-02	1.369D-02	2.635D-02
Querogênio	2.755D-03	1.280D-03	6.102D-04	-5.812D-04	-1.121D-03
Betume	3.331D-03	1.544D-03	7.276D-04	-6.857D-04	-1.316D-03
T_{w_r}	2.732D+01	1.310D+01	6.346D+00	6.260D+00	1.215D+01
T_{w_i}	1.331D+00	6.337D-01	3.059D-01	2.996D-01	5.797D-01
FDIF (%) :	45.385374	23.739373	12.363457	12.874490	26.203151
CONV. FINAL	9.352D-01	9.621D-01	9.707D-01	9.817D-01	9.852D-01
Relação(X_f)	.957	.985	.994	1.005	1.008
TRESID	2.654D+00	2.784D+00	2.753D+00	2.697D+00	2.673D+00
Relação(Tr)	1.048	1.022	1.010	.990	.981

$$TRESID = 2.724D+00 - CBASE$$

concorrência do efeito na fluidodinâmica. As reduções em T_z e T_g causam a diminuição das velocidades e aumento no tempo de residência das partículas. Portanto, este efeito irá abrandar o efeito da temperatura sobre a reação, que é dominante. O perfil de T_{w_r} será superior porque há maior resistência à transferência de calor para a suspensão quanto menor for a ϵ_{Ri} .

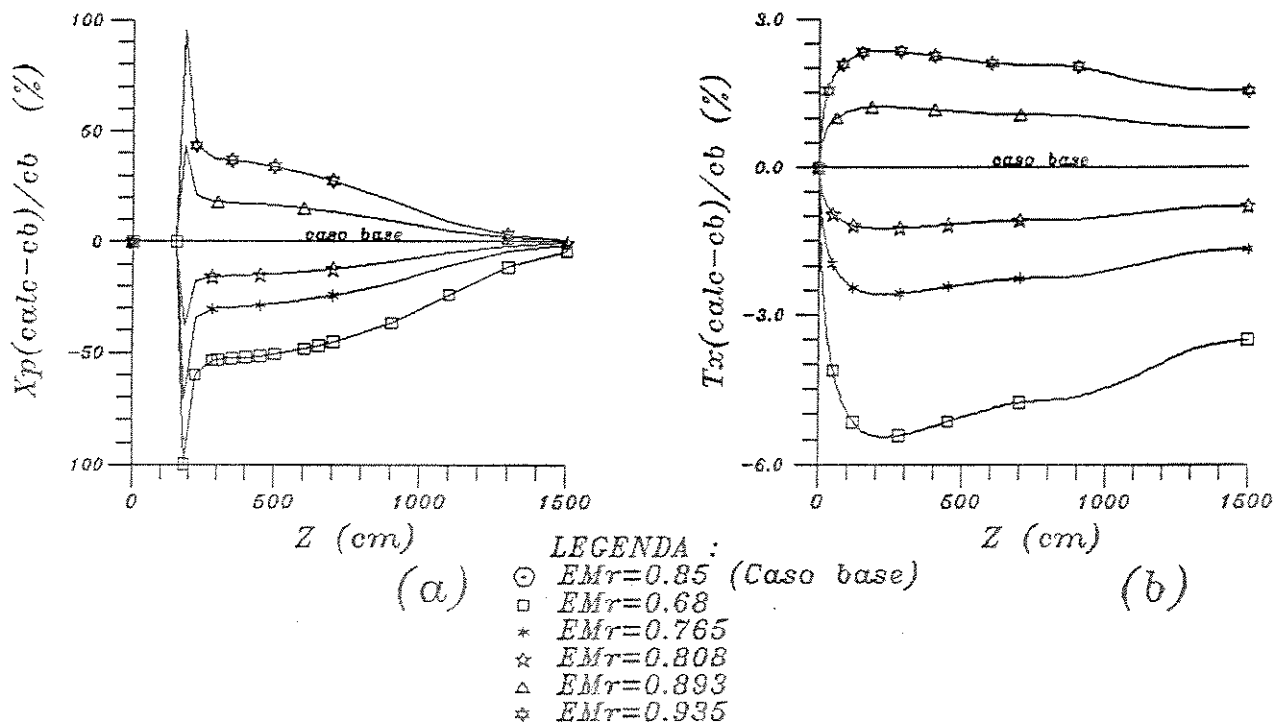


Figura 5.27: Influência da variação da emissividade do reator nos perfis (a) - da conversão e (b) - ΔT_x

Velocidade inicial das partículas (v_{x0})

Esta (v_{x0}) é uma condição inicial do sistema de equações diferenciais e é estimada de acordo com as propriedades físicas e as vazões do gás e do xisto. Com estes dados é possível estimar os valores da porosidade, v_z e v_g iniciais, na entrada do reator, como foi visto na seção 2.3.

Tabela 5.38: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : **Velocidade inicial das partículas de xisto**

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_z	T_z	Pressão	T_r	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	110.0	100.0	550.0	.0	900.0	1300.0	1300.0	900.0	650.0	1100.0	1500.0	1500.0
VX08	.99699	918.31	447.18	333.09	543.33	.92297	715.85	.44669	.03488	.01532	653.07	66.33
Relação	1.0002	1.0171	1.0201	.9500	1.0198	1.0004	1.0041	1.1868	.9361	.7612	1.0072	1.0044
Zmaior	120.0	100.0	600.0	.0	900.0	1300.0	1300.0	900.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
VX09	.99692	905.99	455.71	347.11	534.88	.92269	713.54	.38989	.03127	.01912	649.30	66.09
Relação	1.0000	1.0035	1.0039	.9900	1.0040	1.0001	1.0008	1.0359	.9859	.9497	1.0014	1.0009
Zmaior	100.0	100.0	600.0	.0	900.0	1300.0	1300.0	900.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
VX095	.99673	903.15	454.12	350.27	532.97	.92263	713.02	.37769	.03167	.02003	648.46	66.04
Relação	1.0000	1.0003	1.0004	.9990	1.0004	1.0000	1.0001	1.0035	.9986	.9950	1.0001	1.0001
Zmaior	105.0	100.0	600.0	.0	900.0	1300.0	1300.0	900.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
VX105	.99676	902.51	453.77	350.97	532.54	.92262	712.90	.37499	.03176	.02024	648.27	66.03
Relação	1.0000	.9996	.9996	1.0010	.9996	1.0000	.9999	.9963	1.0014	1.0053	.9999	.9999
Zmaior	115.0	100.0	600.0	.0	900.0	1300.0	1300.0	900.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
VX110	.99681	899.63	452.19	354.12	530.63	.92255	712.39	.36302	.03216	.02118	647.43	65.98
Relação	1.0000	.9964	.9961	1.0100	.9960	.9999	.9992	.9645	1.0142	1.0519	.9986	.9991
Zmaior	120.0	100.0	1100.0	.0	900.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
VX120	.99671	886.97	543.00	368.15	522.36	.92228	710.19	.65088	.03396	.02541	643.81	65.76
Relação	.9998	.9824	.9844	1.0500	.9805	.9996	.9961	.9058	1.0709	1.2623	.9930	.9958

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	VX08	VX09	VX095	VX105	VX110	VX120
ϵ	1.061D-04	2.142D-05	2.092D-06	-2.254D-06	-2.182D-05	-1.080D-04
v_g	1.019D+01	2.036D+00	2.009D-01	-2.097D-01	-2.050D+00	-1.003D+01
T_g	7.479D+00	1.494D+00	1.476D-01	-1.534D-01	-1.502D+00	-7.334D+00
v_z	9.533D+00	1.900D+00	1.871D-01	-1.960D-01	-1.911D+00	-9.312D+00
T_z	8.175D+00	1.630D+00	1.608D-01	-1.676D-01	-1.638D+00	-7.991D+00
Pressão	1.907D-04	3.801D-05	3.763D-06	-3.947D-06	-3.898D-05	-1.886D-04
T_r	1.452D+00	2.853D-01	2.797D-02	-2.934D-02	-2.850D-01	-1.369D+00
Conversão	2.583D-02	5.190D-03	5.108D-04	-5.395D-04	-5.259D-03	-2.601D-02
Querogênio	-1.113D-03	-2.043D-04	-2.026D-05	2.093D-05	2.061D-04	1.064D-03
Betume	-1.276D-03	-2.755D-04	-2.708D-05	2.868D-05	2.803D-04	1.342D-03
T_{w_r}	9.553D-01	1.857D-01	1.832D-02	1.890D-02	1.842D-01	8.801D-01
T_{w_i}	4.540D-02	8.818D-03	8.696D-04	8.977D-04	8.746D-03	4.175D-02
FDIF (%) :	21.940172	3.177116	.341065	.252117	3.084699	16.374582
CONV. FINAL	9.844D-01	9.787D-01	9.771D-01	9.768D-01	9.751D-01	9.660D-01
Relação(X_f)	1.008	1.002	1.0	1.0	.998	.989
TRESID	2.678D+00	2.715D+00	2.723D+00	2.725D+00	2.734D+00	2.771D+00
Relação(Tr)	.983	.997	1.0	1.0	1.003	1.017

TRESID = 2.724D+00 — CBASE

Como se trata de uma estimativa, dependente portanto das correlações utilizadas nesta fase, é importante averiguar como ficam os resultados, caso haja um erro nesta determinação. Para tal, submetem-se à simulação valores diferentes para

v_{x0} . Pelas figuras 5.28.a e 5.28.b e pela tabela 5.38 é possível avaliar as consequências destas variações.

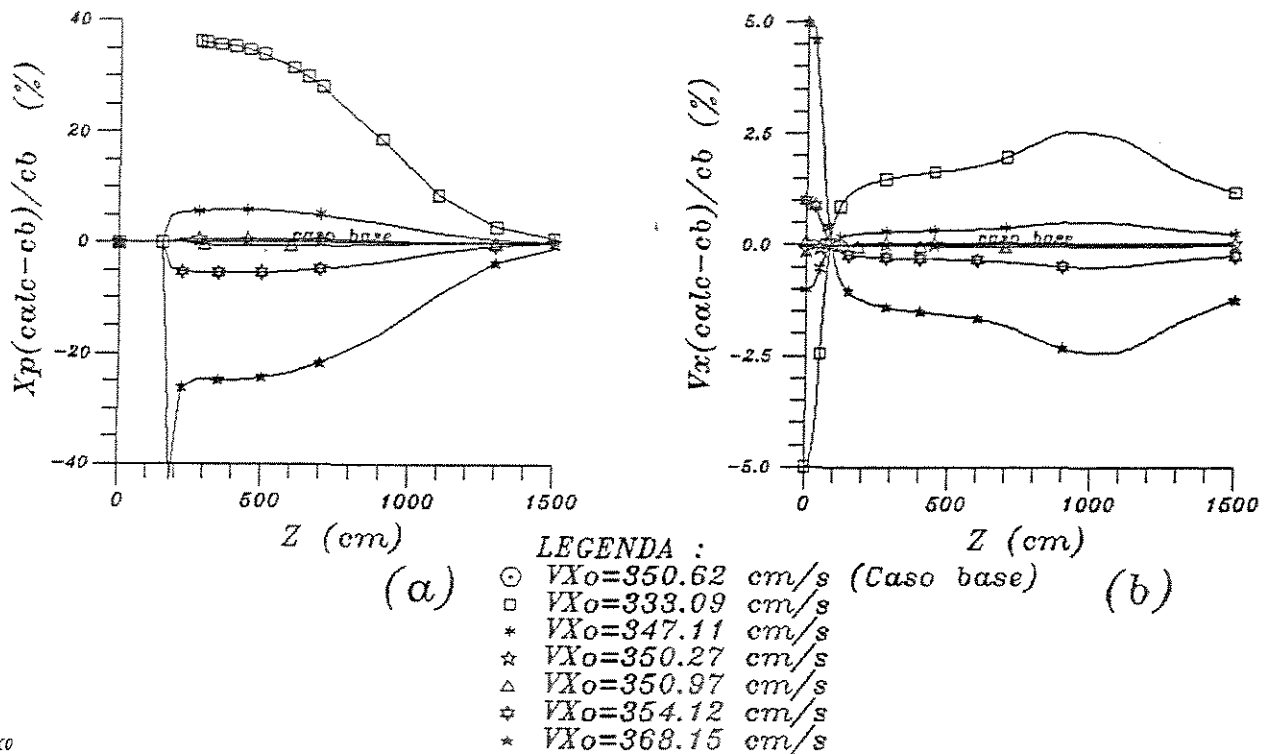


Figura 5.28: Influência da variação da estimativa da velocidade inicial das partículas nos perfis (a) - da conversão e (b) - Δv_x

A figura 5.28.b de $\Delta v_x(\%)$ versus Z mostra que pequenas alterações no valor de v_{x0} , na ordem de 1% (3,5 cm/s), podem causar variações de até 3,5% na conversão em $Z = 900 \text{ cm}$. Isto indica que um certo cuidado na determinação de v_{x0} é necessário. No entanto, pelo mesmo gráfico, pequenos desvios em v_{x0} tendem a ser amortecidos nos reatores mais longos.

Diâmetro médio das partículas (d_p)

A utilização de um diâmetro médio para representar uma amostra de partículas de vários tamanhos é uma aproximação necessária. Pretende-se avaliar se a estimativa para d_p , adotada nos testes 1,2 e 3, exerce influência sobre os resultados obtidos. Para isto, modifica-se o dado do diâmetro em até 10% acima e 20% abaixo. As figuras 5.29 e 5.30 mostram as reações do modelo à variação de d_p . Com ajuda da tabela 5.39 é possível dizer que d_p não tem uma influência marcante sobre as principais variáveis

usadas na comparação com os dados experimentais, que são a conversão final e a temperatura de parede do reator.

Tabela 5.39: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : **Diâmetro médio das partículas**

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_z	T_z	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	90.0	100.0	15.0	650.0	15.0	1300.0	1100.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	639.434
DP08	.99712	899.56	118.54	583.87	109.16	.92302	745.00	.67267	.03486	.02286	1003.37	75.21
Relação	1.0005	.9964	.9748	1.0996	1.0151	1.0004	.9993	.9361	1.0993	1.1353	.9990	.9994
Zmaior	90.0	100.0	15.0	650.0	15.0	1300.0	1100.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	639.434
DP09	.99689	901.10	120.17	557.03	108.30	.92283	745.29	.69559	.03331	.02151	1003.87	75.24
Relação	1.0002	.9981	.9883	1.0491	1.0071	1.0002	.9997	.9680	1.0504	1.0687	.9995	.9997
Zmaior	90.0	100.0	15.0	650.0	15.0	1300.0	1100.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	639.434
DP095	.99677	901.97	120.91	543.91	107.90	.92273	745.41	.70717	.03252	.02082	1004.11	75.25
Relação	1.0001	.9990	.9944	1.0244	1.0034	1.0001	.9998	.9841	1.0253	1.0342	.9998	.9999
Zmaior	95.0	100.0	15.0	650.0	15.0	1300.0	1100.0	1100.0	650.0	1100.0	1.057	1.057
DP105	.99655	903.71	122.24	518.25	107.19	.92251	745.62	.72978	.03644	.01945	1004.59	97.19
Relação	.9999	1.0010	1.0053	.9760	.9968	.9999	1.0001	1.0156	.9782	.9660	1.0002	1.0001
Zmaior	95.0	100.0	15.0	650.0	15.0	1300.0	1300.0	1100.0	650.0	1100.0	1.057	1.057
DP110	.99641	904.71	122.83	505.80	106.87	.92240	713.16	.74125	.03561	.01873	1004.82	97.20
Relação	.9997	1.0021	1.0102	.9526	.9938	.9998	1.0003	1.0315	.9558	.9305	1.0005	1.0002

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :					
Variável	DP08	DP09	DP095	DP105	DP110
ϵ	1.589D-04	8.211D-05	4.184D-05	-4.365D-05	-8.813D-05
v_g	-8.712D-01	-4.892D-01	-2.456D-01	2.496D-01	5.709D-01
T_g	1.165D+00	5.444D-01	2.717D-01	-2.682D-01	-4.858D-01
v_z	4.853D+01	2.386D+01	1.184D+01	-1.165D+01	-2.303D+01
T_z	-1.166D-01	-6.714D-02	-2.661D-02	1.511D-02	7.335D-02
Pressão	2.581D-04	1.357D-04	6.978D-05	-7.449D-05	-1.509D-04
T_C	-4.092D-01	-1.871D-01	-8.769D-02	7.641D-02	1.524D-01
Conversão	-1.754D-02	-8.844D-03	-4.408D-03	4.372D-03	8.901D-03
Querogênio	1.523D-03	7.663D-04	3.830D-04	-3.833D-04	-7.730D-04
Betume	9.998D-05	5.165D-05	2.427D-05	-2.129D-05	-5.067D-05
T_{w_r}	5.974D-01	2.715D-01	1.282D-01	1.140D-01	2.202D-01
T_{w_i}	2.878D-02	1.310D-02	6.194D-03	5.521D-03	1.067D-02
FDIF (%) :	16.788554	8.537394	4.015993	4.223641	8.381207
CONV. FINAL	9.675D-01	9.725D-01	9.748D-01	9.789D-01	9.808D-01
Relação(X_f)	.990	.995	.998	1.002	1.004
TRESID	2.504D+00	2.611D+00	2.667D+00	2.783D+00	2.843D+00
Relação(Tr)	.919	.958	.979	1.022	1.044

TRESID = 2.724D+00 — CBASE

É a velocidade do xisto que sofre as maiores diferenças entre um caso e outro. Toda vez que a carga de xisto a ser processada tiver um diâmetro médio menor, a velocidade das partículas em termos médios será maior; reduzindo o tempo de residência.

A variação em T_{w_r} é bem pequena, mas averigua-se que para as mesmas condições T_{w_r} será inferior quanto menor for d_p . Isto ocorre porque há alterações nos balanços energéticos. Ao diminuir o diâmetro médio da carga, a velocidade do xisto aumenta porque o arraste é maior devido a razão entre a área e a massa da partícula

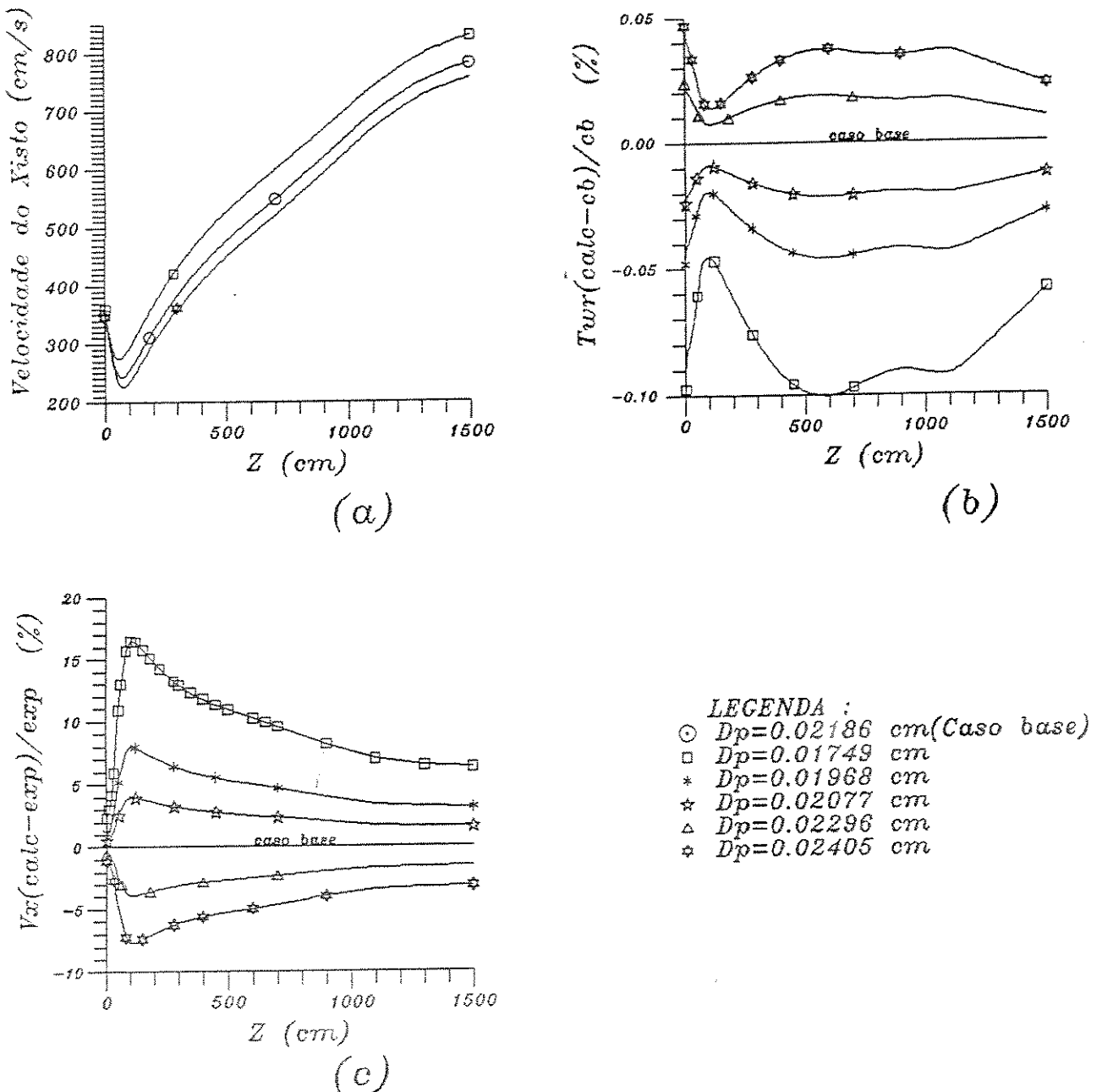


Figura 5.29: Influência da variação do diâmetro médio das partículas nos perfis (a) - da velocidade da partícula; (b) - ΔT_{wr} ; e (c) - Δv_x

ser superior. Pelo mesmo motivo, fica mais fácil aumentar T_x ; e daí T_g é menor porque se retira uma quantidade maior de calor do gás de arraste. Este raciocínio só vale para o início do reator onde T_x é menor que T_g . Quando T_x superar a T_g , que é o que ocorre na maior parte do reator, a T_x será inferior em média do que no caso de referência

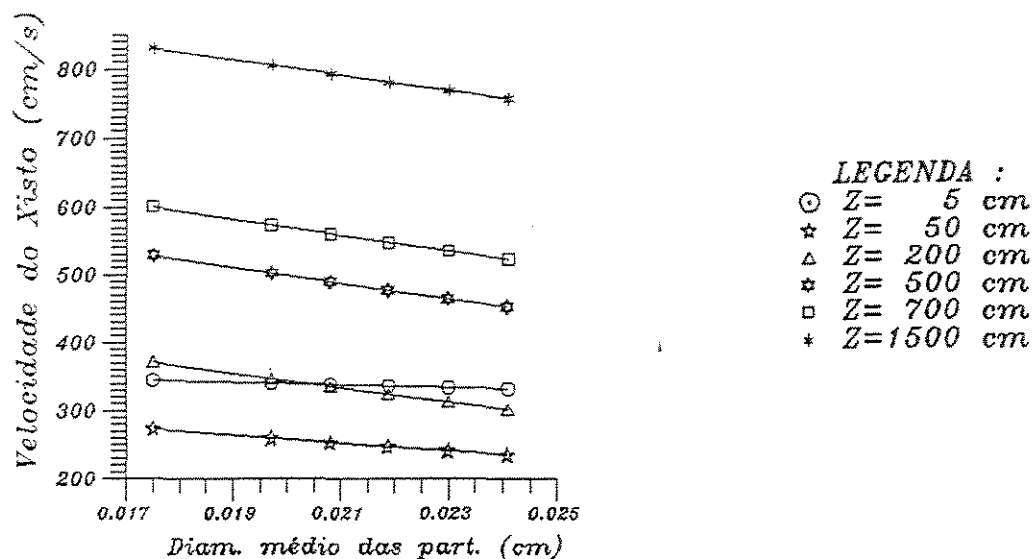


Figura 5.30: Variação da velocidade das partículas com o diâmetro médio

e T_g será maior. Generalizando, pode-se afirmar que um diâmetro médio menor irá provocar a aproximação das temperaturas do xisto e do gás, pois a interação entre eles é maior pelo fato de uma mesma massa de partículas possuir uma área externa maior para a troca térmica.

Continuando, se v_z aumenta, o tempo de residência das partículas diminui; daí a conversão ser menor. Há ainda a influência de T_z que também diminui em média, colaborando para a redução da conversão.

Com relação à validade das considerações feitas para a determinação do diâmetro médio das partículas, pode-se esperar pouca influência nos resultados, já que neste estudo, o modelo mostra-se pouco sensível ao valor utilizado para o diâmetro das partículas. Assim, um pequeno erro em d_p pode ser perfeitamente aceitável.

Velocidade inicial do gás de arraste (v_{g0})

Da mesma maneira como v_{z0} , v_{g0} é uma condição inicial que também é estimada pelo procedimento anteriormente descrito. Porém a sensibilidade do modelo a este parâmetro é bem menor como ilustrado na tabela 5.40 e gráfico 5.31.

Ao usar um valor para v_{g0} menor que o estimado pelas equações, em princípio v_z irá cair vertiginosamente, ficando menor do que era no caso base. A relação percentual entre os valores de v_z do caso base e do caso em questão apresenta um ponto de mínimo, e depois nota-se que v_z tende a se aproximar do valor calculado para o

caso base.

Tabela 5.40: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —

Parâmetro analisado : **Velocidade inicial do gás de arraste**

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_G	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	80.0	600.0	1300.0	650.0	900.0	1100.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
VG09	.99654	726.73	578.91	525.49	533.76	.92363	713.28	.72952	.03116	.01936	648.94	66.07
Relação	.9999	.9915	1.0019	.9897	1.0019	1.0000	1.0004	1.0152	.9825	.9619	1.0009	1.0005
Zmaior	80.0	600.0	1300.0	650.0	900.0	1100.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
VG095	.99658	732.36	577.91	530.43	532.86	.92366	712.99	.71963	.03166	.02006	648.42	66.04
Relação	1.0000	.9991	1.0002	.9990	1.0002	1.0000	1.0000	1.0015	.9983	.9964	1.0001	1.0000
Zmaior	70.0	600.0	1300.0	650.0	900.0	1100.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
VG105	.99656	733.60	577.68	531.52	532.65	.92367	712.93	.71736	.03177	.02022	648.30	66.03
Relação	1.0000	1.0008	.9998	1.0010	.9998	1.0000	.9999	.9983	1.0018	1.0043	.9999	.9999
Zmaior	80.0	600.0	1300.0	650.0	900.0	1100.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
VG110	.99663	739.23	576.67	536.46	531.75	.92369	712.64	.70739	.03227	.02091	647.79	66.00
Relação	1.0000	1.0085	.9980	1.0103	.9981	1.0000	.9995	.9844	1.0175	1.0389	.9991	.9995

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :				
Variável	VG09	VG095	VG105	VG110
ϵ	-1.676D-05	-1.769D-06	1.390D-06	1.621D-05
v_g	-5.213D+00	-5.289D-01	5.062D-01	5.199D+00
T_g	7.885D-01	7.342D-02	-8.923D-02	-7.994D-01
v_x	-4.494D+00	-4.569D-01	4.342D-01	4.480D+00
T_x	7.273D-01	6.677D-02	-8.488D-02	-7.406D-01
Pressão	-1.980D-05	-2.370D-06	1.160D-06	1.819D-05
T_G	1.707D-01	1.593D-02	-1.949D-02	-1.728D-01
Conversão	4.340D-03	4.145D-04	-4.808D-04	-4.395D-03
Querogênio	-2.568D-04	-2.502D-05	2.699D-05	2.584D-04
Betume	-1.445D-04	-1.319D-05	1.730D-05	1.482D-04
T_{w_r}	1.506D-01	1.440D-02	1.622D-02	1.514D-01
T_{w_i}	7.198D-03	6.882D-04	7.754D-04	7.237D-03
FDIF (%) :	3.338429	.299852	.296963	3.118664
CONV. FINAL	9.788D-01	9.771D-01	9.768D-01	9.750D-01
Relação(X_f)	1.002	1.0	1.0	.998
TRESID	2.747D+00	2.726D+00	2.722D+00	2.702D+00
Relação(Tr)	1.008	1.001	.999	.992

TRESID = 2.724D+00 — CBASE

Devido à diminuição da v_x significando um aumento no tempo de residência, a conversão aumenta, porém de forma pouco significativa.

Absortividade da parede externa do reator (α_R)

Como este dado é determinado experimentalmente, assim como a ϵ_{Ri} , as mesmas considerações feitas para a emissividade do reator podem ser repetidas. A conversão cai sensivelmente quando diminui α_R , porque desta forma diminui a quantidade de energia transferida do gás de aquecimento para o reator. A sensibilidade deste parâmetro também é importante como é mostrado na tabela 5.41.

Emissividade da parede externa do reator (ϵ_R)

Valem as mesmas considerações iniciais do parâmetro anterior (α_R) sendo

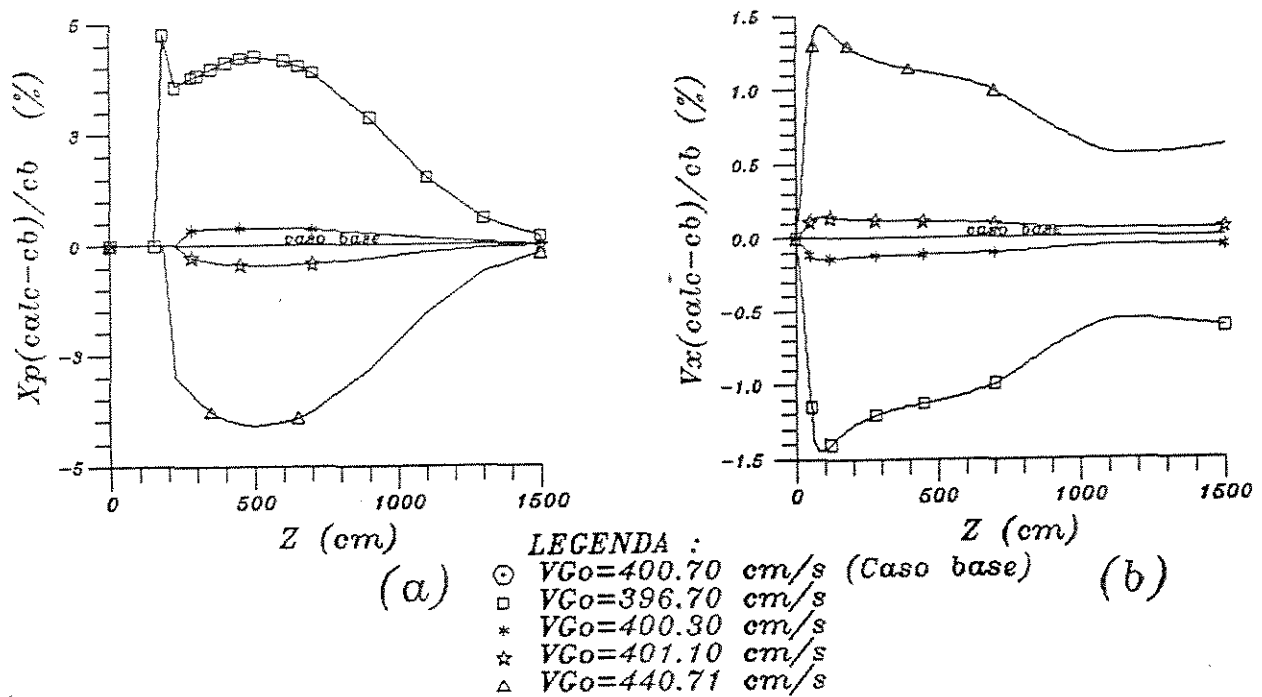


Figura 5.31: Influência da variação da estimativa da velocidade inicial do gás de arraste nos perfis (a) - da conversão e (b) - Δv_z

entretanto o efeito inverso sobre a conversão. As variações observadas na tabela 5.42 indicam que este parâmetro também influi no resultado final da simulação, principalmente nos casos onde se têm baixas conversões.

Tabela 5.41: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : Absortividade da parede externa do reator

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_G	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_1}	T_{w_2}
Zmaior	190.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	589.434
ALPR08	.99727	856.36	551.53	645.85	505.18	.92250	809.64	.52613	.03793	.03498	963.39	78.75
Relação	.9999	.9485	.9545	.9324	.9482	.9999	1.0288	.7322	1.1960	1.7378	.9592	1.0316
Zmaior	180.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	650.0	1100.0	1.057	550.0
ALPR09	.99726	880.66	565.32	670.28	519.58	.92257	797.80	.63015	.04019	.02703	984.73	78.28
Relação	1.0000	.9754	.9784	.9677	.9752	.9999	1.0138	.8769	1.0788	1.3425	.9805	1.0151
Zmaior	180.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	650.0	1100.0	1.057	539.434
ALPR095	.99729	892.00	571.70	681.70	526.29	.92260	792.27	.67636	.03869	.02343	994.71	77.91
Relação	1.0000	.9880	.9894	.9842	.9878	1.0000	1.0068	.9413	1.0386	1.1639	.9904	1.0074
Zmaior	180.0	100.0	1100.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	900.0	650.0	1100.0	1.057	539.434
ALPR105	.99734	913.14	557.52	703.07	539.01	.92265	781.80	.41625	.03588	.01716	1013.67	76.77
Relação	1.0000	1.0114	1.0107	1.0151	1.0117	1.0000	.9935	1.1059	.9631	.8522	1.0093	.9928
Zmaior	180.0	100.0	1100.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	900.0	650.0	1100.0	1.057	539.434
ALPR110	.99736	922.96	563.31	713.05	545.08	.92267	776.84	.45644	.03455	.01450	1022.69	76.23
Relação	1.0000	1.0223	1.0212	1.0294	1.0231	1.0001	.9872	1.2127	.9275	.7201	1.0183	.9857

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :					
Variável	ALPR08	ALPR09	ALPR095	ALPR105	ALPR110
ϵ	-7.969D-05	-3.696D-05	-1.787D-05	1.681D-05	3.264D-05
v_g	-2.972D+01	-1.413D+01	-6.917D+00	6.630D+00	1.304D+01
T_g	-2.157D+01	-1.028D+01	-5.045D+00	4.855D+00	9.567D+00
v_x	-2.878D+01	-1.368D+01	-6.697D+00	6.418D+00	1.262D+01
T_x	-2.254D+01	-1.071D+01	-5.249D+00	5.042D+00	9.928D+00
Pressão	-6.179D-05	-2.840D-05	-1.353D-05	1.202D-05	2.422D-05
T_G	1.874D+01	8.973D+00	4.407D+00	-4.258D+00	-8.371D+00
Conversão	-7.292D-02	-3.391D-02	-1.641D-02	1.538D-02	2.991D-02
Querogênio	3.040D-03	1.418D-03	6.886D-04	-6.494D-04	-1.267D-03
Betume	3.705D-03	1.719D-03	8.297D-04	-7.727D-04	-1.500D-03
T_{w_1}	3.061D+01	1.450D+01	7.090D+00	6.788D+00	1.330D+01
T_{w_2}	2.097D+00	1.021D+00	5.056D-01	4.959D-01	9.822D-01
FDIF (%) :	50.801201	26.640846	14.037325	14.919100	30.593892
CONV. FINAL	9.293D-01	9.604D-01	9.700D-01	9.821D-01	9.859D-01
Relação(X_f)	.951	.983	.993	1.005	1.009
TRESID	2.874D+00	2.794D+00	2.758D+00	2.693D+00	2.663D+00
Relação(Tr)	1.055	1.025	1.012	.988	.978

TRESID = 2.724D+00 — CBASE

Tabela 5.42: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : Emissividade da parede externa do reator

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	180.0	100.0	1100.0	1100.0	900.0	1300.0	1100.0	900.0	650.0	900.0	1.057	742.265
EPSR08	.99738	935.57	571.13	725.66	552.82	.92270	728.95	.50671	.03306	.03388	1033.55	71.77
Relação	1.0001	1.0363	1.0354	1.0477	1.0376	1.0001	.9778	1.3463	.8873	.7884	1.0291	.9754
Zmaior	180.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	1100.0	900.0	650.0	1100.0	1.057	857.735
EPSR09	.99735	918.96	587.26	708.88	542.46	.92266	737.51	.43803	.03518	.01560	1018.46	71.04
Relação	1.0000	1.0179	1.0164	1.0234	1.0182	1.0000	.9892	1.1638	.9442	.7748	1.0141	.9879
Zmaior	160.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	1100.0	900.0	650.0	1100.0	1.057	857.735
EPSR095	.99720	910.76	582.43	700.62	537.50	.92264	741.63	.40601	.03624	.01785	1011.21	71.49
Relação	1.0000	1.0088	1.0080	1.0115	1.0089	1.0000	.9948	1.0787	.9727	.8866	1.0068	.9942
Zmaior	170.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	1100.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	857.735
EPSR105	.99724	894.90	573.18	684.68	528.06	.92260	749.39	.68831	.03267	.02251	997.55	72.32
Relação	1.0000	.9912	.9920	.9885	.9912	1.0000	1.0052	.9579	1.0301	1.1183	.9932	1.0058
Zmaior	180.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	1100.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	857.735
EPSR110	.99728	887.41	568.83	677.16	523.67	.92259	753.06	.65860	.03364	.02483	991.10	72.72
Relação	1.0000	.9829	.9845	.9776	.9829	1.0000	1.0101	.9165	1.0606	1.2335	.9868	1.0112
Zmaior	180.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	1100.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	857.735
EPSR120	.99725	872.86	560.37	662.59	515.18	.92255	760.17	.59881	.03547	.02948	978.61	73.47
Relação	.9999	.9668	.9698	.9566	.9670	.9999	1.0196	.8333	1.1185	1.4643	.9744	1.0217

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	EPSR08	EPSR09	EPSR095	EPSR105	EPSR110	EPSR120
ϵ	5.182D-05	2.553D-05	1.245D-05	-1.277D-05	-2.502D-05	-4.889D-05
v_g	2.114D+01	1.027D+01	5.016D+00	-4.998D+00	-9.713D+00	-1.888D+01
T_g	1.556D+01	7.523D+00	3.667D+00	-3.647D+00	-7.071D+00	-1.371D+01
v_x	2.038D+01	9.904D+00	4.840D+00	-4.823D+00	-9.376D+00	-1.823D+01
T_x	1.616D+01	7.821D+00	3.814D+00	-3.800D+00	-7.373D+00	-1.431D+01
Pressão	3.650D-05	1.781D-05	8.184D-06	-9.346D-06	-1.864D-05	-3.591D-05
T_C	-1.369D+01	-6.606D+00	-3.205D+00	3.175D+00	6.180D+00	1.199D+01
Conversão	4.730D-02	2.354D-02	1.163D-02	-1.174D-02	-2.308D-02	-4.557D-02
Querôgênio	-1.964D-03	-9.930D-04	-4.890D-04	4.471D-04	9.234D-04	1.821D-03
Betume	-2.411D-03	-1.184D-03	-5.868D-04	6.393D-04	1.211D-03	2.394D-03
T_{w_r}	2.087D+01	1.017D+01	4.941D+00	4.930D+00	9.619D+00	1.877D+01
T_{w_i}	1.560D+00	7.429D-01	3.593D-01	3.524D-01	6.823D-01	1.311D+00
FDIF (%) :	49.943677	23.677731	11.079810	8.541939	18.071891	32.912658
CONV. FINAL	9.897D-01	9.846D-01	9.811D-01	9.719D-01	9.661D-01	9.514D-01
Relação(X_f)	1.013	1.008	1.004	.995	.989	.974
TRESID	2.627D+00	2.676D+00	2.700D+00	2.748D+00	2.771D+00	2.818D+00
Relação(Tr)	.964	.982	.991	1.009	1.017	1.034

TRESID = 2.724D+00 — CBASE

Absortividade da parede interna do reator (α_{Ri})

O efeito de α_{Ri} é o contrário de ϵ_{Ri} e sua determinação experimental [46] é de grande valia, já que pela análise da Tabela de Diferenças 5.43, o parâmetro pode ser considerado como importante para a qualidade dos resultados finais.

Tabela 5.43: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : **Absortividade da parede interna do reator**

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_z	T_z	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	900.0	100.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	900.0	650.0	1100.0	1500.0	1500.0
ARI08	.99869	922.77	590.29	712.38	598.21	.92265	701.29	.44895	.03507	.01449	633.60	65.07
Relação	1.0000	1.0221	1.0216	1.0285	1.0214	1.0000	.9836	1.1928	.9412	.7198	.9772	.9853
Zmaior	900.0	100.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1257.735	1500.0
ARI09	.99867	912.63	583.89	702.35	591.75	.92264	707.33	.75478	.03064	.01727	655.76	65.57
Relação	1.0000	1.0108	1.0105	1.0140	1.0104	1.0000	.9921	1.0504	.9660	.8577	.9893	.9929
Zmaior	900.0	100.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1257.735	1500.0
ARI095	.99866	907.67	580.80	697.43	588.66	.92263	710.19	.73665	.03121	.01870	659.36	65.81
Relação	1.0000	1.0054	1.0052	1.0069	1.0051	1.0000	.9961	1.0251	.9840	.9288	.9948	.9965
Zmaior	1100.0	100.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1057.735	1500.0
ARI105	.99879	898.06	574.86	687.92	562.58	.92261	715.64	.70025	.03222	.02158	682.11	66.26
Relação	1.0000	.9947	.9949	.9932	.9948	1.0000	1.0038	.9745	1.0159	1.0721	1.0049	1.0033
Zmaior	1100.0	100.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1057.735	1500.0
ARI110	.99878	893.47	572.03	683.37	559.75	.92261	718.25	.68224	.03271	.02301	685.35	66.47
Relação	1.0000	.9896	.9900	.9866	.9898	1.0000	1.0074	.9494	1.0313	1.1429	1.0097	1.0066
Zmaior	1100.0	100.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1057.735	1500.0
ARI120	.99876	884.60	566.60	674.59	554.26	.92259	723.23	.64630	.03372	.02583	691.51	66.88
Relação	1.0000	.9798	.9806	.9739	.9801	1.0000	1.0144	.8994	1.0633	1.2833	1.0188	1.0127

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	ARI08	ARI09	ARI095	ARI105	ARI110	ARI120
ϵ	2.708D-05	1.339D-05	6.608D-06	-6.931D-06	-1.318D-05	-2.607D-05
v_g	1.186D+01	5.806D+00	2.865D+00	-2.830D+00	-5.558D+00	-1.085D+01
T_g	8.514D+00	4.153D+00	2.049D+00	-2.018D+00	-3.956D+00	-7.696D+00
v_z	1.134D+01	5.559D+00	2.743D+00	-2.713D+00	-5.328D+00	-1.041D+01
T_z	9.624D+00	4.690D+00	2.313D+00	-2.276D+00	-4.462D+00	-8.680D+00
Pressão	1.334D-05	6.687D-06	3.061D-06	-4.557D-06	-7.607D-06	-1.420D-05
T_C	-8.203D+00	-3.979D+00	-1.961D+00	1.902D+00	3.758D+00	7.325D+00
Conversão	2.822D-02	1.407D-02	6.959D-03	-6.989D-03	-1.381D-02	-2.737D-02
Querogénico	-1.072D-03	-5.316D-04	-2.405D-04	2.408D-04	4.750D-04	9.861D-04
Betume	-1.538D-03	-7.700D-04	-4.033D-04	4.058D-04	8.024D-04	1.546D-03
T_{w_r}	1.110D+01	5.381D+00	2.661D+00	2.589D+00	5.114D+00	9.974D+00
T_{w_i}	5.291D-01	2.567D-01	1.274D-01	1.243D-01	2.460D-01	4.810D-01
FDIF (%) :	23.571984	11.140645	4.300994	4.188677	8.315316	17.820619
CONV. FINAL	9.868D-01	9.825D-01	9.799D-01	9.737D-01	9.701D-01	9.616D-01
Relação(X_f)	1.010	1.006	1.003	.997	.993	.984
TRESID	2.669D+00	2.697D+00	2.711D+00	2.738D+00	2.751D+00	2.777D+00
Relação(Tr)	.980	.990	.995	1.005	1.010	1.019

TRESID = 2.724D+00 — CBASE

Absortividade do xisto (α_X)

Também é determinado experimentalmente. Porém, devido ao fato das amostras de xisto apresentarem diferenças nas propriedades, espera-se que possa haver discrepâncias neste valor. Isto leva a temer resultados discordantes, de acordo com

as variações que podem ocorrer. Assim pela análise da tabela 5.44 conclui-se que um desvio na conversão calculada pode ocorrer com aproximadamente a mesma ordem de grandeza que a variação de α_X se o reator der baixas conversões (em torno de 70%). Já para reatores maiores tais diferenças são bem menores. As diferenças em T_{w_r} causadas pela variação de α_X são também pequenas. Sugere-se verificar se existem grandes variações em α_X e ϵ_X para diferentes amostras de xisto; inclusive correlacionando com a concentração de matéria orgânica presente.

Tabela 5.44: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : **Absortividade do xisto**

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_{Cj}	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	1100.0	100.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	857.735	1300.0
ALPX08	.99875	875.72	561.25	665.82	548.69	.92259	728.13	.60980	.03452	.02872	719.75	68.60
Relação	1.0000	.9700	.9714	.9613	.9702	1.0000	1.0213	.8486	1.0885	1.4268	1.0274	1.0177
Zmaior	1100.0	100.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	857.735	1342.265
ALPX09	.99877	890.17	570.02	680.12	557.67	.92261	720.12	.66928	.03298	.02404	709.63	67.66
Relação	1.0000	.9860	.9865	.9819	.9861	1.0000	1.0100	.9314	1.0398	1.1944	1.0130	1.0084
Zmaior	1100.0	100.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	857.735	1342.265
ALPX095	.99879	896.66	574.00	686.54	561.70	.92262	716.44	.69492	.03232	.02201	704.95	67.37
Relação	1.0000	.9932	.9934	.9912	.9932	1.0000	1.0049	.9671	1.0192	1.0934	1.0063	1.0041
Zmaior	1100.0	100.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	900.0	1457.735
ALPX105	.99881	908.62	581.39	698.36	569.13	.92263	709.65	.74001	.03115	.01843	691.11	66.04
Relação	1.0000	1.0064	1.0062	1.0082	1.0064	1.0000	.9954	1.0298	.9822	.9153	.9939	.9960
Zmaior	1100.0	100.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	900.0	1457.735
ALPX110	.99882	914.07	584.79	703.75	572.51	.92264	706.50	.75965	.03057	.01687	687.08	65.79
Relação	1.0000	1.0124	1.0121	1.0160	1.0123	1.0000	.9909	1.0572	.9639	.8381	.9881	.9922

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :					
Variável	ALPX08	ALPX09	ALPX095	ALPX105	ALPX110
ϵ	-3.686D-05	-1.689D-05	-8.121D-06	7.403D-06	1.426D-05
v_g	-1.573D+01	-7.305D+00	-3.550D+00	3.315D+00	6.440D+00
T_g	-1.104D+01	-5.152D+00	-2.509D+00	2.352D+00	4.571D+00
v_x	-1.510D+01	-7.002D+00	-3.401D+00	3.172D+00	6.160D+00
T_x	-1.248D+01	-5.828D+00	-2.838D+00	2.664D+00	5.180D+00
Pressão	-1.764D-05	-7.910D-06	-3.763D-06	2.926D-06	5.479D-06
T_{Cj}	1.059D+01	4.957D+00	2.400D+00	-2.267D+00	-4.411D+00
Conversão	-4.086D-02	-1.855D-02	-8.935D-03	8.180D-03	1.582D-02
Querogênio	1.380D-03	6.060D-04	2.911D-04	-2.669D-04	-5.612D-04
Betume	2.399D-03	1.110D-03	5.355D-04	-4.898D-04	-9.021D-04
T_{w_r}	1.326D+01	6.159D+00	2.974D+00	2.787D+00	5.406D+00
T_{w_i}	6.397D-01	2.959D-01	1.426D-01	1.332D-01	2.579D-01
FDIF (%) :	22.659006	9.872348	4.740962	4.496503	11.058127
CONV. FINAL	9.515D-01	9.673D-01	9.727D-01	9.804D-01	9.831D-01
Relação(X_f)	.974	.990	.996	1.003	1.006
TRESID	2.801D+00	2.759D+00	2.741D+00	2.709D+00	2.694D+00
Relação(Tr)	1.028	1.013	1.006	.994	.989

TRESID = 2.724D+00 — CBASE

Emissividade do refratário (ϵ_T)

A emissividade do refratário é um dado estimado. Observa-se pela tabela 5.45 que as influências sobre as temperaturas de parede são pequenas. Já na conversão, ocorre o mesmo fato de encontrar maiores diferenças para X próximo a 70%. Com um valor menor de ϵ_T , menos calor é transferido para o reator, diminuindo T_z e a conversão; a velocidade do gás e xisto também diminuem, mas como em outros casos, quando a temperatura e a velocidade variam na mesma proporção, o efeito da temperatura sobre a reação irá dominar sobre o efeito da velocidade no tempo de residência porque a taxa de reação obedece uma relação exponencial com a temperatura. Com isto pode-se dizer que a determinação experimental de ϵ_T e α_T também proporcionaria maior confiança nos resultados.

Tabela 5.45: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : **Emissividade da parede interna do refratário**

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{wT}	T_{wI}
Zmaior	1100.0	100.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	53.943
EPST08	.99877	887.41	568.39	677.30	556.50	.92259	791.41	.65985	.03344	.02476	991.36	96.52
Relação	1.0000	.9829	.9837	.9778	.9842	1.0000	1.0057	.9183	1.0545	1.2299	.9871	1.0425
Zmaior	900.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	50.0
EPST09	.99864	895.59	573.37	683.43	526.55	.92261	789.03	.69154	.03249	.02227	998.27	94.67
Relação	1.0000	.9920	.9923	.9896	.9921	1.0000	1.0027	.9624	1.0246	1.1062	.9939	1.0200
Zmaior	900.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	48.943
EPST095	.99865	899.28	575.63	689.11	530.69	.92262	787.05	.70541	.03210	.02117	1001.41	93.78
Relação	1.0000	.9961	.9962	.9940	.9961	1.0000	1.0013	.9817	1.0120	1.0517	.9971	1.0097
Zmaior	900.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	48.943
EPST105	.99866	906.11	579.82	695.91	534.68	.92263	785.98	.73046	.03136	.01919	1007.14	92.02
Relação	1.0000	1.0036	1.0035	1.0047	1.0036	1.0000	.9988	1.0165	.9889	.9533	1.0028	.9908
Zmaior	900.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	650.0	1100.0	1.057	48.943
EPST110	.99866	909.25	581.74	699.03	536.51	.92263	785.07	.74172	.03651	.01831	1009.77	91.21
Relação	1.0000	1.0071	1.0068	1.0092	1.0070	1.0000	.9976	1.0322	.9801	.9094	1.0054	.9820
Zmaior	900.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	900.0	650.0	1100.0	1.057	48.943
EPST120	.99867	914.89	585.23	704.64	539.64	.92265	783.38	.41919	.03591	.01676	1014.63	89.69
Relação	1.0000	1.0133	1.0129	1.0173	1.0133	1.0000	.9953	1.1137	.9639	.8326	1.0102	.9656

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	EPST08	EPST09	EPST095	EPST105	EPST110	EPST120
ϵ	-2.317D-05	-1.084D-05	-5.586D-06	4.660D-06	9.142D-06	1.734D-05
v_g	-9.403D+00	-4.415D+00	-2.164D+00	1.998D+00	3.909D+00	7.367D+00
T_g	-6.811D+00	-3.267D+00	-1.572D+00	1.456D+00	2.843D+00	5.376D+00
v_x	-9.029D+00	-4.237D+00	-2.077D+00	1.916D+00	3.745D+00	7.063D+00
T_x	-7.120D+00	-3.350D+00	-1.644D+00	1.519D+00	2.965D+00	5.695D+00
Pressão	-1.463D-05	-6.898D-06	-4.037D-06	2.406D-06	5.150D-06	1.009D-05
T_C	3.664D+00	1.714D+00	8.276D-01	-7.878D-01	-1.532D+00	-2.915D+00
Conversão	-2.239D-02	-1.037D-02	-5.072D-03	4.615D-03	9.068D-03	1.667D-02
Queroseno	8.398D-04	3.680D-04	1.797D-04	-1.644D-04	-3.673D-04	-6.484D-04
Betume	1.231D-03	5.915D-04	2.890D-04	-2.627D-04	-4.713D-04	-9.117D-04
T_{wT}	8.544D+00	3.986D+00	1.931D+00	1.814D+00	3.525D+00	6.676D+00
T_{wI}	3.620D+00	1.706D+00	8.297D-01	7.877D-01	1.537D+00	2.934D+00
FDIF (%) :	22.925229	10.031371	4.683118	4.556500	11.338790	19.489714
CONV. FINAL	9.657D-01	9.722D-01	9.748D-01	9.788D-01	9.805D-01	9.831D-01
Relação(X_f)	.988	.995	.996	1.002	1.004	1.006
TRESID	2.770D+00	2.745D+00	2.735D+00	2.715D+00	2.706D+00	2.690D+00
Relação(T_r)	1.017	1.008	1.004	.997	.993	.987

TRESID = 2.724D+00 — CBASE

Absortividade do refratário (α_T)

A maioria das observações feitas para ϵ_T podem ser repetidas aqui, mas lembrando que o efeito provocado é o inverso como pode ser notado pela tabela 5.46.

Tabela 5.46: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : Absortividade da parede interna do refratário

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_z	T_z	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	900.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	900.0	650.0	1100.0	1.057	53.943
ALPT08	.99868	916.25	586.13	705.99	540.63	.92265	782.98	.42397	.03578	.01640	1015.55	89.05
Relação	1.0000	1.0149	1.0144	1.0193	1.0148	1.0000	.9950	1.1265	.9603	.8145	1.0111	.9618
Zmaior	900.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	650.0	1100.0	1.057	53.943
ALPT09	.99866	909.44	581.88	699.21	536.61	.92264	785.01	.74236	.03650	.01826	1009.82	90.88
Relação	1.0000	1.0073	1.0071	1.0095	1.0072	1.0000	.9975	1.0331	.9797	.9068	1.0054	.9815
Zmaior	900.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	53.943
ALPT095	.99866	906.10	579.82	695.89	534.67	.92263	785.99	.73039	.03137	.01920	1007.05	91.75
Relação	1.0000	1.0036	1.0035	1.0047	1.0036	1.0000	.9988	1.0164	.9891	.9536	1.0027	.9909
Zmaior	900.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	53.943
ALPT105	.99865	899.60	575.81	689.43	530.88	.92262	787.87	.70664	.03206	.02108	1001.71	93.40
Relação	1.0000	.9964	.9965	.9954	.9965	1.0000	1.0012	.9834	1.0108	1.0469	.9974	1.0088
Zmaior	900.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	53.943
ALPT110	.99864	896.48	573.88	686.33	561.84	.92261	788.78	.69498	.03239	.02200	999.13	94.19
Relação	1.0000	.9930	.9932	.9909	.9935	1.0000	1.0023	.9672	1.0213	1.0927	.9948	1.0174
Zmaior	1100.0	100.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	1.057	53.943
ALPT120	.99877	890.42	570.16	680.32	558.33	.92260	790.54	.67174	.03310	.02382	994.13	95.71
Relação	1.0000	.9863	.9868	.9822	.9873	1.0000	1.0046	.9348	1.0436	1.1835	.9898	1.0337

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	ALPT08	ALPT09	ALPT095	ALPT105	ALPT110	ALPT120
ϵ	1.917D-05	9.356D-06	4.699D-06	-4.929D-06	-9.358D-06	-1.848D-05
v_g	8.199D+00	4.021D+00	1.985D+00	-1.966D+00	-3.862D+00	-7.546D+00
T_g	5.987D+00	2.925D+00	1.446D+00	-1.429D+00	-2.805D+00	-5.468D+00
v_z	7.853D+00	3.854D+00	1.903D+00	-1.885D+00	-3.703D+00	-7.238D+00
T_z	6.242D+00	3.052D+00	1.510D+00	-1.494D+00	-2.931D+00	-5.717D+00
Pressão	1.106D-05	5.289D-06	2.472D-06	-3.416D-06	-5.787D-06	-1.171D-05
T_C	-3.246D+00	-1.582D+00	-7.812D-01	7.597D-01	1.507D+00	2.951D+00
Conversão	1.869D-02	9.308D-03	4.583D-03	-4.593D-03	-9.049D-03	-1.789D-02
Querogênio	-7.124D-04	-3.745D-04	-1.623D-04	1.620D-04	3.190D-04	6.763D-04
Retume	-1.017D-03	-4.865D-04	-2.614D-04	2.628D-04	5.179D-04	9.782D-04
T_{w_r}	7.391D+00	3.613D+00	1.787D+00	1.752D+00	3.466D+00	6.795D+00
T_{w_i}	3.252D+00	1.575D+00	7.784D-01	7.527D-01	1.484D+00	2.888D+00
FDIF (%) :	21.583825	11.527039	4.497349	4.221105	8.750533	18.755026
CONV. FINAL	9.837D-01	9.806D-01	9.788D-01	9.750D-01	9.728D-01	9.682D-01
Relação(X_f)	1.007	1.004	1.002	.998	.996	.991
TRESID	2.686D+00	2.705D+00	2.715D+00	2.734D+00	2.743D+00	2.761D+00
Relação(Tr)	.986	.993	.997	1.003	1.007	1.013

TRESID = 2.724D+00 — CBASE

Umidade inicial do xisto (Φ_0)

O xisto pode conter umidade ao entrar no reator, e como se percebe pelas tabelas 5.47, uma quantidade pequena de umidade pode comprometer os resultados da reação. Ou seja, a conversão decresce vertiginosamente aumentando-se a umidade inicial. Isto porque o calor consumido na secagem do xisto deixará de ser usado para a reação. Nota-se ainda que pelo fato desta secagem ocorrer no início do reator, onde a corrente gasosa de aquecimento ainda está numa temperatura alta, a quantidade de calor retirada destes gases é maior, fazendo com que o perfil de T_C seja inferior quando começa a ocorrer a reação.

Tabela 5.47: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Variável analisada : **Umidade inicial do xisto**

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ε	v_g	T_g	v_z	T_z	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	85.0	700.0	1300.0	700.0	900.0	1300.0	1500.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
UMI3	.99736	906.99	547.07	670.19	503.00	.92311	676.76	.39870	.04627	.04081	632.83	65.11
Relação	1.0008	1.1845	.9468	1.2230	.9441	1.0005	.9848	.5546	1.4596	2.0294	.9760	.9859
Diferem	.75D-3	.14D3	-.31D2	.12D3	-.30D2	.49D-3	-.10D2	-.32	.15D-1	.21D-1	-.16D2	-.93
Zmaior	90.0	700.0	1500.0	900.0	900.0	1500.0	1500.0	1100.0	900.0	1300.0	1500.0	1500.0
UMI6	.99785	1050.26	537.42	863.16	474.60	.92228	666.86	.17256	.04122	.04211	617.86	64.23
Relação	1.0012	1.3716	.9021	1.3948	.8908	1.0007	.9704	.2401	2.8021	7.0794	.9530	.9726
Diferem	.12D-2	.28D3	-.58D2	.24D3	-.58D2	.62D-3	-.20D2	-.55	.27D-1	.36D-1	-.31D2	-.18D1

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :		
Variável	UMI3	UMI6
ε	4.026D-04	6.515D-04
v_g	7.765D+01	1.464D+02
T_g	2.169D+01	3.976D+01
v_z	5.478D+01	1.039D+02
T_z	1.850D+01	3.471D+01
Pressão	8.909D-05	1.212D-04
T_C	1.024D+00	1.893D+00
Conversão	1.524D-02	2.752D-02
Querogênio	2.185D-03	3.859D-03
Betume	2.268D-03	3.818D-03
T_{w_r}	2.520D+00	4.308D+00
T_{w_i}	1.184D-01	2.056D-01
FDIF (%) :	99.358016	179.305697
CONV. FINAL	0.8609871	0.5960233
Relação(X_f)	1.0882826	0.7533699
variação em Φ (%)	-32.1267	+35.7466
Conversão final no caso base ($\Phi = 4.42\%$) = 0.7911429		

Desta forma, e ainda considerando que o calor latente de vaporização da água representa uma carga térmica maior do que o calor sensível para aumentar T_z ou o calor de reação; a extensão requerida do reator, para que se voltasse a ter a mesma conversão do que com o xisto seco, é muito maior do que o comprimento utilizado

para a secagem.

Portanto, é importante que a secagem do xisto seja efetuada antes de entrar no reator. Com a execução desta secagem num outro equipamento, pode-se usar correntes gasosas com um nível de temperatura menor, dando chance de racionalizar o uso de energia no processo. Assim os gases provenientes da combustão são utilizados mais eficientemente no reator proporcionando neste, um aumento na capacidade e na conversão final.

5.4.1.2 Grupo I-B - Parâmetros de menor influência

Os parâmetros introduzidos diretamente via arquivos de dados e classificados neste grupo são:

Diâmetro interno do refratário (D_3)

O modelo em questão é pouco sensível ao valor do diâmetro interno do tubo refratário. A variável mais sensível é a temperatura externa do isolamento, porque ao, por exemplo, diminuir o diâmetro interno do refratário, a espessura do concreto fica maior e a resistência à condução do calor também, o que implica em uma temperatura de parede menor. Também por este fato, o calor é transferido com maior intensidade para a região interior (reator), o que causará aumentos no perfil de T_w , e na conversão.

As características geométricas do refratário, devem ser otimizadas, levando-se em conta os custos envolvidos, e para fazer isto já existem vários métodos que calculam a espessura econômica do isolamento.

Temperatura ambiente (T_∞)

A temperatura ambiente não influi no processo, principalmente porque o sistema está bem isolado. Só T_w , sofre alteração com o valor de T_∞ e, portanto, este dado que é fornecido ao programa no início da execução é irrelevante.

Emissividade do xisto (ϵ_X)

As considerações aqui, são idênticas às da absortividade do xisto. A sua influência é clara, se for maior do que a emissividade do xisto considerada no caso base, o xisto terá um ganho líquido menor de energia radiante, com isto T_x fica inferior a do caso base e a conversão também. Já o perfil de T_w , fica levemente maior.

Emissividade do isolamento (ϵ_{is})

A sensibilidade a este parâmetro também é baixa, mas pelas simulações realizadas é possível identificar o que acontece ao diminuir a ϵ_{is} . Com a redução, a

quantidade de calor perdida para o ambiente é um pouco menor, o que modifica o balanço na parede externa, justificando o aumento de T_{w_i} . Nas outras variáveis, as diferenças ocorridas são pequenas. Como este parâmetro não foi determinado experimentalmente, o erro da estimativa adotada pode ser considerado insignificante no resultado da simulação.

Temperatura inicial do gás de arraste (T_{g0})

A influência de T_{g0} é idêntica à da temperatura do xisto, ou seja, ao diminuir T_{g0} , mais energia será consumida dos gases e T_x tenderá a ser menor. Apesar do tempo de residência aumentar, a conversão diminui com o efeito de T_x . Assim conclui-se que T_{x0} e T_{g0} são variáveis que não controlam a reação com a eficiência necessária, mas são parâmetros que podem ser otimizados para reduzir o gasto de energia.

Temperatura do xisto na entrada do reator (T_{x0})

A variação na temperatura inicial do xisto causa alterações na conversão, porém o efeito não é tão grande porque ao tratar uma carga com T_{x0} maior, T_g média será superior e assim v_g também. O efeito no tempo de residência, que diminui neste caso, prejudica a conversão. Mas como a temperatura média do xisto aumenta a taxa de reação também, o que faz melhorar a conversão. Outro fato que atrapalha o aumento de X , é o acréscimo de T_x e T_g fazendo com que menos calor seja transferido do gás de combustão.

Condutividade do reator (k_R)

O valor utilizado para a condutividade do reator é fixo e invariante com a temperatura. Houve a preocupação de verificar se esta aproximação é aceitável, procedendo para isto a simulação com seis casos diferentes do caso base. Verifica-se que a sensibilidade do modelo a este parâmetro é pequena. Ao usar um valor menor para a condutividade, a quantidade de calor que entra no meio de reação diminui. Por isto as temperaturas internas são menores e a conversão menor, se a condutividade for 20% menor do que a do caso base, a conversão pode variar no máximo (em $Z = 900$ cm) 2,9%.

Correção para o h_{AMB} (COR_{amb})

Assim como o ϵ_i , controla a perda de energia por radiação para o ambiente, o h_{AMB} corrigido por um fator (COR_{amb}) define uma parte do calor que é perdido por convecção, condução e radiação para outros corpos vizinhos. Ao invés de tentar equacionar um fenômeno como a condução pela estrutura metálica, ou a influência de

outros equipamentos próximos, admite-se que estes efeitos são proporcionais ao valor de h_{AMB} . Este coeficiente (COR_{amb}) é a relação entre o coeficiente global e o h_{AMB} . Variando, então este parâmetro verifica-se que ele influencia só no valor de T_w , não influenciando na validação das simulações.

5.4.2 Grupo II - Parâmetros introduzidos via constante K

Dentro deste grupo estão os parâmetros da tabela 5.29 que são distribuídos de acordo com o grau de influência na simulação dentro de dois sub-grupos:

5.4.2.1 Grupo II-A - Parâmetros de influência relevante

Os parâmetros classificados neste grupo são:

Energia de ativação da reação 2 (E_2)

Uma breve análise da tabela 5.48 e das figuras 5.32.a, 5.32.b e 5.32.c que apresentam os resultados obtidos na simulação de vários valores da energia de ativação revela a grande sensibilidade do modelo, principalmente na conversão, para este parâmetro. Sem dúvida, E_2 é a que mais influi no resultado final da conversão ainda mais se esta for menor que 95%. Na figura 5.32.a, de X versus Z , observa-se que quando diminui a energia de ativação a reação começa a ocorrer bem antes, porque para um dado valor de E_2 menor, corresponderá uma temperatura de início de reação menor. Este fato explica as grandes variações observadas na figura 5.32.c, de $\Delta X(\%)$ versus Z . Como por exemplo, em $Z= 500$ cm, a reação no caso base ainda está no início, enquanto que quando E_2 é considerado 20% menor, a conversão já está em 20%. Ao calcular a diferença percentual entre os dois casos, um número é dividido por outro próximo a zero, o que explica os valores mostrados no gráfico em questão.

Apesar de influir muito pouco em T_w , pode-se classificar este parâmetro como de alta sensibilidade, onde qualquer esforço no sentido de melhorar a precisão do seu valor significará uma confiança muito maior nos resultados obtidos.

Os principais efeitos sobre as diversas variáveis quando convencionam-se uma E_2 menor são: a conversão aumenta porque a temperatura de início da reação diminui e a constante da taxa aumenta exponencialmente com a diminuição da energia de ativação. Com a formação mais rápida de produtos que irão à fase gasosa, a vazão mássica do gás aumenta, assim como sua velocidade. A velocidade das partículas

Tabela 5.48: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —

Parâmetro analisado : Energia de ativação da reação 2

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ε	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w+}	T_{w-}
Zmaior	900.0	900.0	550.0	900.0	600.0	900.0	1100.0	900.0	1100.0	900.0	742.265	857.735
E2-08	.99887	957.17	416.85	737.93	445.99	.92512	730.15	.73745	.01188	.00123	700.85	70.79
Relação	1.0001	1.0561	.9863	1.0819	1.0111	.9999	.9986	3.4305	1.0831	.0246	.9973	.9987
Zmaior	900.0	100.0	700.0	1100.0	1300.0	900.0	1300.0	900.0	1300.0	900.0	900.0	1257.735
E2-09	.99884	1005.30	458.86	789.20	561.23	.92512	696.68	.62735	.00541	.01201	678.82	66.45
Relação	1.0001	1.0386	.9900	1.0555	.9941	.9999	.9990	2.9183	1.0917	.2391	.9983	.9991
Zmaior	1100.0	100.0	900.0	1100.0	900.0	1100.0	1300.0	1100.0	1300.0	1100.0	1342.265	1457.735
E2-095	.99892	992.28	498.86	773.95	513.41	.92406	697.03	.73700	.00517	.01322	638.40	64.96
Relação	1.0000	1.0252	.9947	1.0351	1.0047	1.0000	.9995	1.4796	1.0433	.3728	.9991	.9995
Zmaior	1300.0	300.0	900.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1057.735	1500.0
E2-105	.99893	995.84	503.99	778.04	540.67	.92311	697.61	.49133	.00486	.04219	662.58	64.74
Relação	1.0000	.9729	1.0049	.9627	.9954	1.0001	1.0003	.6474	.9798	2.4332	1.0006	1.0004
Zmaior	1300.0	300.0	1100.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1057.735	1100.0
E2-110	.99890	973.98	533.64	754.57	538.83	.92315	697.74	.25812	.00482	.06380	662.85	68.02
Relação	.9999	.9515	1.0079	.9336	.9920	1.0001	1.0005	.3401	.9728	3.6792	1.0010	1.0005
Zmaior	1300.0	300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1057.735	1142.265
E2-120	.99887	956.25	535.57	735.55	558.80	.92319	697.86	.05527	.00481	.08258	663.06	67.61
Relação	.9999	.9342	1.0116	.9101	.9898	1.0001	1.0007	.0728	.9689	4.7624	1.0014	1.0007

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	E2-08	E2-09	E2-095	E2-105	E2-110	E2-120
ε	4.211D-05	2.648D-05	1.454D-05	-1.486D-05	-2.603D-05	-3.522D-05
v_g	2.248D+01	1.521D+01	8.831D+00	-9.464D+00	-1.638D+01	-2.201D+01
T_g	1.189D-01	-2.080D-01	-1.976D-01	5.591D-01	1.307D+00	2.215D+00
v_x	2.533D+01	1.706D+01	9.821D+00	-1.032D+01	-1.781D+01	-2.388D+01
T_x	3.962D-01	1.041D-01	1.254D-01	-6.800D-01	-1.520D+00	-2.332D+00
Pressão	-1.814D-05	-2.002D-05	-1.410D-05	1.848D-05	3.249D-05	4.473D-05
T_C	-5.476D-01	-3.048D-01	-1.410D-01	8.624D-02	1.322D-01	1.703D-01
Conversão	2.369D-01	1.603D-01	9.274D-02	-1.016D-01	-1.791D-01	-2.451D-01
Querogênio	3.121D-04	1.286D-04	4.890D-05	-1.916D-05	-2.456D-05	-2.756D-05
Betume	-2.223D-02	-1.495D-02	-8.627D-03	9.418D-03	1.660D-02	2.270D-02
T_{w+}	2.241D-01	9.951D-02	4.555D-02	2.679D-02	3.891D-02	4.952D-02
T_{w-}	1.092D-02	4.975D-03	2.270D-03	1.344D-03	1.981D-03	2.529D-03
FDIF (%) :	2650.07683	264.563098	66.540725	24.578813	34.128037	39.142119
CONV. FINAL	9.718D-01	9.695D-01	9.625D-01	7.003D-01	4.209D-01	1.014D-01
Relação(X_f)	1.073	1.071	1.063	.773	.465	.112
TRESID	2.350D+00	2.381D+00	2.409D+00	2.489D+00	2.521D+00	2.547D+00
Relação(Tr)	.960	.973	.984	1.017	1.030	1.041

TRESID = 2.448D+00 — CBASE2

também se eleva, e numa proporção maior do que em v_g , porque ao perder massa, as partículas perdem peso alterando a sua densidade e são arrastadas com maior facilidade. Este efeito sobre a massa de xisto também explica porque a temperatura média do xisto aumenta. A temperatura do gás tem um comportamento que depende em grande parte do valor obtido para E_2 . É o que acontece até certo valor, porque quando as velocidades do xisto e do gás se aproximam a transferência de calor entre os mesmos diminui. Mas se E_2 for inferior a um certo valor, pelo efeito da reação que libera os produtos no seio gasoso com a temperatura do xisto, T_g começará a aumentar.

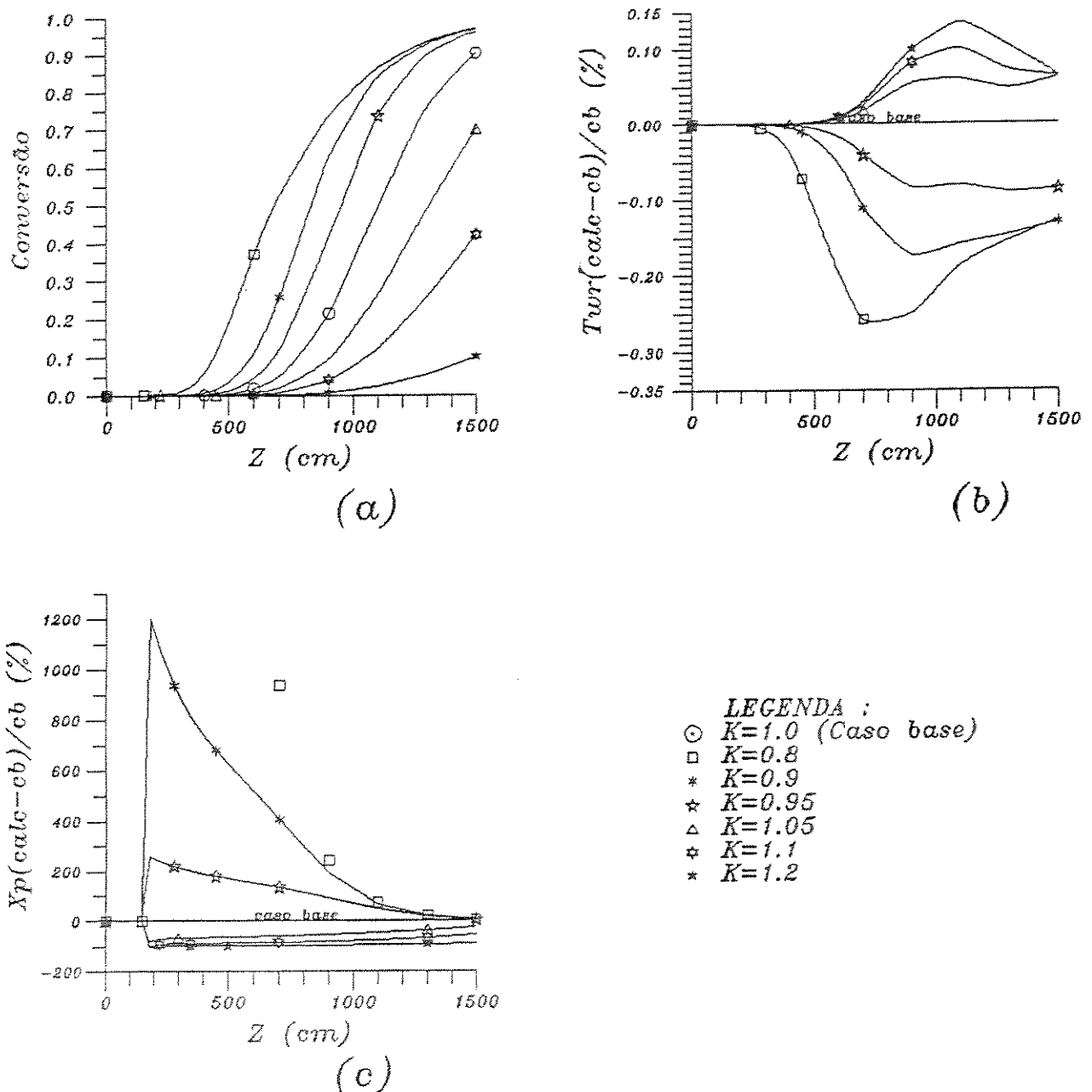


Figura 5.32: Influência da variação da energia de ativação da segunda reação nos perfis
(a) - da conversão; (b) - ΔT_{wr} ; e (c) - ΔX

Como se pode ver, neste caso, a variação de E_2 altera os balanços de energia, de forma que T_{wr} diminui e o consumo de calor do gás de aquecimento aumenta.

Densidade do xisto (ρ_x)

Qualquer uma das propriedades físicas do xisto está sujeita a erros con-

sideráveis, se não for levado em conta o fato de que estas propriedades podem ser bastante diversas nas amostras colhidas em pontos diferentes da mina. Isto explica a preocupação na análise da validação dos resultados. Ao fazer variar os valores obtidos na equação que determina a massa específica do xisto, verifica-se que esta propriedade tem grande influência nos resultados da simulação. É desejável portanto que a equação da densidade do xisto seja estipulada para a amostra a processar.

Tabela 5.49: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —

Parâmetro analisado : Massa específica do xisto

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ε	v_g	T_c	v_z	T_z	Pressão	T_G	Conv.	Quer.	Bet.	T_w	T_w
Zmaior	120.0	100.0	600.0	1100.0	900.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
ROX08	.99769	1033.25	473.93	849.76	552.99	.92452	708.65	.75041	.03242	.01617	647.71	65.84
Relação	1.0003	1.0675	1.0827	1.1364	1.0822	1.0016	1.0162	1.5065	.8059	.4560	1.0292	1.0174
Zmaior	130.0	100.0	650.0	1100.0	900.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
ROX09	.99760	1000.47	468.84	798.01	531.58	.92380	702.79	.62936	.03645	.02548	638.24	65.26
Relação	1.0001	1.0336	1.0388	1.0672	1.0403	1.0008	1.0078	1.2635	.9061	.7186	1.0142	1.0084
Zmaior	130.0	100.0	650.0	1100.0	900.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
ROX095	.99753	984.03	459.95	772.53	521.14	.92343	700.03	.56372	.03838	.03050	633.72	64.98
Relação	1.0001	1.0167	1.0191	1.0332	1.0199	1.0004	1.0038	1.1317	.9539	.8602	1.0070	1.0041
Zmaior	130.0	100.0	650.0	1300.0	900.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
ROX105	.99738	952.47	443.00	784.46	501.22	.92267	694.85	.43550	.04194	.04010	625.01	64.45
Relação	.9999	.9840	.9815	.9706	.9809	.9996	.9964	.8743	1.0426	1.1311	.9932	.9960
Zmaior	130.0	300.0	700.0	1300.0	900.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1300.0	1500.0	1500.0
ROX110	.99731	993.20	447.12	760.79	491.84	.92227	692.44	.37731	.04357	.02645	620.78	64.20
Relação	.9999	.9703	.9647	.9413	.9625	.9992	.9929	.7575	1.0830	1.5251	.9864	.9921
Zmaior	130.0	300.0	1300.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	700.0	1300.0	1500.0	1500.0
ROX120	.99715	963.13	520.95	714.89	506.24	.92144	687.96	.52501	.04673	.03607	612.52	63.72
Relação	.9997	.9409	.9424	.8845	.9320	.9983	.9865	.6918	1.1616	2.0801	.9733	.9846

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	ROX08	ROX09	ROX095	ROX105	ROX110	ROX120
ε	1.672D-04	8.414D-05	4.230D-05	-4.303D-05	-8.604D-05	-1.741D-04
v_g	4.491D+01	2.190D+01	1.081D+01	-1.046D+01	-2.057D+01	-3.968D+01
T_g	3.032D+01	1.475D+01	7.286D+00	-7.073D+00	-1.394D+01	-2.708D+01
v_z	7.549D-01	3.666D+01	1.807D+01	-1.747D-01	-3.435D+01	-6.632D+01
T_z	3.328D+01	1.618D+01	7.994D+00	-7.773D+00	-1.533D+01	-2.982D+01
Pressão	8.759D-04	4.484D-04	2.282D-04	-2.346D-04	-4.745D-04	-9.773D-04
T_G	5.561D+00	2.626D+00	1.278D+00	-1.207D+00	-2.346D+00	-4.437D+00
Conversão	1.011D-01	5.039D-02	2.508D-02	-2.439D-02	-4.800D-02	-9.196D-02
Querogênio	-3.960D-03	-1.976D-03	-9.829D-04	9.213D-04	1.824D-03	3.681D-03
Betume	-5.392D-03	-2.685D-03	-1.337D-03	1.335D-03	2.616D-03	4.826D-03
T_w	3.403D+00	1.585D+00	7.674D-01	7.195D-01	1.393D+00	2.625D+00
T_w	1.623D-01	7.543D-02	3.649D-02	3.414D-02	6.602D-02	1.241D-01
FDIF (%) :	110.832636	44.229024	20.085173	14.744964	26.314783	46.124266
CONV. FINAL	9.718D-01	9.479D-01	9.295D-01	8.756D-01	8.391D-01	7.477D-01
Relação(X_f)	1.073	1.047	1.026	.967	.927	.826
TRESID	2.179D+00	2.309D+00	2.377D+00	2.519D+00	2.593D+00	2.745D+00
Relação(Tr)	.890	.944	.971	1.029	1.059	1.121

TRESID = 2.448D+00 — CBASE2

Com relação à observação das figuras 5.33 e 5.34 e tabelas 5.49, pode-se afirmar que com o aumento do comprimento do reator a percepção destes efeitos é

menor, porque a reação começa a se aproximar da conversão máxima. Pela figura 5.34, de X versus ρ_z) nota-se que pode haver grande diferença no resultado obtido se a equação que determina os valores de ρ_z não for confiável. Neste caso, o início da reação não difere de um caso a outro, e é no ponto onde as conversões atingem 50% que ocorrem as maiores diferenças absolutas na conversão.

Os principais efeitos ao utilizar a densidade com valores menores do que os do caso de referência são: a fluidodinâmica se altera dando velocidade do xisto maior com perda de carga menor. A densidade menor representa uma massa menor para a mesma área da partícula, intensificando o efeito de aumento em T_z , e daí a conversão ser maior, mesmo sendo o tempo de residência menor. A temperatura do gás de arraste segue a tendência de T_z e provoca o aumento de v_g . Apesar do aumento de todas as temperaturas, inclusive as de parede, consome-se menos energia do gás de combustão.

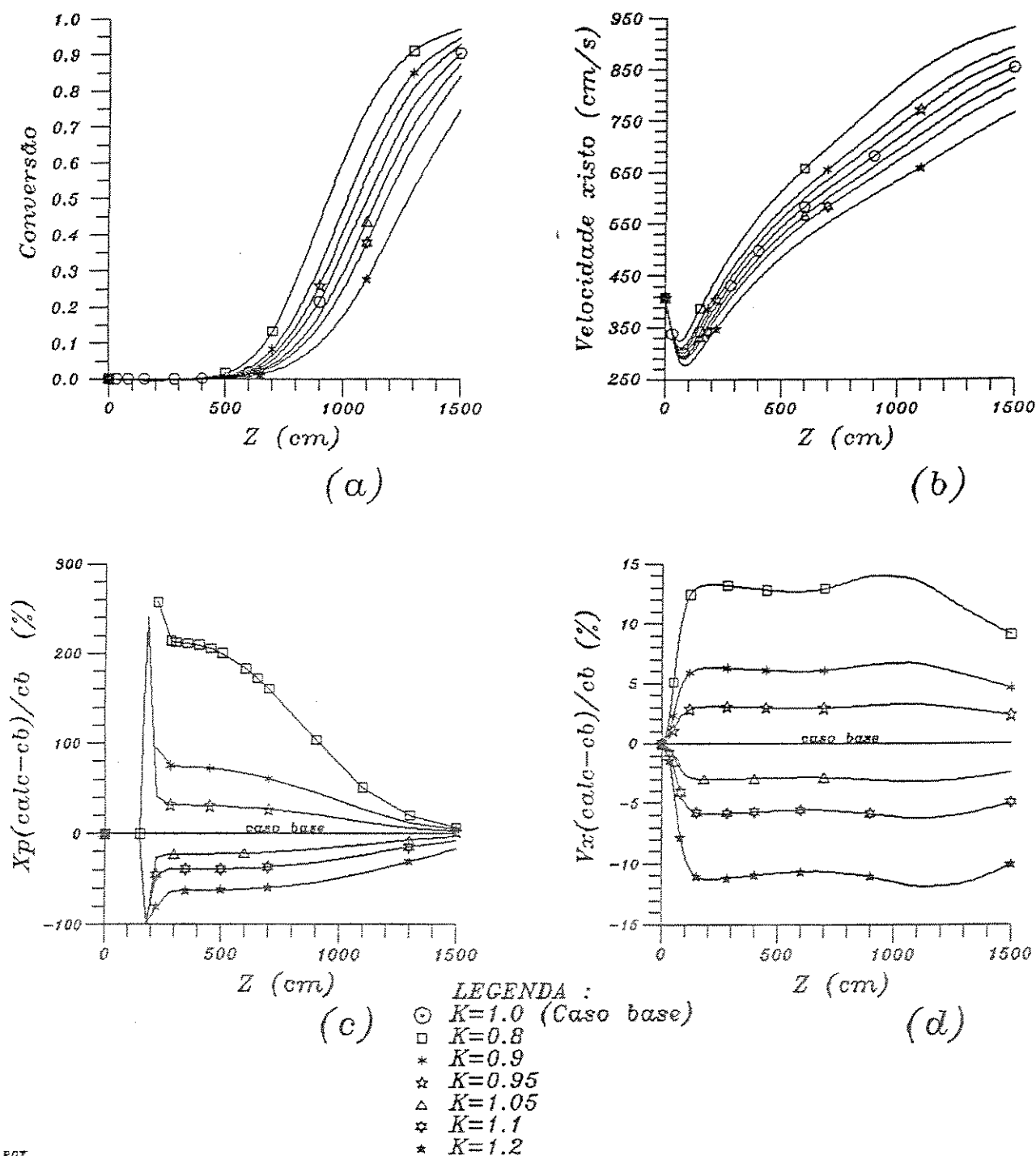


Figura 5.33: Influência da variação da massa específica das partículas nos perfis (a) - da conversão; (b) - v_z ; (c) - ΔX e (d) - Δv_z

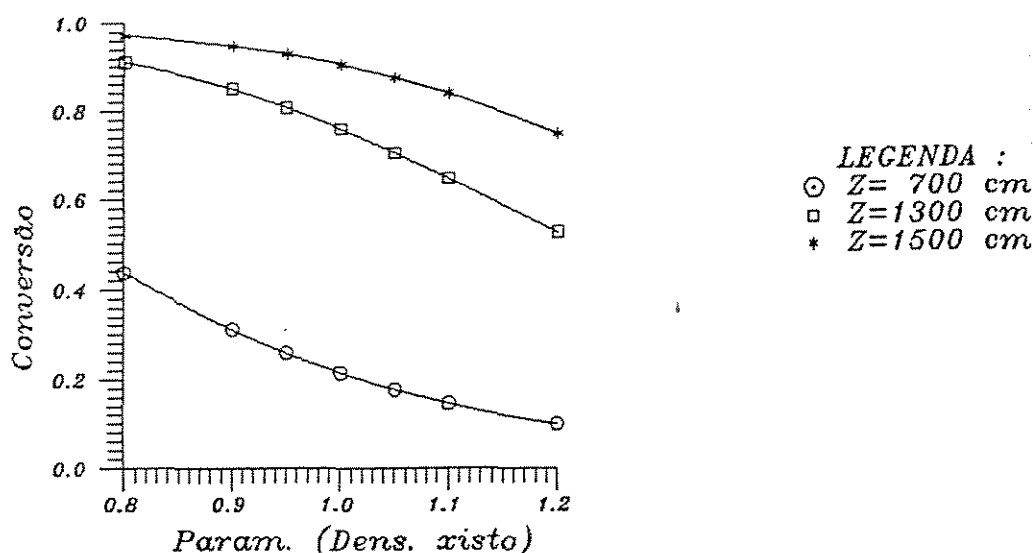


Figura 5.34: Variação da conversão com a massa específica das partículas

Energia de ativação da reação 1 (E_1)

A influência da energia de ativação da primeira reação na conversão é ilustrada na figura 5.35.a de X versus Z , onde se nota que ao diminuir o valor de E_1 a conversão sobe pouco, e ao aumentar E_1 a curva da conversão fica bem mais baixa (tabela 5.50). Isto porque se E_1 diminuir indefinidamente, ter-se-á a redução brusca na concentração de querogênio, com conseqüente formação do betume. Mas se, pelo valor de E_1 , o betume começar a reagir só depois que quase todo querogênio for formado, então não se notará nenhuma alteração na conversão entre um caso e outro. É o que pode ser confirmado no gráfico 5.35.b da concentração de querogênio.

De qualquer forma, o efeito causado pela diminuição de E_1 é o aumento da conversão, o que significa que o xisto perde massa antes, determinando um aumento médio em T_x . Também por causa da variação na densidade e porque mais moles de produtos são liberados no seio gasoso, a velocidade do xisto aumenta. A temperatura média do gás varia muito pouco.

Tanto o valor de E_1 como o de E_2 dependem muito da instalação experimental, porque nestes parâmetros estão embutidos os efeitos, por exemplo, devidos a taxa de evaporação dos produtos. Tanto é assim que E_1 e E_2 devem ser determinados nas próprias condições operacionais do experimento. A taxa de elevação da temperatura

Tabela 5.50: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : **Energia de ativação da reação 1**

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	1100.0	100.0	900.0	1100.0	900.0	1100.0	1300.0	1100.0	550.0	550.0	900.0	1500.0
E1-08	.99891	981.60	500.24	762.61	512.15	.92408	697.18	.63438	.01435	.07604	679.65	64.69
Relação	1.0000	1.0141	.9974	1.0199	1.0023	1.0000	.9997	1.2736	.2555	2.1455	.9995	.9997
Zmaior	1100.0	100.0	900.0	1100.0	900.0	1100.0	1300.0	1100.0	650.0	600.0	942.265	1500.0
E1-09	.99890	977.50	500.51	758.05	511.84	.92409	697.26	.59660	.02399	.06011	674.61	64.70
Relação	1.0000	1.0099	.9979	1.0138	1.0017	1.0000	.9998	1.1977	.5279	1.5021	.9997	.9998
Zmaior	1100.0	100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	1300.0	1100.0	700.0	650.0	1500.0	1500.0
E1-095	.99889	973.32	500.94	814.19	511.47	.92409	697.32	.55493	.02953	.05393	629.20	64.71
Relação	1.0000	1.0056	.9988	1.0074	1.0009	1.0000	.9999	1.1141	.7341	1.2214	.9998	.9999
Zmaior	1300.0	300.0	900.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	900.0	700.0	942.265	1500.0
E1-105	.99896	1016.32	502.24	800.23	542.54	.92307	697.45	.69011	.03256	.03876	674.94	64.72
Relação	1.0000	.9929	1.0014	.9901	.9988	1.0000	1.0001	.9093	1.4535	.8148	1.0002	1.0001
Zmaior	1300.0	300.0	900.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	900.0	700.0	942.265	1500.0
E1-110	.99895	1007.92	502.93	791.10	541.75	.92308	697.50	.60741	.04252	.03130	675.05	64.73
Relação	1.0000	.9847	1.0028	.9788	.9974	1.0000	1.0002	.8004	1.8983	.6580	1.0003	1.0002
Zmaior	1300.0	300.0	900.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	900.0	700.0	1057.735	1057.735
E1-120	.99892	991.33	504.11	773.21	540.25	.92312	697.61	.43628	.05897	.02072	662.59	68.45
Relação	1.0000	.9685	1.0051	.9567	.9946	1.0001	1.0003	.5749	2.6327	.4355	1.0006	1.0003

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	E1-08	E1-09	E1-095	E1-105	E1-110	E1-120
ϵ	9.051D-06	6.123D-06	3.552D-06	-4.134D-06	-8.565D-06	-1.675D-05
v_g	5.449D+00	3.779D+00	2.173D+00	-2.613D+00	-5.438D+00	-1.075D+01
T_g	-1.510D-01	-1.253D-01	-8.307D-02	1.371D-01	3.266D-01	8.100D-01
v_x	6.055D+00	4.177D+00	2.395D+00	-2.862D+00	-5.941D+00	-1.171D+01
T_x	1.425D-01	1.345D-01	9.666D-02	-1.717D-01	-4.151D-01	-9.898D-01
Pressão	-8.534D-06	-6.373D-06	-3.807D-06	4.890D-06	1.052D-05	2.149D-05
T_C	-8.631D-02	-5.046D-02	-2.575D-02	2.499D-02	4.726D-02	8.395D-02
Conversão	5.757D-02	3.991D-02	2.301D-02	-2.793D-02	-5.847D-02	-1.171D-01
Querogênio	-1.791D-02	-1.018D-02	-5.381D-03	5.784D-03	1.167D-02	2.244D-02
Betume	1.259D-02	6.489D-03	3.253D-03	-3.201D-03	-6.263D-03	-1.161D-02
T_{w_r}	2.811D-02	1.615D-02	8.217D-03	7.803D-03	1.441D-02	2.455D-02
T_{w_i}	1.401D-03	8.055D-04	4.097D-04	3.909D-04	7.260D-04	1.251D-03
FDIF (%) :	76.983258	30.558684	13.650729	11.550956	21.123042	36.040874
CONV. FINAL	9.555D-01	9.489D-01	9.352D-01	8.545D-01	7.817D-01	5.989D-01
Relação(X_f)	1.055	1.048	1.033	.944	.863	.661
TRESID	2.424D+00	2.431D+00	2.438D+00	2.459D+00	2.471D+00	2.495D+00
Relação(Tr)	.990	.993	.996	1.005	1.010	1.019

TRESID = 2.448D+00 — CBASE2

também é um dado importante para avaliar se estes valores são ou não aplicáveis. Porém a forma mais correta de proceder neste caso, é utilizar modelos cinéticos mais ricos em informações, que levem em consideração os vários efeitos envolvidos.

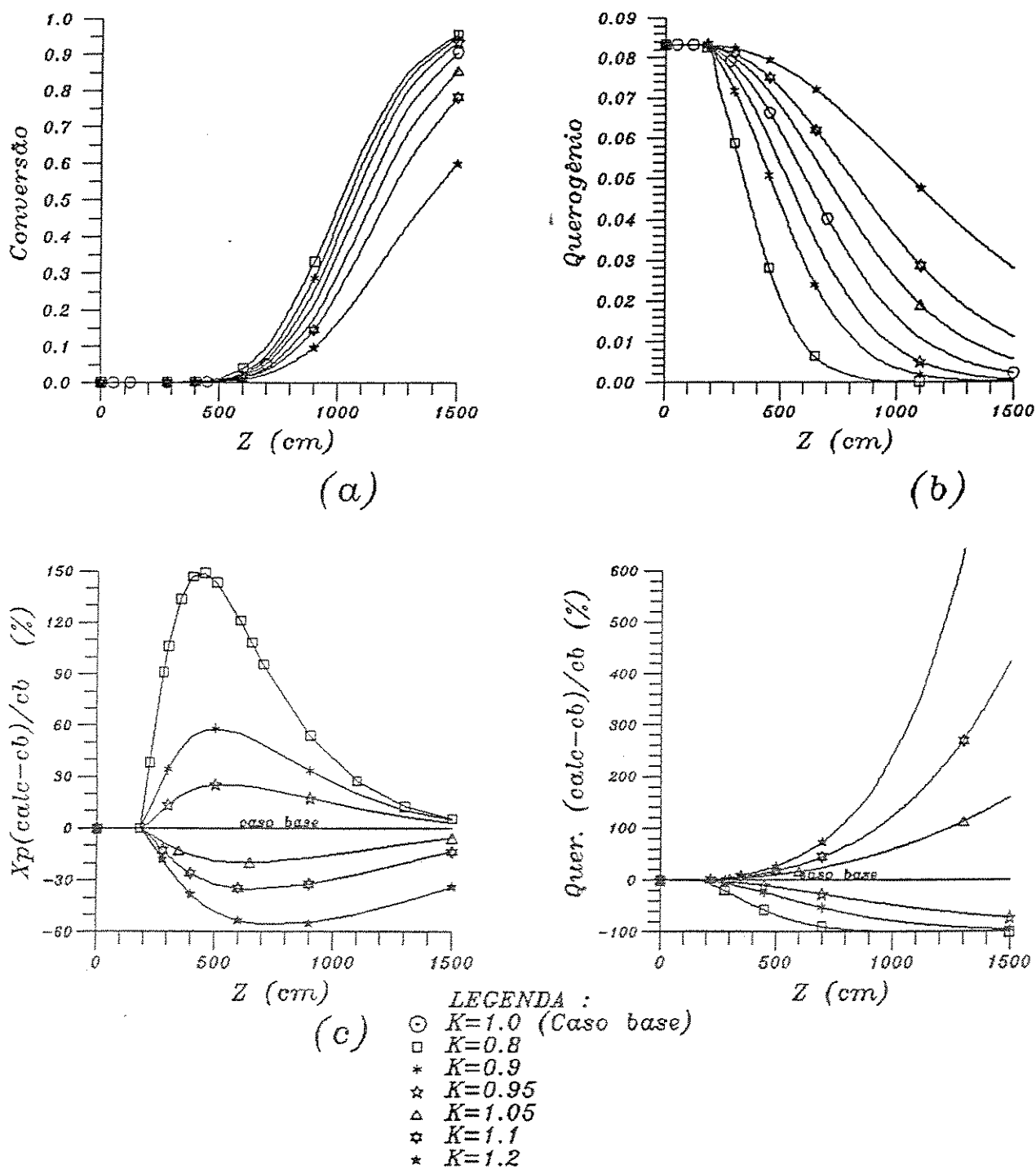


Figura 5.35: Influência da variação da energia de ativação da primeira reação nos perfis (a) - da conversão; (b) - Q ; (c) - ΔX e (d) - ΔQ

Calor específico do xisto (C_{p_x})

Esta é uma outra propriedade do xisto a qual o modelo se mostra sensível. Nas figuras 5.37 e 5.36 e tabela 5.51 observa-se que se C_{p_x} muda, a temperatura do xisto também altera, justificando o que ocorre com a conversão. O gráfico 5.36, de X versus C_{p_x} , mostra que reatores de grande comprimento (e altas conversões) sofrem uma influência bem menor com C_{p_x} . Considerando que as amostras podem variar suas propriedades em função de diversos fatores, é interessante que este fato seja realçado. Assim, se for desejada uma operação pouco sujeita a distúrbios (tais como a variação das propriedades do xisto), deve-se trabalhar com situações que dão altas conversões (acima de 90%), garantindo uma operação com resultados finais estáveis.

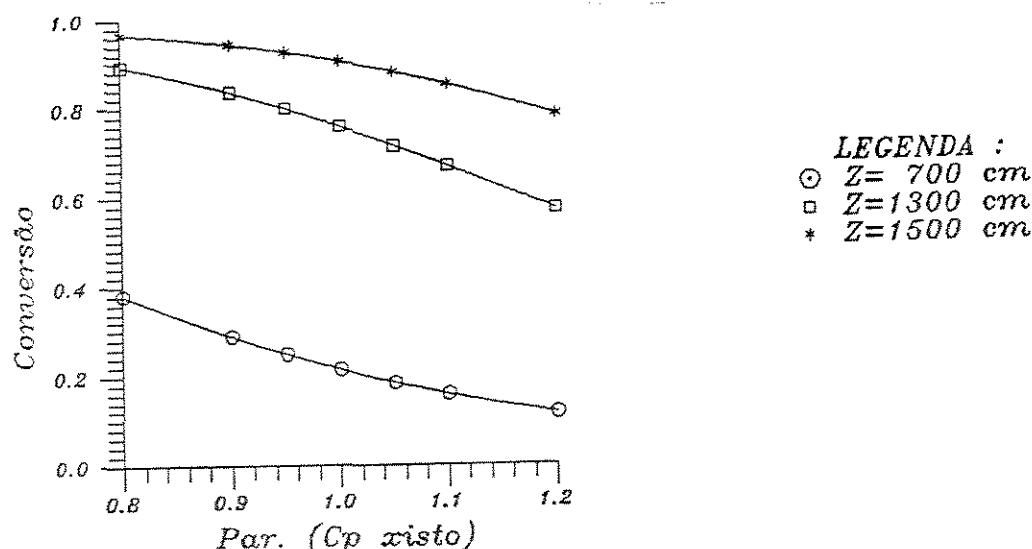


Figura 5.36: Variação da conversão com o calor específico do xisto

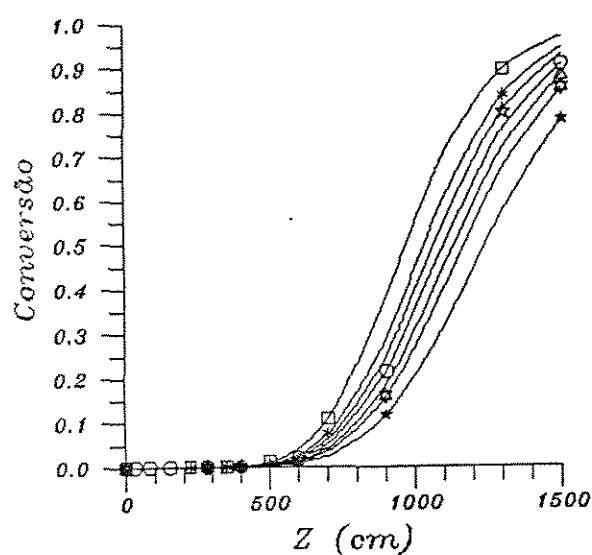
Ao considerar-se um C_{p_x} menor do que o adotado no caso base, sem alterar outros parâmetros, é fácil ver que T_x aumenta provocando uma reação mais rápida. Assim, diminuindo a densidade da partícula v_x sobe. A velocidade do gás aumenta porque existe maior quantidade dos produtos na fase gasosa e por causa do efeito em T_g . O consumo da energia dos gases de aquecimento é menor, mas o perfil de T_w aumenta um pouco, principalmente no final do reator.

Tabela 5.51: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : **Calor específico do xisto**

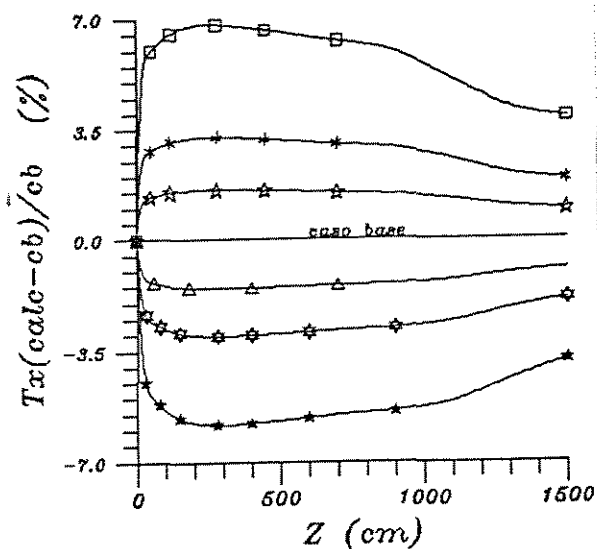
a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	180.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
CPX08	.99780	1020.61	579.25	800.97	541.46	.92311	705.38	.70526	.03344	.01999	643.26	65.55
Relação	1.0001	1.0544	1.0479	1.0712	1.0596	1.0001	1.0115	1.4159	.8311	.5637	1.0222	1.0129
Zmaior	180.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
CPX09	.99775	993.78	565.87	773.79	525.91	.92308	701.24	.60309	.03688	.02770	636.11	65.12
Relação	1.0000	1.0267	1.0237	1.0348	1.0292	1.0000	1.0055	1.2108	.9168	.7814	1.0108	1.0063
Zmaior	190.0	100.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
CPX095	.99778	980.66	559.28	760.56	518.35	.92307	699.27	.55036	.03855	.03163	632.67	64.91
Relação	1.0000	1.0132	1.0117	1.0172	1.0144	1.0000	1.0027	1.1049	.9582	.8923	1.0053	1.0031
Zmaior	200.0	300.0	1300.0	1300.0	900.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1100.0	1500.0	1500.0
CPX105	.99778	1011.28	546.40	795.57	503.81	.92304	695.56	.44774	.04181	.03907	626.03	64.52
Relação	1.0000	.9880	.9885	.9844	.9860	1.0000	.9974	.8989	1.0393	1.1019	.9948	.9970
Zmaior	220.0	300.0	1300.0	1300.0	900.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1300.0	1500.0	1500.0
CPX110	.99784	998.96	540.16	782.96	496.85	.92303	693.81	.40008	.04334	.02446	622.81	64.33
Relação	1.0000	.9759	.9772	.9688	.9723	1.0000	.9949	.8032	1.0772	1.4105	.9897	.9941
Zmaior	200.0	300.0	1300.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	700.0	1300.0	1500.0	1500.0
CPX120	.99772	974.50	528.02	758.04	515.54	.92301	690.48	.57096	.04626	.03205	616.53	63.96
Relação	.9999	.9520	.9552	.9379	.9491	.9999	.9901	.7523	1.1499	1.8482	.9797	.9884

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	CPX08	CPX09	CPX095	CPX105	CPX110	CPX120
ϵ	6.690D-05	3.326D-05	1.656D-05	-1.649D-05	-3.257D-05	-6.490D-05
v_g	3.502D+01	1.713D+01	8.459D+00	-8.246D+00	-1.625D+01	-3.164D+01
T_g	2.284D+01	1.114D+01	5.496D+00	-5.366D+00	-1.059D+01	-2.069D+01
v_x	3.366D+01	1.645D+01	8.125D+00	-7.912D+00	-1.558D+01	-3.030D+01
T_x	2.441D+01	1.195D+01	5.911D+00	-5.798D+00	-1.147D+01	-2.251D+01
Pressão	2.162D-05	1.123D-05	5.693D-06	-6.078D-06	-1.159D-05	-2.452D-05
T_C	3.787D+00	1.811D+00	8.845D-01	-8.477D-01	-1.656D+00	-3.179D+00
Conversão	8.097D-02	4.037D-02	2.012D-02	-1.973D-02	-3.895D-02	-7.572D-02
Querogênio	-3.484D-03	-1.760D-03	-9.008D-04	8.529D-04	1.699D-03	3.385D-03
Betume	-4.005D-03	-1.974D-03	-9.605D-04	9.718D-04	1.903D-03	3.619D-03
T_{w_r}	2.098D+00	1.010D+00	4.910D-01	4.674D-01	9.102D-01	1.737D+00
T_{w_i}	1.000D-01	4.800D-02	2.332D-02	2.216D-02	4.311D-02	8.213D-02
FDIF (%) :	75.107793	31.973215	16.137013	11.599384	20.883301	36.066606
CONV. FINAL	9.666D-01	9.429D-01	9.261D-01	8.810D-01	8.523D-01	7.824D-01
Relação(X_f)	1.067	1.041	1.023	.973	.941	.864
TRESID	2.320D+00	2.384D+00	2.416D+00	2.480D+00	2.511D+00	2.575D+00
Relação(Tr)	.948	.974	.987	1.013	1.026	1.052

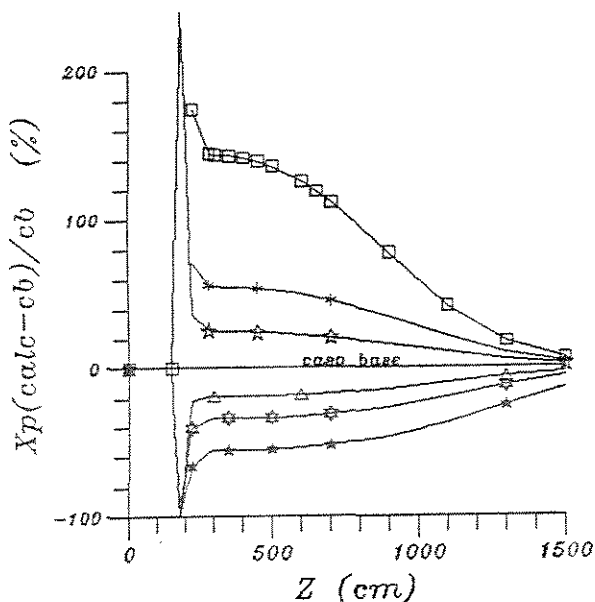
TRESID = 2.448D+00 — CBASE2



(a)



(b)



(c)

LEGENDA :

- $K=1.0$ (Caso base)
- $K=0.8$
- * $K=0.9$
- ☆ $K=0.95$
- △ $K=1.05$
- ☆ $K=1.1$
- * $K=1.2$

Figura 5.37: Influência da variação do calor específico do xisto nos perfis (a) - da conversão; (b) - ΔT_z ; e (c) - ΔX

Absortividade do gás de aquecimento (α_C)

Tabela 5.52: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —

Parâmetro analisado : Absortividade do gás de aquecimento

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	210.0	100.0	550.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	26.057	28.943
ALPC08	.99789	993.54	435.97	773.52	525.59	.92309	758.16	.60226	.03673	.02780	987.97	95.97
Relação	1.0000	1.0265	1.0315	1.0345	1.0286	1.0000	.9796	1.2091	.9130	.7840	1.0262	1.0210
Zmaior	210.0	100.0	550.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	28.943	28.943
ALPC09	.99786	980.34	429.15	760.23	518.09	.92307	766.25	.54915	.03849	.03174	971.54	94.96
Relação	1.0000	1.0128	1.0154	1.0167	1.0139	1.0000	.9901	1.1025	.9567	.8953	1.0128	1.0102
Zmaior	210.0	100.0	550.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	28.943	28.943
ALPC095	.99785	974.07	425.86	753.93	514.52	.92306	770.15	.52349	.03937	.03362	965.33	94.47
Relação	1.0000	1.0064	1.0076	1.0083	1.0069	1.0000	.9951	1.0510	.9785	.9482	1.0063	1.0050
Zmaior	200.0	100.0	600.0	1300.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	28.943	28.943
ALPC105	.99779	962.07	434.60	802.24	507.60	.92305	777.66	.47405	.04101	.03719	953.43	93.54
Relação	1.0000	.9940	.9928	.9926	.9934	1.0000	1.0048	.9517	1.0194	1.0489	.9939	.9951
Zmaior	200.0	300.0	600.0	1300.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	28.943	28.943
ALPC110	.99778	1011.91	431.53	796.23	504.24	.92304	781.28	.45019	.04184	.03887	947.72	93.09
Relação	1.0000	.9886	.9858	.9852	.9868	1.0000	1.0095	.9038	1.0400	1.0964	.9879	.9903
Zmaior	210.0	300.0	600.0	1300.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1300.0	28.943	28.943
ALPC120	.99780	1000.62	425.63	784.68	497.86	.92303	788.26	.40598	.04336	.02395	936.76	92.23
Relação	1.0000	.9776	.9723	.9709	.9743	1.0000	1.0185	.8150	1.0779	1.3811	.9765	.9811

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	ALPC08	ALPC09	ALPC095	ALPC105	ALPC110	ALPC120
ϵ	3.518D-05	1.721D-05	8.667D-06	-8.407D-06	-1.687D-05	-3.291D-05
v_g	1.758D+01	8.569D+00	4.254D+00	-4.091D+00	-8.140D+00	-1.583D+01
T_g	1.155D+01	5.627D+00	2.792D+00	-2.696D+00	-5.358D+00	-1.043D+01
v_x	1.691D+01	8.236D+00	4.088D+00	-3.929D+00	-7.817D+00	-1.519D+01
T_x	1.222D+01	5.962D+00	2.963D+00	-2.864D+00	-5.699D+00	-1.112D+01
Pressão	1.473D-05	7.055D-06	3.821D-06	-3.694D-06	-7.858D-06	-1.480D-05
T_C	-1.320D+01	-6.428D+00	-3.169D+00	3.093D+00	6.101D+00	1.190D+01
Conversão	4.032D-02	1.980D-02	9.869D-03	-9.425D-03	-1.887D-02	-3.673D-02
Querogênio	-1.833D-03	-9.266D-04	-4.621D-04	4.068D-04	8.583D-04	1.688D-03
Betume	-1.897D-03	-9.049D-04	-4.505D-04	4.650D-04	8.879D-04	1.709D-03
T_{w_r}	1.773D+01	8.665D+00	4.285D+00	4.189D+00	8.290D+00	1.622D+01
T_{w_i}	1.385D+00	6.775D-01	3.352D-01	3.281D-01	6.494D-01	1.272D+00
FDIF (%) :	42.638838	20.627239	10.033529	6.861626	15.516395	28.050767
CONV. FINAL	9.427D-01	9.258D-01	9.162D-01	8.945D-01	8.823D-01	8.562D-01
Relação(X_f)	1.041	1.022	1.012	.988	.974	.945
TRESID	2.382D+00	2.415D+00	2.431D+00	2.463D+00	2.479D+00	2.510D+00
Relação(Tr)	.973	.987	.993	1.006	1.013	1.025

TRESID = 2.448D+00 — CBASE2

Para encontrar um valor para α_C , optou-se pela equação 3.157 obtida por uma correlação existente na literatura [40]. A questão da troca de calor entre os gases quentes provenientes da combustão e as paredes do reator e do refratário deverá ser estudada mais a fundo com o uso de um número maior de dados experimentais. Isto porque α_C provou ter uma influência razoável no valor da conversão (figura 5.38.a). Pela tabela 5.52, verifica-se que a maior diferença absoluta ocorre quando a conversão se aproxima de 50% e que a relação entre a conversão nos dois casos pode chegar

bem próximo do valor da variação do parâmetro. Ou seja, para um erro de 5% na determinação de α_C , podem-se ter até 5% de variação na conversão. Mas se o reator for suficientemente longo, as diferenças no valor da conversão final são menores. A conversão diminui, ao aumentar α_C , porque a absortividade dificulta a perda de calor pela radiação, e em consequência a temperatura do gás de aquecimento fica maior, assim como as temperaturas de parede ficam menores. O reflexo disto na parte interna do reator é a redução nas temperaturas e nas velocidades (do xisto e do gás).

O efeito observado em T_{w_r} não é muito grande e ocorre com maior intensidade no início do reator, onde se α_C for maior do que o real, T_{w_r} será menor do que deveria (figura 5.38.b e 5.39).

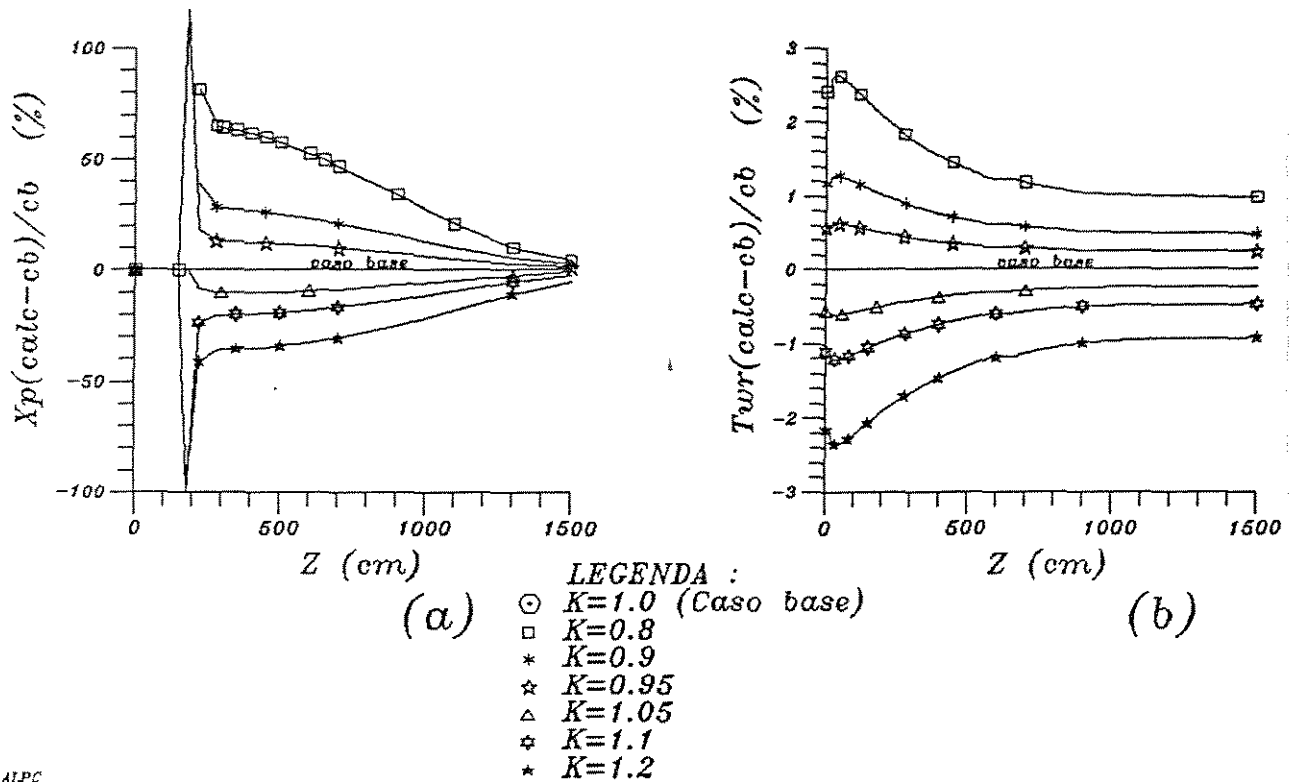


Figura 5.38: Influência da variação da absortividade do gás de aquecimento nos perfis (a) - da conversão e (b) - ΔT_{wr} .

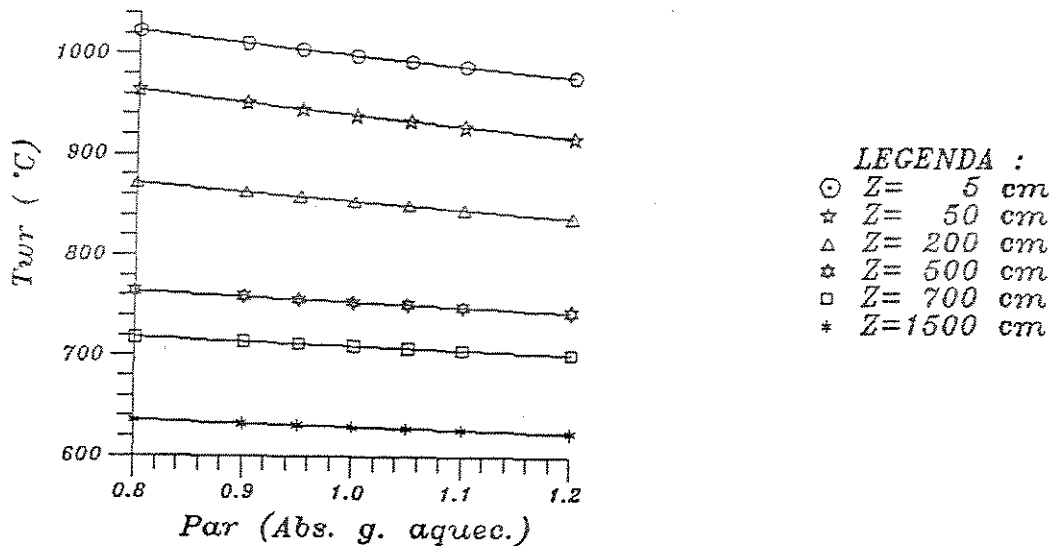


Figura 5.39: Variação da temperatura de parede do reator com a absortividade do gás de aquecimento

Emissividade do gás de combustão (ϵ_C)Tabela 5.53: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : Emissividade do gás de aquecimento

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	220.0	300.0	550.0	1300.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1300.0	33.943	33.943
EPSC08	.99781	991.60	405.05	775.31	492.40	.92301	794.27	.36938	.04480	.02679	920.74	91.00
Relação	.9999	.9687	.9584	.9593	.9636	1.0000	1.0263	.7416	1.1135	1.5448	.9653	.9721
Zmaior	220.0	100.0	550.0	1300.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	33.943	33.943
EPSC09	.99785	952.34	413.97	792.20	501.83	.92303	783.96	.43340	.04246	.04004	937.46	92.31
Relação	1.0000	.9839	.9795	.9802	.9821	1.0000	1.0129	.8701	1.0553	1.1293	.9828	.9862
Zmaior	200.0	100.0	550.0	1300.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	33.943	33.943
EPSC095	.99778	960.14	418.34	800.32	506.44	.92304	778.92	.46584	.04131	.03777	945.70	92.96
Relação	1.0000	.9920	.9898	.9902	.9911	1.0000	1.0064	.9352	1.0267	1.0652	.9914	.9931
Zmaior	210.0	100.0	550.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	31.057	33.943
EPSC105	.99786	975.77	426.89	755.67	515.53	.92307	769.06	.53070	.03911	.03309	965.03	94.24
Relação	1.0000	1.0081	1.0100	1.0106	1.0089	1.0000	.9937	1.0654	.9721	.9335	1.0085	1.0068
Zmaior	210.0	100.0	550.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	31.057	33.943
EPSC110	.99787	983.48	431.07	763.46	519.95	.92308	764.24	.56243	.03801	.03077	973.04	94.87
Relação	1.0000	1.0161	1.0199	1.0210	1.0175	1.0000	.9875	1.1291	.9447	.8679	1.0168	1.0135
Zmaior	210.0	100.0	550.0	1100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	1100.0	30.0	30.0
EPSC120	.99790	998.78	439.23	778.94	528.70	.92310	754.83	.62401	.03586	.02619	990.01	96.41
Relação	1.0001	1.0319	1.0392	1.0417	1.0347	1.0000	.9753	1.2528	.8913	.7388	1.0333	1.0266

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	EPSC08	EPSC09	EPSC095	EPSC105	EPSC110	EPSC120
ϵ	-4.743D-05	-2.320D-05	-1.148D-05	1.126D-05	2.199D-05	4.304D-05
v_g	-2.245D+01	-1.108D+01	-5.503D+00	5.487D+00	1.085D+01	2.141D+01
T_g	-1.486D+01	-7.320D+00	-3.635D+00	3.611D+00	7.142D+00	1.409D+01
v_x	-2.158D+01	-1.066D+01	-5.295D+00	5.283D+00	1.045D+01	2.063D+01
T_x	-1.583D+01	-7.778D+00	-3.857D+00	3.824D+00	7.553D+00	1.487D+01
Pressão	-2.344D-05	-1.121D-05	-5.491D-06	5.606D-06	9.683D-06	1.929D-05
T_C	1.690D+01	8.342D+00	4.144D+00	-4.086D+00	-8.125D+00	-1.604D+01
Conversão	-5.173D-02	-2.553D-02	-1.264D-02	1.266D-02	2.495D-02	4.892D-02
Querogênio	2.468D-03	1.178D-03	5.585D-04	-5.923D-04	-1.167D-03	-2.276D-03
Betume	2.318D-03	1.184D-03	6.110D-04	-5.782D-04	-1.140D-03	-2.249D-03
T_{w_r}	2.373D+01	1.165D+01	5.772D+00	5.671D+00	1.117D+01	2.209D+01
T_{w_i}	1.861D+00	9.124D-01	4.518D-01	4.432D-01	8.722D-01	1.723D+00
FDIF (%)	39.192996	20.576778	9.850042	12.538407	26.253348	56.061533
CONV. FINAL	8.328D-01	8.738D-01	8.908D-01	9.187D-01	9.299D-01	9.480D-01
Relação(X_f)	.920	.965	.984	1.014	1.027	1.047
TRESID	2.537D+00	2.491D+00	2.469D+00	2.427D+00	2.407D+00	2.368D+00
Relação(Tr)	1.036	1.018	1.009	.991	.983	.967

TRESID = 2.448D+00 — CBASE2

O efeito causado pela mudança no valor de ϵ_C é inverso ao de α_C como pode ser observado na tabela 5.53 e figura 5.40. Assim, ao aumentar o ϵ_C , a conversão aumenta.

Além de ter o efeito contrário, a outra diferença é que a sensibilidade do modelo à emissividade é maior do que a absortividade (as diferenças médias em módulo são maiores).

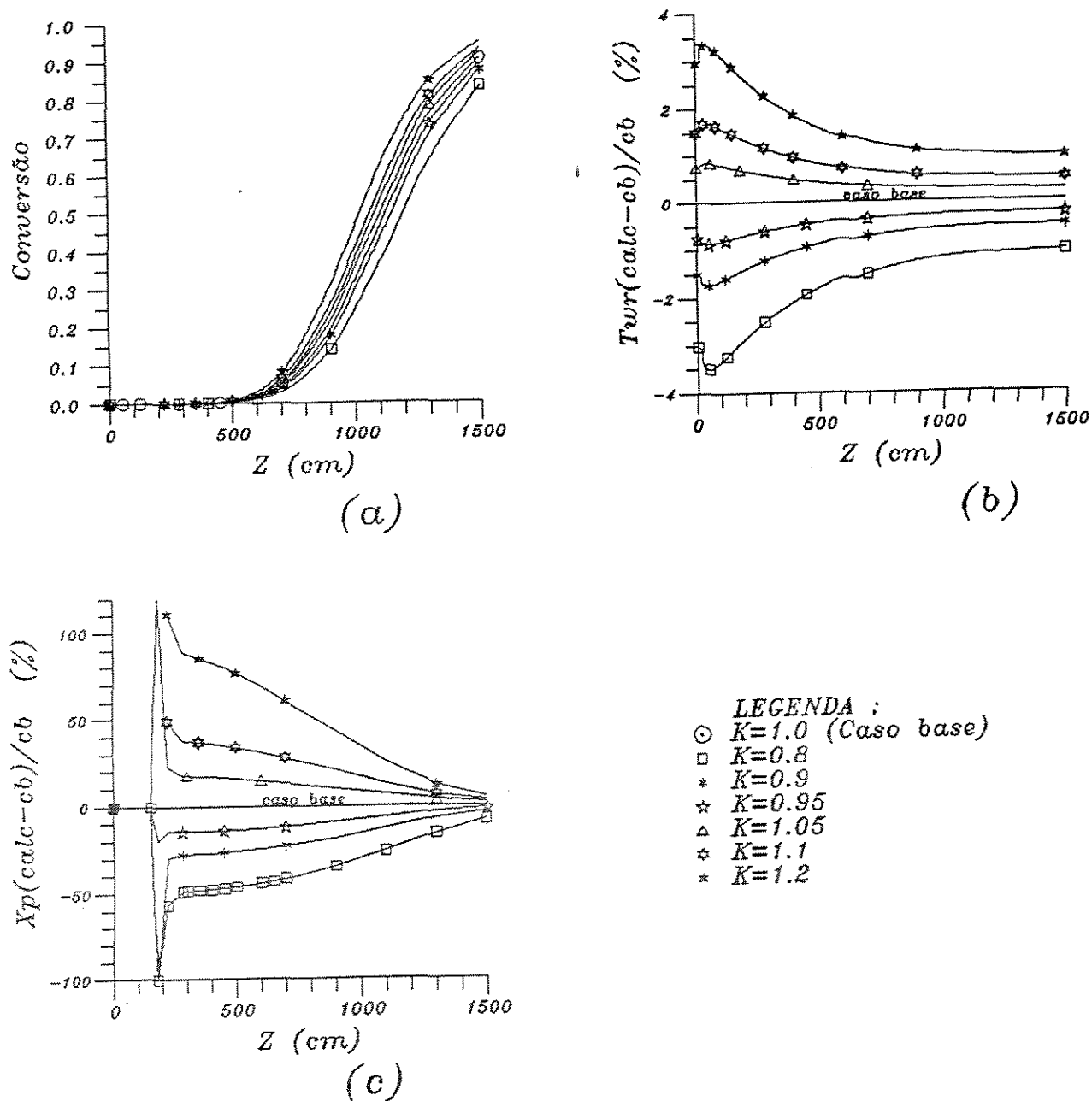


Figura 5.40: Influência da variação da emissividade do gás de aquecimento nos perfis
(a) - da conversão; (b) - ΔT_w ; e (c) - ΔX

Calor específico do gás de aquecimento (C_{p_c})

A precisão dos valores das propriedades físicas do gás de aquecimento está intimamente ligada às considerações feitas para a composição dos fumos. Assim, o objetivo é verificar se o calor específico do gás de aquecimento pode ser estimado desta maneira. Pela observação dos gráficos 5.42 e 5.41 e tabela 5.54 para C_{p_c} , conclui-se que a confirmação dos dados de composição e da temperatura do gás produzido na combustão é de grande interesse.

Tabela 5.54: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : Calor específico do gás de aquecimento

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_z	T_z	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	1300.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	900.0	1300.0	1500.0	1500.0
CPC08	.99885	941.36	508.94	727.52	517.70	.92309	636.97	.46808	.02861	.04050	572.44	60.34
Relação	.9999	.9197	.9207	.9002	.9170	1.0000	.9134	.6168	1.2773	2.3354	.9096	.9324
Zmaior	1300.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	900.0	1300.0	1500.0	1500.0
CPC09	.99892	984.32	531.56	769.75	542.56	.92412	669.07	.62757	.02519	.02794	602.50	62.65
Relação	.9999	.9616	.9616	.9524	.9610	1.0000	.9594	.8269	1.1245	1.6112	.9574	.9682
Zmaior	1300.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	900.0	1300.0	1500.0	1500.0
CPC095	.99894	1004.57	542.36	789.61	553.95	.92411	683.66	.69801	.02373	.02227	616.29	63.71
Relação	1.0000	.9814	.9811	.9770	.9812	1.0000	.9803	.9197	1.0594	1.2840	.9793	.9846
Zmaior	1100.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	1300.0	1100.0	900.0	1100.0	1500.0	1500.0
CPC105	.99891	1041.40	562.91	825.58	574.52	.92409	710.33	.55642	.02114	.03104	641.67	65.66
Relação	1.0000	1.0174	1.0183	1.0215	1.0176	1.0000	1.0186	1.1171	.9438	.8755	1.0196	1.0146
Zmaior	1100.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	1300.0	1100.0	900.0	1100.0	1500.0	1500.0
CPC110	.99893	1057.69	572.58	841.43	583.77	.92408	722.55	.61069	.02003	.02686	653.34	66.55
Relação	1.0000	1.0333	1.0358	1.0411	1.0340	1.0000	1.0361	1.2260	.8940	.7577	1.0382	1.0284
Zmaior	1100.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	1300.0	1100.0	900.0	1100.0	1500.0	1500.0
CPC120	.99896	1086.52	590.76	869.40	600.75	.92406	745.08	.70690	.01801	.01940	675.02	68.21
Relação	1.0001	1.0615	1.0687	1.0757	1.0641	1.0000	1.0684	1.4192	.8042	.5473	1.0726	1.0541

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	CPC08	CPC09	CPC095	CPC105	CPC110	CPC120
ϵ	-7.213D-05	-3.302D-05	-1.557D-05	1.459D-05	2.748D-05	5.108D-05
v_g	-4.156D+01	-1.981D+01	-9.630D+00	9.173D+00	1.775D+01	3.357D+01
T_g	-2.642D+01	-1.251D+01	-6.081D+00	5.814D+00	1.130D+01	2.156D+01
v_z	-3.893D+01	-1.854D+01	-9.005D+00	8.564D+00	1.655D+01	3.124D+01
T_z	-2.895D+01	-1.365D+01	-6.611D+00	6.281D+00	1.217D+01	2.311D+01
Pressão	1.351D-05	7.508D-06	4.397D-06	-4.063D-06	-9.871D-06	-1.811D-05
T_C	-4.756D+01	-2.206D+01	-1.064D+01	9.962D+00	1.930D+01	3.634D+01
Conversão	-1.061D-01	-5.033D-02	-2.416D-02	2.230D-02	4.217D-02	7.640D-02
Querogênio	3.456D-03	1.505D-03	7.128D-04	-6.963D-04	-1.283D-03	-2.362D-03
Betume	6.359D-03	3.150D-03	1.522D-03	-1.367D-03	-2.618D-03	-4.705D-03
T_{w_r}	2.696D+01	1.244D+01	5.989D+00	5.586D+00	1.081D+01	2.031D+01
T_{w_i}	2.049D+00	9.436D-01	4.540D-01	4.229D-01	8.176D-01	1.535D+00
FDIF (%) :	40.210759	18.298996	8.846594	10.685023	19.330332	37.825421
CONV. FINAL	6.593D-01	8.122D-01	8.660D-01	9.338D-01	9.530D-01	9.748D-01
Relação(X_f)	.728	.897	.956	1.031	1.052	1.076
TRESID	2.614D+00	2.524D+00	2.484D+00	2.414D+00	2.383D+00	2.329D+00
Relação(Tr)	1.068	1.031	1.015	.986	.974	.951

TRESID = 2.448D+00 — CBASE2

Tanto a conversão como T_{w_r} são sensíveis ao valor estipulado para o calor específico. Em T_{w_r} , as maiores diferenças estão no final do reator, e chegam a quase 10% quando C_{p_c} diminui 20%. A temperatura de parede do reator varia linearmente com C_{p_c} .

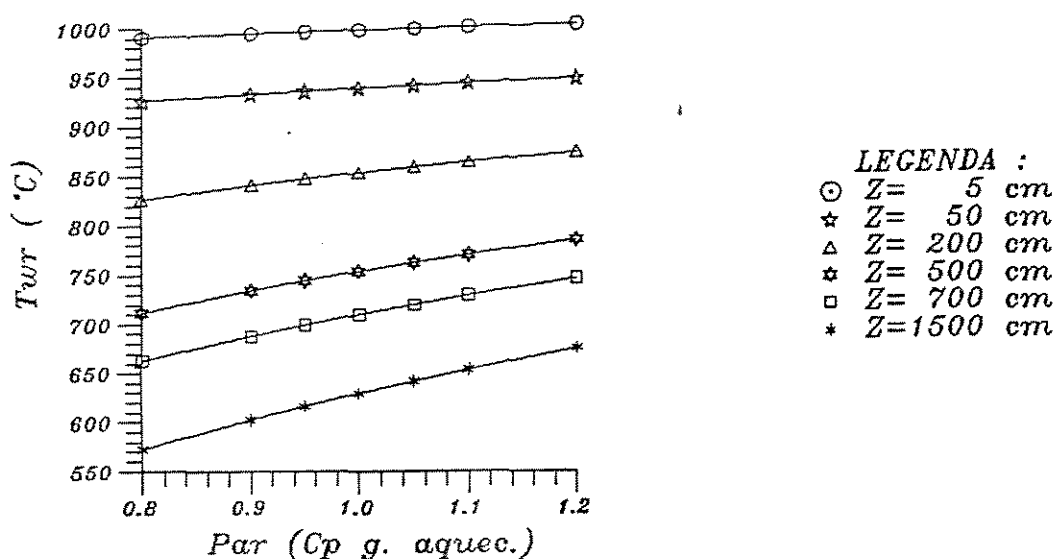


Figura 5.41: Variação da temperatura de parede do reator com o calor específico do gás de aquecimento

O fenômeno que ocorre na conversão na maioria dos parâmetros, aqui também se repete. Ou seja, quando a conversão atinge graus médios (entre 50 e 70%), notou-se as maiores influências na modificação dos parâmetros.

Ao considerar um valor menor para C_{p_c} é necessário um ΔT maior para que a quantidade de energia envolvida seja a mesma. Assim, T_C diminui, e na verdade o calor cedido pelo gás também. Com a queda do calor transmitido, diminui T_{w_r} , as temperaturas e as velocidades na zona de reação. O efeito de T_x prevalece e a conversão também diminui. Para 20% de decréscimo no valor de C_{p_c} , a conversão reduziu no máximo 38,4% e no final do reator 27,2% em relação ao valor do caso de referência.

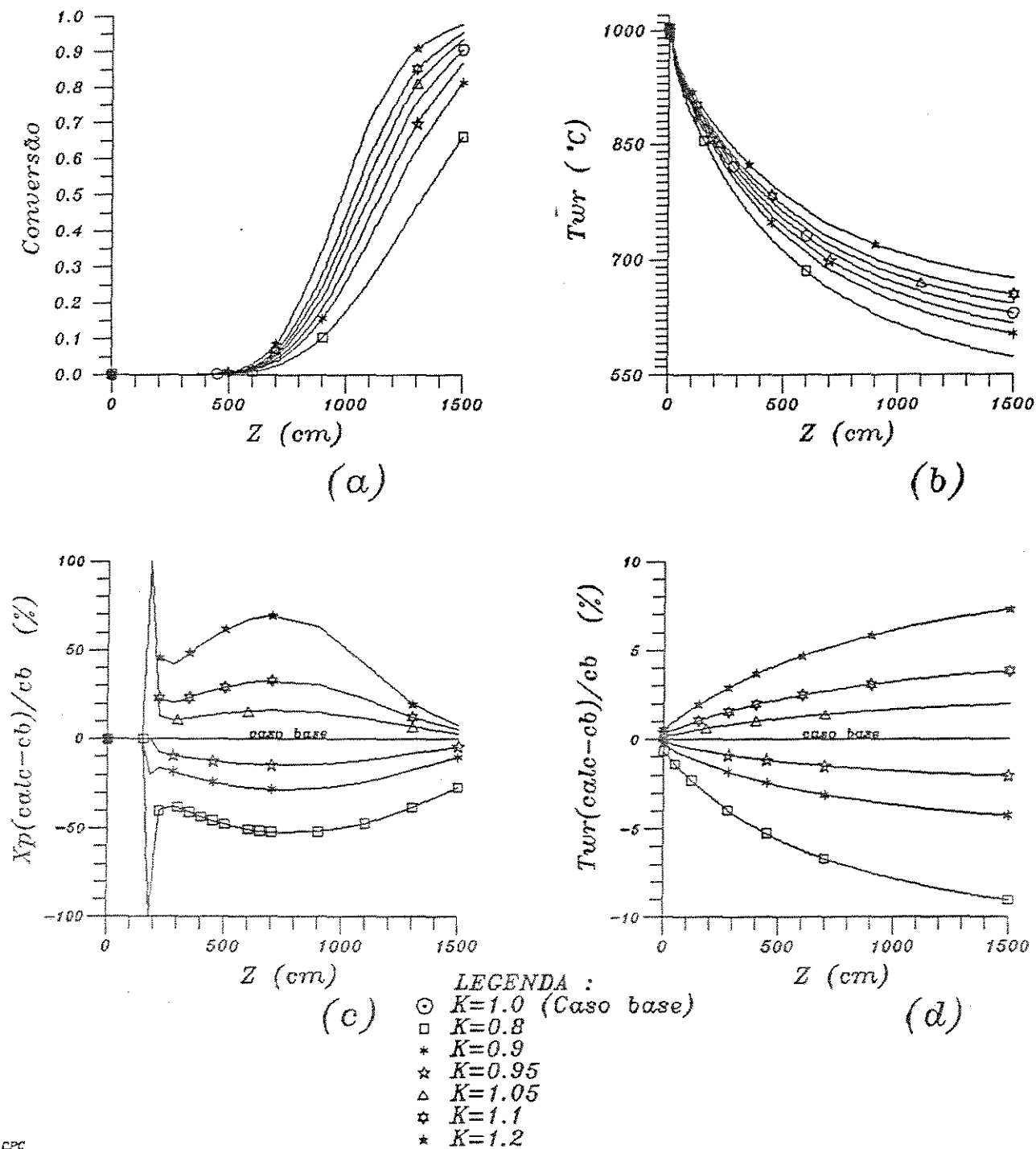


Figura 5.42: Influência da variação do calor específico do gás de aquecimento nos perfis
 (a) - da conversão; (b) - T_{wr} ; (c) - ΔX e (d) - ΔT_{wr} .

Calor específico do gás de arraste (C_{p_g})

Para julgar a influência deste parâmetro tem-se a tabela 5.55 e os gráficos 5.43 e 5.44. A sensibilidade maior ao C_{p_g} é na conversão. A temperatura de parede do reator (T_{w_r}) é pouco influenciada pelo C_{p_g} . Mesmo assim, diminuindo 20% do valor base inicial, a T_{w_r} no final do reator (onde é maior a diferença) terá um aumento de 2% . Na conversão o desvio máximo acompanha a ordem de grandeza do desvio do parâmetro.

Tabela 5.55: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : **Calor específico do gás de arraste**

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_f}
Zmaior	1300.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	900.0	1100.0	1500.0	1500.0
CPG08	.99901	1060.31	574.97	843.32	585.19	.92303	704.32	.59586	.02044	.02797	642.81	65.50
Relação	1.0000	1.0359	1.0401	1.0435	1.0365	1.0000	1.0099	1.1962	.9125	.7890	1.0214	1.0122
Zmaior	1300.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	900.0	1300.0	1500.0	1500.0
CPG09	.99899	1041.35	563.33	825.17	574.48	.92305	700.70	.54512	.02142	.01363	635.84	65.09
Relação	1.0000	1.0174	1.0191	1.0210	1.0176	1.0000	1.0048	1.0944	.9565	.7861	1.0104	1.0059
Zmaior	1300.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	700.0	1300.0	1500.0	1500.0
CPG095	.99898	1032.32	557.93	816.55	569.42	.92305	699.01	.52127	.03972	.01546	632.52	64.90
Relação	1.0000	1.0085	1.0093	1.0103	1.0086	1.0000	1.0023	1.0465	.9873	.8917	1.0051	1.0029
Zmaior	1300.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	900.0	1300.0	1500.0	1500.0
CPG105	.99896	1015.23	547.92	800.22	559.92	.92306	695.82	.73577	.02286	.01922	626.23	64.54
Relação	1.0000	.9918	.9912	.9901	.9918	1.0000	.9978	.9695	1.0208	1.1086	.9951	.9972
Zmaior	1300.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	900.0	1300.0	1500.0	1500.0
CPG110	.99895	1007.25	543.33	792.60	555.49	.92306	694.33	.71275	.02333	.02109	623.26	64.36
Relação	1.0000	.9840	.9829	.9807	.9839	1.0000	.9956	.9392	1.0414	1.2165	.9904	.9946
Zmaior	1300.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	900.0	1300.0	1500.0	1500.0
CPG120	.99893	992.28	534.86	778.25	547.17	.92307	691.50	.66716	.02424	.02479	617.65	64.04
Relação	1.0000	.9694	.9676	.9629	.9692	1.0000	.9916	.8791	1.0821	1.4295	.9815	.9896

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	CPG08	CPG09	CPG095	CPG105	CPG110	CPG120
ϵ	2.794D-05	1.364D-05	6.785D-06	-6.619D-06	-1.326D-05	-2.607D-05
v_g	1.783D+01	8.622D+00	4.247D+00	-4.079D+00	-8.002D+00	-1.545D+01
T_g	1.174D+01	5.656D+00	2.779D+00	-2.669D+00	-5.234D+00	-1.009D+01
v_x	1.642D+01	7.948D+00	3.918D+00	-3.766D+00	-7.394D+00	-1.429D+01
T_x	1.149D+01	5.558D+00	2.737D+00	-2.638D+00	-5.183D+00	-1.003D+01
Pressão	-7.439D-06	-3.239D-06	-1.782D-06	1.359D-06	2.164D-06	2.987D-06
T_C	3.831D+00	1.844D+00	9.064D-01	-8.743D-01	-1.719D+00	-3.331D+00
Conversão	3.732D-02	1.852D-02	9.267D-03	-8.996D-03	-1.778D-02	-3.479D-02
Querogênio	-1.158D-03	-5.768D-04	-3.112D-04	2.628D-04	5.241D-04	1.041D-03
Betume	-2.294D-03	-1.136D-03	-5.459D-04	5.696D-04	1.120D-03	2.177D-03
T_{w_r}	3.901D+00	1.885D+00	9.278D-01	8.988D-01	1.772D+00	3.445D+00
T_{w_f}	1.868D-01	9.013D-02	4.433D-02	4.289D-02	8.451D-02	1.641D-01
FDIF (%) :	17.614926	8.406145	5.379049	2.936249	5.901407	11.615418
CONV. FINAL	9.528D-01	9.321D-01	9.196D-01	8.905D-01	8.743D-01	8.393D-01
Relação(X_f)	1.052	1.029	1.015	.983	.965	.927
TRESID	2.384D+00	2.416D+00	2.432D+00	2.463D+00	2.477D+00	2.506D+00
Relação(Tr)	.974	.987	.994	1.006	1.012	1.024

TRESID = 2.448D+00 — CBASE2

Quando um gás de menor calor específico for usado, ter-se-á um aumento médio em T_g porque com a mesma quantidade de calor transferida, o ΔT do gás seria maior. Porém, acontece uma modificação na eficiência das trocas de calor em função do aumento médio da temperatura do corpo receptor; o que é comprovado pela alta de T_C . Assim T_x também se eleva e com isto aumenta-se a conversão utilizando menos energia dos gases de combustão.

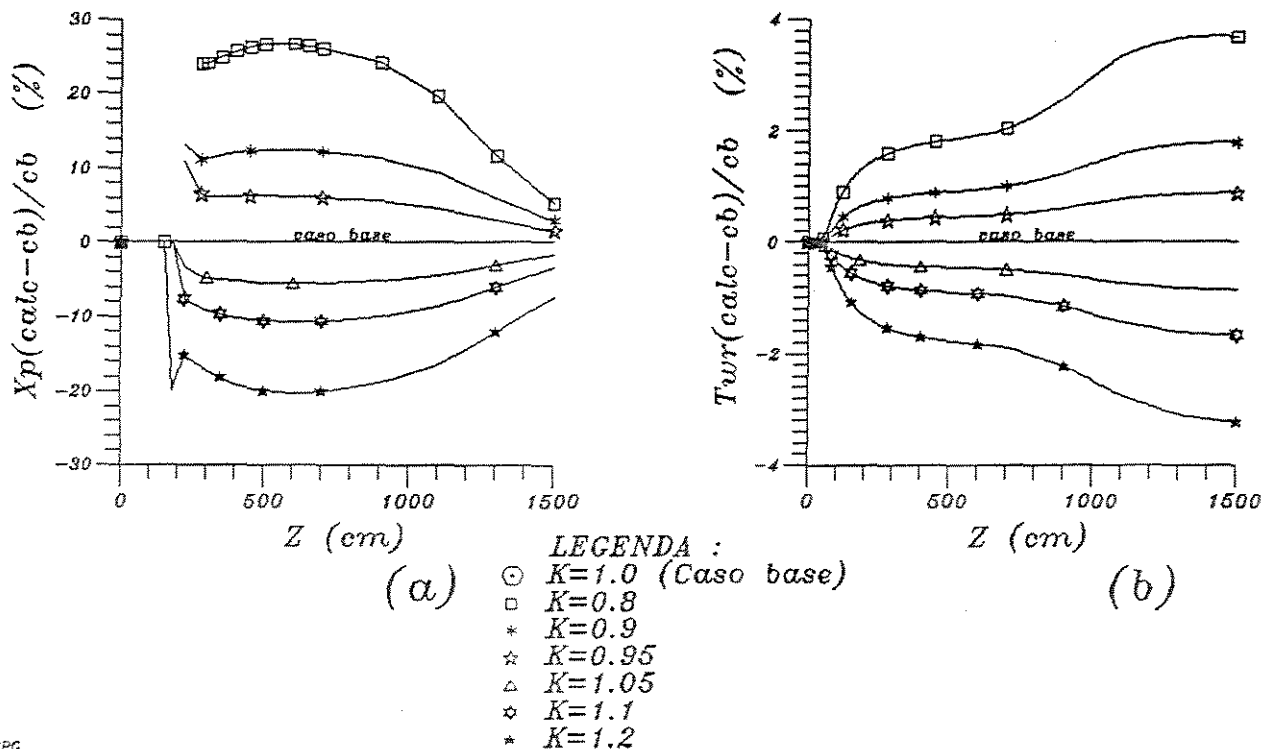


Figura 5.43: Influência da variação do calor específico do gás de arraste nos perfis (a) - de ΔX e (b) - ΔT_{wr}

Bem como o C_{p_c} , o C_{p_g} também depende dos dados de composição. Como a composição do reciclo foi determinada por análise, resta a preocupação com o fato de que o produto da reação pode ser desigual ao longo do reator, fato que prejudicaria a qualidade dos resultados.

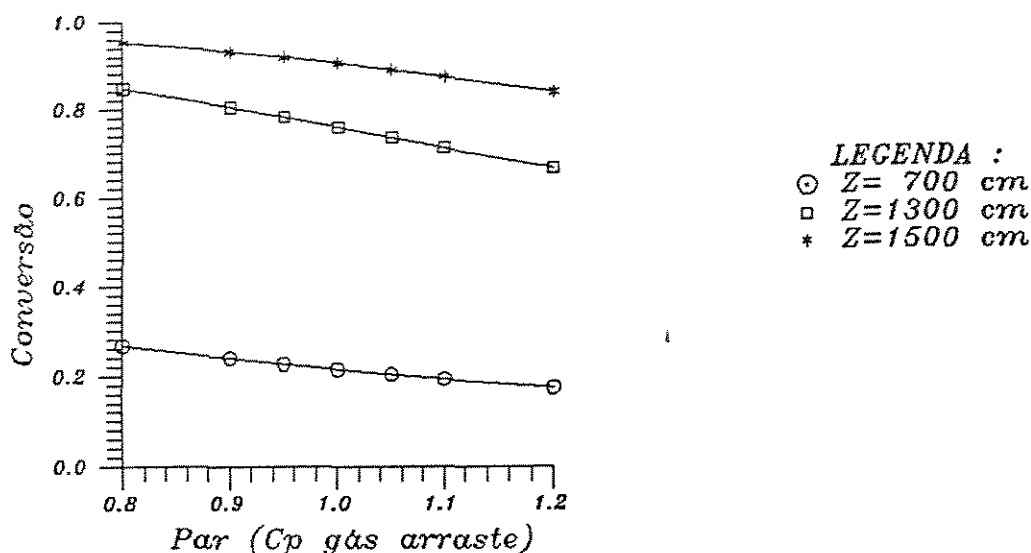


Figura 5.44: Variação da conversão com a calor específico do gás de arraste

Tudo leva a crer que a questão da otimização para o processo deve envolver as características do gás de arraste, computando também as modificações nas outras propriedades físicas. O gráfico 5.44, de X versus C_{p_g} , dá uma noção de como é possível melhorar a conversão com a escolha de um gás com menor calor específico. Neste mesmo gráfico, percebe-se que a variação na conversão é praticamente linear com C_{p_g} . Ao aumentar o comprimento do reator, dando conversões maiores, portanto, a inclinação com o eixo horizontal diminui, assim como o aspecto linear observado.

Constante da taxa da reação 2 (A_2)

Este fator exerce influência mais direta sobre a concentração do betume e a quantidade de produto formada. Com uma redução no seu valor a conversão diminui, e na região de reação a vazão molar de gás é menor que no caso base, porque uma parcela do betume permanece intacto na partícula. Com isto a velocidade de escoamento do gás é inferior e a temperatura é maior, por existir uma massa menor de gás escoando pelo reator. Tal aumento é pequeno porque há redução na eficiência da troca térmica com o gás pelo efeito da redução na velocidade.

Tabela 5.56: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : **Fator pré-exponencial para a reação 2**

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	1300.0	300.0	900.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	1100.0	1300.0	1100.0	1500.0	1500.0
K2O08	.99896	1016.38	502.28	800.31	542.52	.92412	697.45	.42938	.00493	.04182	629.46	64.72
Relação	1.0000	.9930	1.0015	.9902	.9988	1.0000	1.0001	.8620	.9931	1.1796	1.0002	1.0001
Zmaior	1100.0	300.0	900.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	1100.0	1300.0	1100.0	1500.0	1500.0
K2O09	.99888	1020.27	501.90	804.56	542.88	.92411	697.42	.46529	.00494	.03849	629.38	64.72
Relação	1.0000	.9968	1.0007	.9955	.9994	1.0000	1.0000	.9341	.9965	1.0858	1.0001	1.0001
Zmaior	1100.0	300.0	900.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	1100.0	1300.0	1100.0	1500.0	1500.0
K2O095	.99888	1021.99	501.71	806.44	543.04	.92411	697.40	.48205	.00495	.03694	629.35	64.72
Relação	1.0000	.9984	1.0003	.9978	.9997	1.0000	1.0000	.9678	.9983	1.0420	1.0001	1.0000
Zmaior	1100.0	300.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	1300.0	1100.0	1300.0	1100.0	1500.0	1500.0
K2O105	.99889	1025.06	501.37	809.84	511.12	.92410	697.37	.51346	.00497	.03403	629.28	64.71
Relação	1.0000	1.0014	.9997	1.0020	1.0003	1.0000	1.0000	1.0308	1.0017	.9599	1.0000	1.0000
Zmaior	1100.0	300.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	1300.0	1100.0	1300.0	1100.0	1500.0	1500.0
K2O110	.99889	1026.42	501.21	811.34	511.24	.92410	697.35	.52809	.00498	.03267	629.25	64.71
Relação	1.0000	1.0028	.9993	1.0039	1.0005	1.0000	1.0000	1.0602	1.0035	.9216	.9999	.9999
Zmaior	1100.0	100.0	900.0	1300.0	900.0	1100.0	1300.0	1100.0	1300.0	1100.0	1500.0	1500.0
K2O120	.99889	973.33	500.90	814.04	511.48	.92409	697.32	.55544	.00499	.03014	629.19	64.71
Relação	1.0000	1.0056	.9987	1.0072	1.0010	1.0000	.9999	1.1151	1.0070	.8501	.9998	.9999

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	K2O08	K2O09	K2O095	K2O105	K2O110	K2O120
ϵ	-4.062D-06	-1.925D-06	-1.035D-06	9.217D-07	1.732D-06	3.295D-06
v_g	-2.591D+00	-1.219D+00	-5.933D-01	5.621D-01	1.090D+00	2.065D+00
T_g	1.136D-01	4.968D-02	2.229D-02	-1.872D-02	-3.738D-02	-6.870D-02
v_x	-2.838D+00	-1.336D+00	-6.513D-01	6.172D-01	1.198D+00	2.273D+00
T_x	-1.353D-01	-5.757D-02	-2.838D-02	2.513D-02	4.410D-02	7.479D-02
Pressão	4.839D-06	2.304D-06	9.575D-07	-8.946D-07	-1.993D-06	-3.748D-06
T_C	2.648D-02	1.298D-02	5.994D-03	-5.830D-03	-1.214D-02	-2.417D-02
Conversão	-2.746D-02	-1.288D-02	-6.255D-03	5.904D-03	1.147D-02	2.172D-02
Querogênio	-6.459D-06	-3.283D-06	-1.470D-06	1.470D-06	3.156D-06	6.573D-06
Betume	2.547D-03	1.195D-03	5.805D-04	-5.474D-04	-1.064D-03	-2.016D-03
T_{w_r}	8.562D-03	4.218D-03	1.958D-03	1.879D-03	3.934D-03	7.870D-03
T_{w_i}	4.250D-04	2.091D-04	9.692D-05	9.313D-05	1.950D-04	3.899D-04
FDIF (%) :	7.274494	3.364230	1.740184	1.718310	3.588823	6.952983
CONV. FINAL	8.652D-01	8.882D-01	8.975D-01	9.127D-01	9.188D-01	9.289D-01
Relação(X_f)	.955	.981	.991	1.008	1.015	1.026
TRESID	2.459D+00	2.453D+00	2.450D+00	2.445D+00	2.443D+00	2.438D+00
Relação(Tr)	1.005	1.002	1.001	.999	.998	.996

TRESID = 2.448D+00 — CBASE2

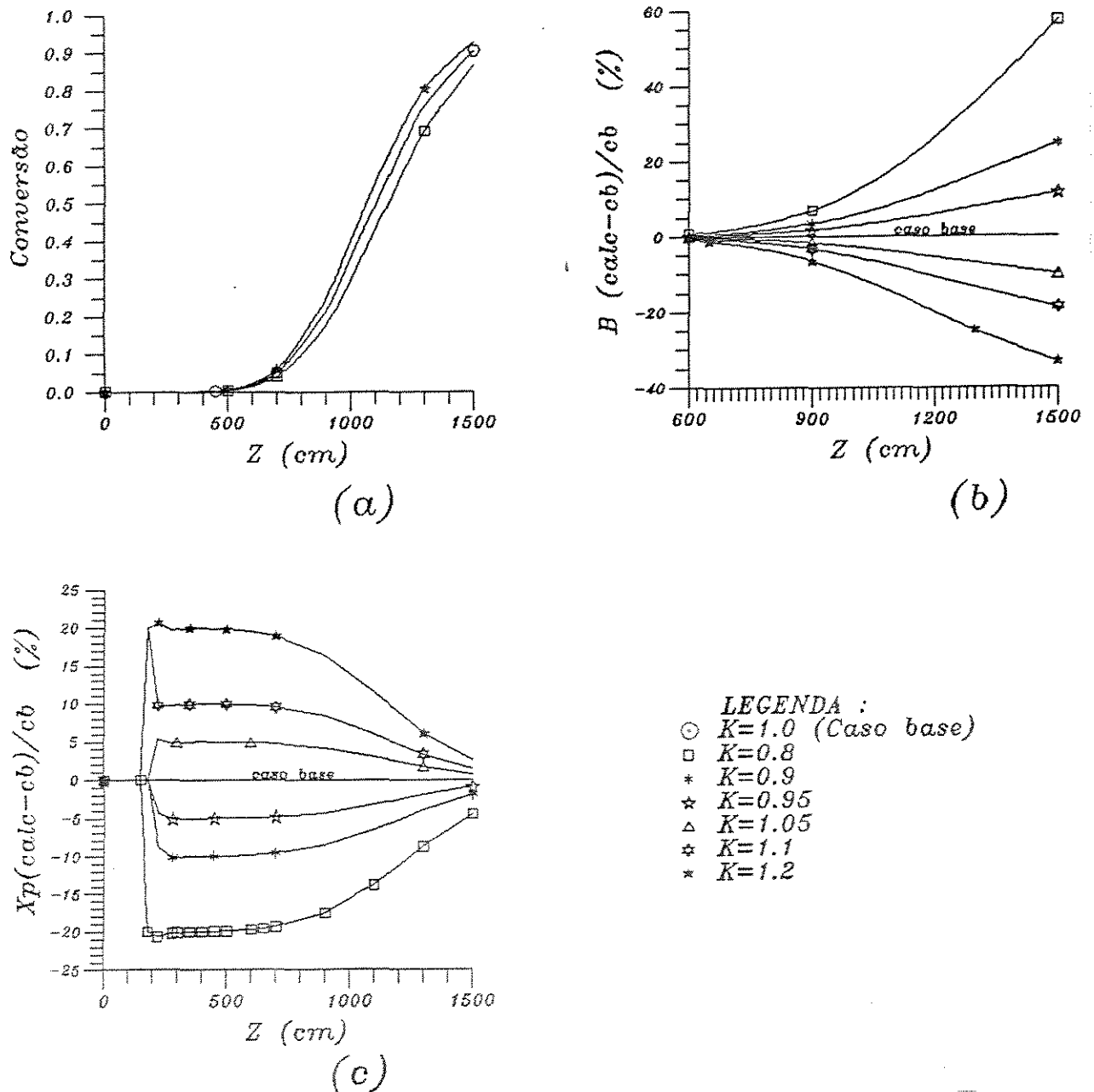


Figura 5.45: Influência da variação de A_2 nos perfis (a) - da conversão; (b) - ΔB ; e (c) - ΔX

A análise preliminar da tabela 5.56 e do gráfico 5.45 indica que a importância deste dado é secundária, pois as diferenças na conversão não são apreciáveis.

Calor de reação (ΔH_r)

A quantidade de energia necessária para produzir a transformação da matéria orgânica é pequena. A maior parte da energia fornecida ao sistema é usada no aumento de temperatura.

Como mostram a tabela 5.57 e a figura 5.46, desde que o valor de ΔH_r seja pequeno, uma redução neste parâmetro oferece pouca influência nos resultados observados, implicando numa quantidade de energia que fica disponível para aumentar a temperatura do xisto. Isto então reflete em T_g que aumenta assim como as velocidades e a conversão. O consumo da energia retirada do gás de aquecimento também diminui um pouco. O efeito sobre a conversão pode ser considerado pequeno e em T_w , é menor ainda.

Ao utilizar valores maiores (superestimados) de ΔH_r , notou-se variações mínimas. Quando foi usado um valor mil vezes maior para ΔH_r houve uma diminuição drástica na conversão, porque o sistema não poderia fornecer esta quantidade de calor, inclusive ocorrendo a redução de T_x .

Para um fator de dez vezes, é possível notar que quase todo calor fornecido ao xisto (para $Z = 900$) é consumido pela reação, e T_x fica constante.

Conclui-se, portanto, que o calor de reação é um dado que já tem uma boa estimativa, e que não oferece sensibilidade suficiente para prejudicar a validade dos resultados.

Tabela 5.57: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : **Calor de reação**

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_x	T_x	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	1300.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	1300.0	1500.0	1500.0
DH0.001	.99900	1048.56	567.77	830.69	581.24	.92301	699.58	.82074	.01038	.01220	637.37	65.13
Relação	1.0000	1.0244	1.0271	1.0278	1.0295	1.0000	1.0031	1.0815	.9458	.7034	1.0128	1.0064
Zmaior	1300.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	1300.0	1500.0	1500.0
DH0.01	.99899	1045.93	566.16	828.32	579.51	.92302	699.34	.81465	.01044	.01270	636.54	65.09
Relação	1.0000	1.0218	1.0242	1.0249	1.0265	1.0000	1.0028	1.0734	.9515	.7325	1.0115	1.0058
Zmaior	1300.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	1300.0	1500.0	1500.0
DH0.9	.99897	1025.92	554.17	810.31	566.15	.92305	697.58	.76505	.01092	.01683	630.09	64.75
Relação	1.0000	1.0023	1.0025	1.0026	1.0028	1.0000	1.0003	1.0081	.9949	.9705	1.0012	1.0006
Zmaior	1300.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	1300.0	1500.0	1500.0
DH1.1	.99897	1021.28	551.43	806.13	563.00	.92306	697.19	.75280	.01103	.01785	628.55	64.67
Relação	1.0000	.9978	.9975	.9974	.9972	1.0000	.9997	.9919	1.0051	1.0294	.9988	.9994
Zmaior	1300.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1500.0	1500.0
DH10	.99882	909.79	486.62	703.51	486.20	.92323	687.83	.41873	.00849	.04527	591.90	62.87
Relação	.9998	.8888	.8803	.8705	.8612	1.0002	.9863	.5518	1.7124	2.6109	.9406	.9715
Zmaior	1300.0	300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	1300.0	1500.0	1500.0
DH1000	.99833	701.59	337.70	498.79	330.60	.92429	663.53	.01600	.03155	.05947	534.95	59.90
Relação	.9994	.6854	.6109	.6172	.5856	1.0002	.9515	.0211	6.3610	3.4296	.8500	.9256

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	DH0.001	DH0.01	DH0.9	DH1.1	DH10	DH1000
ϵ	9.133D-06	8.152D-06	7.917D-07	-8.929D-07	-5.306D-05	-2.913D-04
v_g	7.947D+00	7.115D+00	7.500D-01	-7.401D-01	-3.922D+01	-1.457D+02
T_g	4.893D+00	4.377D+00	4.581D-01	-4.511D-01	-2.389D+01	-1.049D+02
v_x	6.926D+00	6.201D+00	6.534D-01	-6.455D-01	-3.470D+01	-1.328D+02
T_x	5.930D+00	5.311D+00	5.605D-01	-5.539D-01	-2.952D+01	-1.173D+02
Pressão	-1.261D-05	-1.139D-05	-1.332D-06	1.110D-06	5.788D-05	9.306D-05
T_C	6.760D-01	6.034D-01	6.208D-02	-6.119D-02	-3.085D+00	-1.265D+01
Conversão	1.906D-02	1.714D-02	1.867D-03	-1.859D-03	-1.072D-01	-2.554D-01
Querogénio	-2.362D-04	-2.126D-04	-2.269D-05	2.263D-05	1.492D-03	1.341D-02
Betume	-1.527D-03	-1.374D-03	-1.498D-04	1.492D-04	8.423D-03	1.021D-02
T_{w_r}	2.780D-01	2.485D-01	2.585D-02	2.549D-02	1.266D+00	4.908D+00
T_{w_i}	1.298D-02	1.160D-02	1.200D-03	1.182D-03	5.809D-02	2.270D-01
FDIF (%) :	1.270951	1.140085	.121642	.119682	6.626390	32.034777
CONV. FINAL	9.424D-01	9.393D-01	9.098D-01	9.013D-01	5.280D-01	1.821D-02
Relação(X_f)	1.041	1.037	1.005	.995	.583	.020
TRESID	2.420D+00	2.423D+00	2.445D+00	2.450D+00	2.594D+00	3.125D+00
Relação(Tr)	.989	.990	.999	1.001	1.060	1.277

TRESID = 2.448D+00 — CBASE2

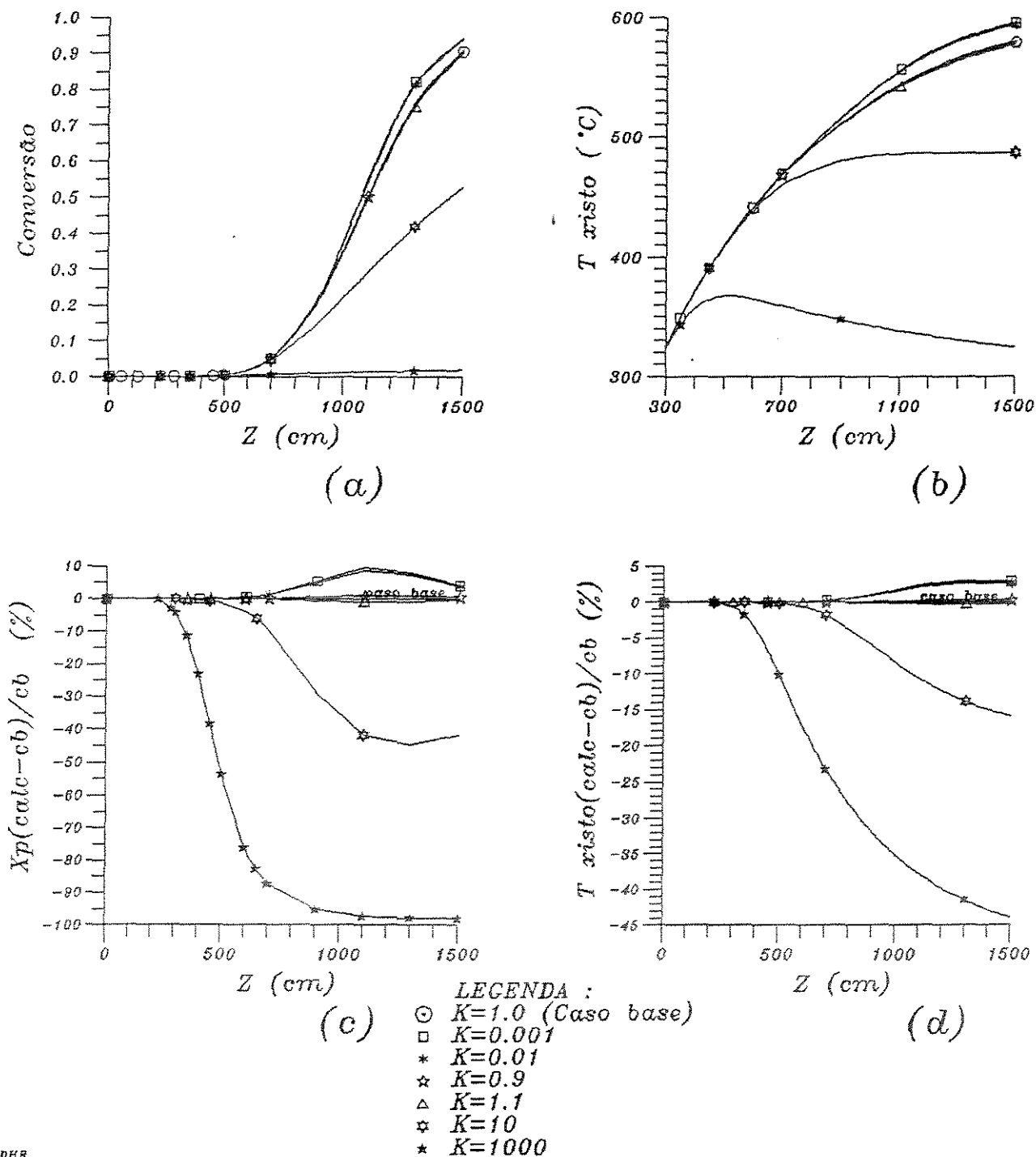


Figura 5.46: Influência da variação do calor de reação nos perfis (a) - da conversão; (b) - T_z ; (c) - ΔX e (d) - ΔT_z

5.4.2.2 Grupo II-B - Parâmetros de menor influência

Os parâmetros classificados neste grupo são:

Constante da taxa para a reação 1 (A_1)

Tabela 5.58: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : Fator pré-exponencial para a reação 1

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_z	T_z	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	1300.0	300.0	900.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	900.0	700.0	1500.0	1500.0
K1O08	.99896	1018.74	502.00	802.89	542.74	.92306	697.42	.71293	.02913	.04185	629.39	64.72
Relação	1.0000	.9953	1.0009	.9934	.9992	1.0000	1.0001	.9394	1.3005	.8798	1.0001	1.0001
Zmaior	1300.0	300.0	900.0	1300.0	1100.0	1300.0	1300.0	1300.0	900.0	700.0	1500.0	1500.0
K1O09	.99897	1021.40	501.76	805.80	542.99	.92306	697.40	.73838	.02554	.04482	629.35	64.72
Relação	1.0000	.9979	1.0004	.9970	.9996	1.0000	1.0000	.9729	1.1404	.9422	1.0001	1.0000
Zmaior	1100.0	300.0	900.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	1100.0	900.0	700.0	1500.0	1500.0
K1O095	.99888	1022.55	501.65	807.06	543.09	.92411	697.39	.48835	.02392	.04622	629.33	64.71
Relação	1.0000	.9990	1.0002	.9986	.9998	1.0000	1.0000	.9804	1.0679	.9716	1.0000	1.0000
Zmaior	1100.0	300.0	900.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	1100.0	700.0	700.0	1500.0	1500.0
K1O105	.99889	1024.53	501.44	809.24	543.27	.92410	697.37	.50717	.03879	.04887	629.30	64.71
Relação	1.0000	1.0009	.9998	1.0013	1.0002	1.0000	1.0000	1.0182	.9643	1.0273	1.0000	1.0000
Zmaior	1100.0	300.0	900.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	1100.0	700.0	700.0	1500.0	1500.0
K1O110	.99889	1025.38	501.36	810.19	543.34	.92410	697.37	.51561	.03741	.05012	629.28	64.71
Relação	1.0000	1.0018	.9996	1.0025	1.0003	1.0000	1.0000	1.0351	.9298	1.0537	.9999	1.0000
Zmaior	1100.0	300.0	900.0	1300.0	1100.0	1100.0	1300.0	1100.0	700.0	700.0	1500.0	1500.0
K1O120	.99889	1026.86	501.19	811.82	543.46	.92410	697.35	.53071	.03478	.05249	629.25	64.71
Relação	1.0000	1.0032	.9993	1.0045	1.0005	1.0000	1.0000	1.0655	.8645	1.1035	.9999	.9999

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	K1O08	K1O09	K1O095	K1O105	K1O110	K1O120
ϵ	-2.721D-06	-1.277D-06	-5.791D-07	5.387D-07	1.076D-06	1.968D-06
v_g	-1.732D+00	-7.946D-01	-3.800D-01	3.510D-01	6.761D-01	1.250D+00
T_g	9.163D-02	3.890D-02	1.860D-02	-1.579D-02	-2.895D-02	-5.294D-02
v_z	-1.897D+00	-8.707D-01	-4.166D-01	3.849D-01	7.419D-01	1.374D+00
T_z	-1.152D-01	-5.023D-02	-2.261D-02	2.003D-02	3.841D-02	6.529D-02
Pressão	3.268D-06	1.455D-06	7.645D-07	-7.304D-07	-1.151D-06	-2.335D-06
T_C	1.622D-02	7.524D-03	3.837D-03	-3.571D-03	-6.746D-03	-1.336D-02
Conversão	-1.852D-02	-8.467D-03	-4.051D-03	3.728D-03	7.168D-03	1.326D-02
Querogênio	3.776D-03	1.753D-03	8.461D-04	-7.911D-04	-1.532D-03	-2.882D-03
Betume	-2.063D-03	-9.700D-04	-4.715D-04	4.461D-04	8.691D-04	1.655D-03
T_{w_r}	5.068D-03	2.365D-03	1.213D-03	1.125D-03	2.116D-03	4.225D-03
T_{w_i}	2.537D-04	1.182D-04	6.056D-05	5.621D-05	1.056D-04	2.108D-04
FDIF (%) :	7.093872	3.409570	1.703309	1.574335	3.174634	6.125504
CONV. FINAL	8.714D-01	8.909D-01	8.988D-01	9.115D-01	9.167D-01	9.251D-01
Relação(X_f)	.962	.984	.992	1.007	1.012	1.022
TRESID	2.455D+00	2.451D+00	2.449D+00	2.446D+00	2.445D+00	2.442D+00
Relação(Tr)	1.003	1.001	1.001	.999	.999	.998

TRESID = 2.448D+00 — CBASE2

Supondo que a taxa seja um pouco menor que o valor calculado, a conversão também diminuirá com uma sensibilidade razoável (tabela 5.58). Neste caso, até a conversão final apresenta desvios de um caso para outro de 4% (20% abaixo). O fato da matéria orgânica não reagida ficar retida na partícula provoca efeitos pequenos em outras variáveis como diminuição em v_g , VX e T_x e aumento em T_g .

Coefficiente de arraste entre o xisto e o gás (C_D)

O coeficiente é estimado pelas equações mencionadas no capítulo 3, e o aspecto de aplicação genérica para estas pode envolver erros. A simulação sucessiva de mais 6 outras condições (tabela 5.59) para estimar esta variável permite fazer uma análise de viabilidade para o estudo de uma equação empírica específica para o processo estudado. A conclusão a que se chega, é que a sensibilidade das variáveis do modelo a este parâmetro é pequena, pois quando C_D vale 20% a menos que no caso base, o tempo de residência aumenta 5,6% (porque v_x cai) e a diferença absoluta máxima na conversão fica em 5,72% e a final em 1,4%.

Condutividade do refratário (k_{is})

Diminuindo k_{is} aumenta a conversão e a temperatura de parede do reator, usando menos energia do gás de aquecimento.

Comprimento médio para radiação (l_{mr})

Como a estimativa para l_{mr} é grosseira, preocupa-se em descobrir se esta pode invalidar os resultados dos testes 01, 02 e 03. Avaliando os resultados, verifica-se que todas as variáveis não tem sensibilidade apreciável ao valor adotado para o comprimento médio.

Coefficiente de troca de calor para o ambiente devido ao vento (h_{vento}^∞)

Dentro da faixa de variação investigada, este parâmetro só causa influência sensível na temperatura de parede externa do isolamento.

Coefficiente de troca de calor por convecção entre a parede do refratário e o gás de aquecimento (h_{CT})

A redução do valor do coeficiente influi na conversão, diminuindo-a, porque a temperatura da parede interna do refratário (T_{w_T}) diminui e assim também a quantidade de calor transferido para o reator. Com isto T_x é menor, o que justifica o efeito na conversão.

Supondo que a taxa seja um pouco menor que o valor calculado, a conversão também diminuirá com uma sensibilidade razoável (tabela 5.58). Neste caso, até a conversão final apresenta desvios de um caso para outro de 4% (20% abaixo). O fato da matéria orgânica não reagida ficar retida na partícula provoca efeitos pequenos em outras variáveis como diminuição em v_g , VX e T_x e aumento em T_g .

Coeficiente de arraste entre o xisto e o gás (C_D)

O coeficiente é estimado pelas equações mencionadas no capítulo 3, e o aspecto de aplicação genérica para estas pode envolver erros. A simulação sucessiva de mais 6 outras condições (tabela 5.59) para estimar esta variável permite fazer uma análise de viabilidade para o estudo de uma equação empírica específica para o processo estudado. A conclusão a que se chega, é que a sensibilidade das variáveis do modelo a este parâmetro é pequena, pois quando C_D vale 20% a menos que no caso base, o tempo de residência aumenta 5,6% (porque v_x cai) e a diferença absoluta máxima na conversão fica em 5,72% e a final em 1,4%.

Condutividade do refratário (k_{is})

Diminuindo k_{is} aumenta a conversão e a temperatura de parede do reator, usando menos energia do gás de aquecimento.

Comprimento médio para radiação (l_{mr})

Como a estimativa para l_{mr} é grosseira, preocupa-se em descobrir se esta pode invalidar os resultados dos testes 01, 02 e 03. Avaliando os resultados, verifica-se que todas as variáveis não tem sensibilidade apreciável ao valor adotado para o comprimento médio.

Coeficiente de troca de calor para o ambiente devido ao vento

(h_{vento}^{∞})

Dentro da faixa de variação investigada, este parâmetro só causa influência sensível na temperatura de parede externa do isolamento.

Coeficiente de troca de calor por convecção entre a parede do refratário e o gás de aquecimento (h_{CT})

A redução do valor do coeficiente influi na conversão, diminuindo-a, porque a temperatura da parede interna do refratário (T_{w_T}) diminui e assim também a quantidade de calor transferido para o reator. Com isto T_x é menor, o que justifica o efeito na conversão.

Tabela 5.59: Tabelas das maiores diferenças absolutas (a) e diferenças médias (b) —
Parâmetro analisado : Coeficiente de arraste gás-partícula

a) MAIORES DIFERENÇAS (absolutas) :												
Caso:	ϵ	v_g	T_g	v_z	T_z	Pressão	T_C	Conv.	Quer.	Bet.	T_{w_r}	T_{w_i}
Zmaior	115.0	100.0	1300.0	650.0	1300.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	600.0	270.0	510.566
CD-08	.99712	972.14	553.80	564.68	564.12	.92283	773.57	.52659	.03813	.04170	824.26	77.10
Relação	.9997	1.0044	1.0018	.9395	.9992	.9998	.9995	1.0572	.9478	1.0421	.9993	.9996
Zmaior	115.0	100.0	1300.0	650.0	1300.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	600.0	270.0	510.566
CD-09	.99726	969.81	553.26	584.39	564.35	.92295	773.78	.51083	.03929	.04077	824.58	77.11
Relação	.9999	1.0020	1.0008	.9723	.9996	.9999	.9998	1.0255	.9767	1.0188	.9997	.9998
Zmaior	110.0	100.0	1300.0	650.0	1300.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	650.0	277.887	539.434
CD-095	.99730	968.81	553.01	593.04	564.45	.92301	773.87	.50411	.03979	.04451	821.72	76.49
Relação	.9999	1.0009	1.0004	.9867	.9998	.9999	.9999	1.0121	.9889	1.0081	.9998	.9999
Zmaior	110.0	100.0	1300.0	650.0	1300.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	650.0	260.0	489.434
CD-105	.99740	967.07	552.56	608.40	564.66	.92310	774.03	.49252	.04064	.04383	828.85	77.60
Relação	1.0000	.9991	.9996	1.0123	1.0002	1.0000	1.0001	.9888	1.0101	.9926	1.0001	1.0001
Zmaior	110.0	100.0	1300.0	650.0	1300.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	650.0	260.0	500.0
CD-110	.99744	966.32	552.37	615.26	564.76	.92314	774.10	.48756	.04101	.04353	828.96	77.37
Relação	1.0001	.9983	.9992	1.0237	1.0004	1.0001	1.0002	.9788	1.0193	.9859	1.0003	1.0002
Zmaior	110.0	100.0	1300.0	650.0	1300.0	1300.0	900.0	1100.0	700.0	650.0	260.0	489.434
CD-120	.99751	964.92	551.97	627.60	564.93	.92320	774.22	.47851	.04167	.04301	829.17	77.62
Relação	1.0002	.9969	.9985	1.0442	1.0007	1.0002	1.0004	.9607	1.0356	.9740	1.0005	1.0003

b) DIFERENÇAS MÉDIAS :						
Variável	CD-08	CD-09	CD-095	CD-105	CD-110	CD-120
ϵ	-9.516D-05	-4.218D-05	-2.006D-05	1.785D-05	3.442D-05	6.277D-05
v_g	2.072D+00	9.361D-01	4.427D-01	-4.239D-01	-7.983D-01	-1.505D+00
T_g	6.376D-01	2.950D-01	1.400D-01	-1.421D-01	-2.653D-01	-5.149D-01
v_z	-3.273D+01	-1.500D+01	-7.204D+00	6.658D+00	1.287D+01	2.403D+01
T_z	-2.579D-03	-9.353D-03	-9.395D-03	-1.676D-03	1.233D-02	1.467D-02
Pressão	-1.346D-04	-5.951D-05	-2.785D-05	2.467D-05	4.675D-05	8.413D-05
T_C	-2.997D-01	-1.383D-01	-6.733D-02	6.012D-02	1.189D-01	2.199D-01
Conversão	1.124D-02	5.024D-03	2.371D-03	-2.204D-03	-4.167D-03	-7.738D-03
Querogênio	-1.088D-03	-4.896D-04	-2.328D-04	2.146D-04	4.100D-04	7.603D-04
Betume	4.832D-05	2.513D-05	1.369D-05	-1.062D-05	-2.431D-05	-4.428D-05
T_{w_r}	4.405D-01	2.041D-01	9.873D-02	9.079D-02	1.775D-01	3.327D-01
T_{w_i}	2.091D-02	9.691D-03	4.689D-03	4.314D-03	8.454D-03	1.581D-02
FDIF (%) :	9.976088	4.428420	2.005197	1.890018	3.630307	6.755519
CONV. FINAL	9.184D-01	9.115D-01	9.084D-01	9.030D-01	9.006D-01	8.961D-01
Relação(X_f)	1.014	1.006	1.003	.997	.994	.990
TRESID	2.586D+00	2.509D+00	2.477D+00	2.421D+00	2.397D+00	2.355D+00
Relação(Tr)	1.056	1.025	1.012	.989	.979	.962

TRESID = 2.448D+00 — CBASE2

Coeficiente de troca de calor por convecção entre a parede interna do reator e a suspensão gás-sólido (h_{susp})

Apesar de provocar um efeito muito pequeno, a redução neste parâmetro causa uma débil modificação nos balanços, que resultará em uma temperatura média do xisto maior, aumentando um pouco a conversão.

Coefficiente de troca de calor entre gás e xisto por convecção (h_{GX})

Pela inclusão dos efeitos da radiação entre parede e xisto, a temperatura do xisto média torna-se maior que a temperatura do gás média. O h_{GX} influi na diferença entre estas duas temperaturas. Ou seja, diminuindo o valor dele T_g média diminui, enquanto que T_x média aumenta. Esta diferença em T_x é pequena e a conversão aumenta muito pouco.

Diâmetro equivalente no escoamento do gás de aquecimento

O critério usado para o cálculo do diâmetro equivalente pouco influencia na conversão e em T_w .

Condutividade do gás de arraste (k_G)

Como a condutividade é utilizada no cálculo dos coeficientes de película, um k_G menor significará um coeficiente menor, diminuindo a transferência de calor, as temperaturas e as velocidades (do gás de reciclo e do xisto). Portanto a conversão segue a tendência de T_x e também abaixa. A temperatura de parede do reator aumenta fracamente.

Viscosidade do gás de aquecimento (μ_C)

Com a redução do valor calculado de μ_C a troca térmica do gás com o lado externo do reator é melhorada. Em decorrência da maior quantidade de calor transferido para o reator, as temperaturas do xisto e do gás são aumentadas, o mesmo ocorrendo com a conversão.

Viscosidade do gás de arraste (μ_G)

A sensibilidade deste parâmetro para o modelo é pequena, mas é possível identificar o que acontece quando a viscosidade do gás é menor que no caso base. O gás menos viscoso arrasta menos o xisto e a velocidade média das partículas cai bastante, aumentando o tempo de residência das partículas. A conversão aumenta por este fato e também porque o efeito em T_x não é significativo. A viscosidade influirá na troca entre o gás e o reator e entre gás e xisto, o que causará uma T_g média menor que no caso base. O consumo de energia do gás de combustão, aumenta levemente.

Condutividade do gás de aquecimento (k_C)

Efeito nas variáveis pela diminuição de k_C : aumenta T_C , menos energia é consumida do gás de combustão e diminuem as temperaturas e velocidades do gás e do xisto. Assim, T_w , e a conversão ficam menores, mas estas variações são pouco perceptíveis.

Coeficiente de película entre gás de combustão e parede do reator (h_{CR})

A diminuição de h_{CR} deixa T_C maior do que no caso de referência, pois menos calor é transferido causando T_w , T_g e T_x menores. Em virtude da densidade maior do gás de arraste as velocidades do xisto e do gás também diminuem, mas este efeito sobre o tempo de residência apenas atenua o efeito da temperatura sobre a conversão, que fica menor, portanto.

Coeficiente de atrito xisto-reator (f_{sf})

Este parâmetro não oferece sensibilidade para justificar a preocupação com os valores da correlação utilizada; ou seja, mesmo que fosse conseguido uma melhora de 10% na precisão dos valores, isso refletiria pouco nos resultados. Se o atrito for estimado menor, então a velocidade do xisto também diminui, o que fará distanciar T_x (que aumenta) de T_g (que diminui). A velocidade do gás fica menor, reforçando ainda mais a tese da redução do calor transferido. Pelo efeito no tempo de residência a conversão cai um pouco, porque neste caso o aumento em T_x é bem inferior ao da velocidade.

Coeficiente de atrito gás-parede (f_{gf})

Praticamente nenhuma variável teve alteração ao modificar este dado no nível de 20% (acima ou abaixo).

Peso molecular do gás de arraste (PM_{gas})

Verifica-se que a variação do peso molecular do gás de arraste altera fundamentalmente a fluidodinâmica, porém não influi em T_w , e a diferença na conversão é pequena.

Capítulo 6

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Conclusões

A discussão dos resultados é realizada com maiores detalhes no capítulo cinco, e uma análise mais profunda permite concluir-se que, quanto à validação dos testes propostos, o grau de aproximação com o sistema real foi excelente, ainda mais se for levado em consideração que os dados foram obtidos em um aparato em escala piloto. Observa-se, porém, que mais dados são necessários para avaliar o modelo, principalmente aqueles de corridas com baixa conversão. Para não criar problemas com a memória disponível e o tempo de processamento da simulação, algumas simplificações no modelo foram necessárias. Contudo, como o modelo é utilizado na análise paramétrica, a consideração do maior número possível de fenômenos dá maior confiabilidade nas análises. Pressupõe-se que o equilíbrio entre estes dois lados do problema tenha sido alcançado, apesar de não se considerar o tratamento cinético como o ideal para refletir a complexidade das reações envolvidas.

Quanto à identificação dos parâmetros, se conclui que o valor determinado através das simulações se ajusta bem ao conjunto de dados experimentais de todos os testes considerados. As energias de ativação para as reações (E_1 e E_2) e o fator de forma são os parâmetros mais importantes obtidos desta maneira. Os valores de E_1 e E_2 já haviam sido determinados anteriormente. Neste trabalho, determina-se um valor médio para F_{RX} , que pode não ser aplicável a situações muito diferentes das testadas aqui. Por isso, sugere-se um estudo específico para este parâmetro.

Os métodos numéricos utilizados são satisfatórios, porém existe o problema da necessidade de uma boa estimativa, pois dependendo destes valores as respostas podem não ser convergentes. A solução para esta questão consumiu grande quantidade de tempo até encontrar o conjunto ideal de valores, devido ao fato deste modelo ter um número elevado de variáveis. Observa-se ainda que, neste caso, o uso de um número maior de elementos por passo não altera a eficiência do método. De qualquer forma, a precisão, o tempo para convergir, a generalidade do método e a sua facilidade de aplicação são fatores positivos importantes a serem levados em consideração.

Pela análise realizada, com maiores detalhes, no capítulo 5 conclui-se que alguns dos dados coletados na planta requerem uma medida precisa, porque estes influem de forma marcante no resultado da simulação. É o caso das vazões de xisto (\dot{m}_{x0}), de gás de arraste (\dot{m}_{g0}) e de gás de aquecimento (\dot{m}_{comb}), da umidade inicial (Φ_0) e da pressão na base do reator (p_0). Os valores das emissividades e absorvidades (ϵ_R , α_R , ϵ_{Ri} , α_{Ri} , ϵ_X e α_X) também é importante, mas os valores usados são de confiança, pois foram determinados experimentalmente. Falta apenas determinar o valor da emissividade da parede interna do refratário, pois sua importância no resultado final também é grande. A velocidade das partículas e a temperatura dos gases quentes na base do reator são valores aproximados. É preciso que estes sejam medidos para aumentar a confiabilidade dos resultados. Uma solução menos dispendiosa seria utilizar, para a estimativa da velocidade das partículas, correlações em função das vazões de gás e xisto e das propriedades físicas, desenvolvidas especificamente para o sistema estudado.

A partir do que foi exposto no capítulo anterior, as condições de operação do reator tornam-se muito importantes para o estudo da otimização da planta piloto. A condição ideal desejada provavelmente corresponde a um equilíbrio entre o investimento fixo necessário e a quantidade líquida de energia produzida. As variáveis que devem fazer parte das investigações são:

- a) o comprimento e diâmetro do reator, porque revelam pelo estudo da sensibilidade paramétrica uma grande influência na conversão. E no caso de se prever uma modificação no diâmetro do reator ao longo de sua extensão, para aumentar o tempo de residência, o ponto ótimo da mudança também deve ser determinado;
- b) a vazão de xisto, que representa a capacidade do sistema, devendo ser a maior possível;

c) a vazão mássica de gás que deve ser suficiente para propiciar as condições idealizadas de transferência de calor ao xisto e para estabelecer o tempo de residência necessário;

d) a vazão dos gases de combustão que certamente tem relação direta com o custo operacional da planta;

e) a temperatura dos gases quentes na base do reator (T_{C0}) que deve ser dependente de outras variáveis relacionadas às características do queimador, e às características de resistência à temperatura dos materiais expostos (reator e refratário). Neste último aspecto, percebe-se a necessidade de limitar o valor possível para a temperatura do gás de aquecimento em função das temperaturas de parede máximas toleráveis.

Uma outra forma de englobar os custos fixos e os custos operacionais é minimizar o tempo de retorno do investimento.

Para realizar uma avaliação adequada a respeito da operação e controle da planta, seria necessário um modelo dinâmico. Contudo, através da observação das diferenças entre dois estados finais em regime permanente pode-se ter uma noção sobre as variáveis que devem ser monitoradas e controladas. Desta forma, selecionam-se as temperaturas inicial e final do gás de aquecimento, a pressão na entrada do reator, e a temperatura de parede do reator como as que oferecem boas condições pois variam significativamente frente a mudança nas principais condições operacionais. É o caso da temperatura de parede que altera quando, por exemplo, ocorre algum distúrbio no sistema de alimentação e as vazões de gás e xisto se alteram. Outra variável importante é a temperatura de saída dos gases, também chamada de temperatura de retortagem, que define a qualidade do óleo produzido.

Sugestões

- Como já era de se esperar, a cinética da reação de pirólise de xisto realmente necessita de uma revisão. Na análise paramétrica se mostrou que todos os dados que têm relação com a cinética são os que mais influem nos resultados das simulações.
- Prever o escalonamento do reator e verificar sua influência na conversão final.
- Utilizar um modelo bidimensional e comparar seus resultados com os obtidos neste trabalho
- Realizar a simulação global da planta, antecipando um estudo de otimização para o processo.
- Medir as temperaturas do xisto e do gás de arraste ao longo do reator, fornecendo mais variáveis para a confirmação dos resultados.
- Com o mesmo propósito do item anterior, obter os valores iniciais e finais para a velocidade das partículas e a pressão.
- Realizar testes práticos na planta piloto variando apenas uma condição operacional, assim como foi feito no estudo de análise paramétrica, confirmando os resultados desta fase.
- Estudar um fator de forma para a radiação em meios particulados
- Testar os métodos numéricos aqui utilizados em outros problemas identificando quando é vantagem usar mais de um elemento por passo.
- Avaliar o desempenho de outros métodos com o mesmo modelo.
- Elaborar um algoritmo que ajuste automaticamente os parâmetros do método numérico, ou seja, o tamanho do passo e o número de elementos por passo. Desta forma evita-se a intervenção do usuário para modificar estes dados.

APÊNDICE

Neste apêndice apresentam-se as listagens dos programas mencionados pelos capítulos três e quatro. Da forma como é apresentado, o programa pode ser compilado pelo FORTRAN 4.0 da Microsoft, no ambiente de um PC/XT ou AT ¹. No programa PLASOL.FOR, algumas linhas de comentários foram mantidas e correspondem à adaptação para o FORTRAN da Silicon Valey, que executa na placa FBFUSCO.

COND.FOR

```
*****
*                                COND.FOR                                *
*  Descr:                                                                *
*  Calculo das condicoes iniciais, usa o arquivo de dados pfor.        *
*                                                                           *
*****
      INTERFACE TO FUNCTION SYSTEM[C]
+      (STRING)
      INTEGER*2 SYSTEM
      CHARACTER*1 STRING[REFERENCE]
      END
*      DEFINICAO DAS VARIAVEIS
      implicit double precision (a-h,o-z)
      INTEGER*2 SYSTEM
      REAL*8 RGAS,GRAV,PI,SIGMA
      REAL*8 MEDMC,MEDMOL,KG
      REAL*8 KR,LF,LR,MCOMB,MXO,MGO,LER,LET
      CHARACTER*12 PROJN,DFN,DVN,PFN,ESTIN,PLPSS,AUXIL*3
      CHARACTER*100 CR1,CR2,CR4,CR5
      CHARACTER*14 NOME(27)
      CHARACTER*59 CR3
      REAL*8 P(12,10),PS(5)
      REAL*8 PMG(27),TCRG(27),VCRG(27),AG(27),BG(27),CG(27),DG(27)
& ,CY1(27),CY2(27)
      REAL*8 PMC(4),TCRC(4),VCRC(4),AC(4),BC(4),CC(4),DC(4),CYC(4)
```

¹PC/XT e AT são denominações comuns para os microcomputadores de 16 bits


```
      REAL*8 AO(10),BO(10)

*      COMMON BLOCKS
      PI=3.141592654D+0
      GRAV=980.665D+0
      RGAS=82.05D+0
      SIGMA=1.354891D-12
      ZERO=1D-7
      CTK=273.16D+0

*      LEITURA DE DADOS
      WRITE (*,'(A\)' )' <ESC>[2JNome arquivo-projeto do banco de dados : '
      READ(*,*)PROJN
      OPEN(4,FILE=PROJN,STATUS='OLD')
      READ(4,'(/,T50,A12)' )DFN
      READ(4,1000)DVN,PFN,ESTIN,PLPSS
      CLOSE(4)
1000 FORMAT(T50,A12)
      WRITE(*,*)'Lendo arquivo de dados fixos (' ,dfn,').....'
      OPEN(4,FILE=DFN,STATUS='OLD')
      READ(4,'(/,T70,D15.1)' )LR
      READ(4,1001)D1,D2,D3,D4,TIN,EMX,EMR,EPSR,EPST,ALPX,ALPRI,ALPR
      $,ALPT,EMIS
      CLOSE (4)
      TIN=TIN+CTK
1001 FORMAT(T70,D15.1)
      WRITE(*,*)'Lendo arquivo de dados variaveis (' ,dvn,')....'
      OPEN(4,FILE=DVN,STATUS='OLD')
      READ(4,'(/,T60,I2)' )NV
      READ(4,1002)MGO
      READ(4,1002)MXO
      READ(4,1002)YO
      READ(4,1002)UMIO
      READ(4,1002)DPART
      READ(4,1002)MCOMB
      READ(4,1002)APRM1
C      READ(4,1002)AP..... (P/ ANAL. PARAMETRICA)....
      CLOSE (4)
      MGO=MGO/3.6D+0
      MXO=MXO/3.6D+0
      MCOMB=MCOMB/3.6D+0
1002 FORMAT(T60,D15.1)
      WRITE(*,*)'Lendo arquivo de propriedades fisicas (' ,pfn,')....'
      OPEN(4,FILE='PFOR',STATUS='OLD')
      OPEN(5,FILE=PFN,STATUS='UNKNOWN')
      READ(4,'(A80/,A80/,A59,I2,/A100/,A100)' )CR1,CR2,CR3,NGASG,CR4,CR5
      WRITE(5,'(A80/,A80/,A59,I2,/A100/,A100)' )CR1,CR2,CR3,NGASG,CR4,CR5
```

```

      PMGS=0
      DO 101 I=1,NGASG
        READ(4,1003)NOME(I),PMG(I),TCRG(I),VCRG(I),AG(I),BG(I),CG(I),
        $DG(I),CY1(I)
        CY1(I)=CY1(I)/100.
        CY2(I)=CY2(I)/100.
        PMGS=PMGS+CY1(I)*PMG(I)
101  CONTINUE
      WRITE(*, '(' Ensaio Fisher: Oleo=' '\)')
      READ(*,*)OLEO
      WRITE(*, '(' Gas = ' '\)')
      READ(*,*)GAS
      DO 111 I=2,NGASG-1
        CY2(I)=CY1(I)*GAS/(GAS+OLEO*PMGS/300.)
        UMIGO=5.5D-2
        CY1(I)=CY1(I)*(1.-UMIGO)
111  CONTINUE
      CY1(NGASG)=0.
      CY1(1)=UMIGO
      CY2(1)=0.
      CY2(NGASG)=OLEO*PMGS/(GAS*300.+OLEO*PMGS)
      PMGAS=0.
      PMPRO=0.
      SM1=0.
      SM2=0.
      DO 110 I=1,NGASG
        WRITE(5,1006)NOME(I),PMG(I),TCRG(I),VCRG(I),AG(I),BG(I),CG(I),
        $DG(I),CY1(I)*100.,CY2(I)*100.
        AG(I)=AG(I)*0.239D+0
        BG(I)=BG(I)*0.239D+0
        CG(I)=CG(I)*0.239D+0
        DG(I)=DG(I)*0.239D+0
        PMGAS=PMGAS+CY1(I)*PMG(I)
        PMPRO=PMPRO+CY2(I)*PMG(I)
        SM1=SM1+CY1(I)
        SM2=SM2+CY2(I)
110  CONTINUE
      READ(4, '(A100,/A59,F15.10)')CR1,CR3,PM1
      WRITE(5, '(A100,/A59,F15.10)')CR1,CR3,PMGAS
      READ(4, '(A59,F15.10)')CR3,PM1
      WRITE(5, '(A59,F15.10)')CR3,PMPRO
1003  FORMAT (A14,F7.3,T23,F5.1,T31,F6.1,T39,D10.3,T50,D10.3,T61,D10.3
      $,T72,D10.3,T83,F6.3)
1006  FORMAT (A14,F7.3,T23,F5.1,T31,F6.1,T39,1P,SP,D10.3,T50,D10.3,T61
      $,D10.3,T72,D10.3,T83,OP,S,F6.3,T91,F6.3)

```

```
DO 102 I=1,12
  READ(4,'(A100)')CR1
102  WRITE(5,'(A100)')CR1
  CLOSE(4)
  CLOSE(5)
  WRITE(*,'('CONFIRA.....',D20.12,' e ',D20.12)')SM1,SM2
  WRITE(*,*)'Lendo arquivo de estimativas iniciais ('estín,').....'
  OPEN(4,FILE=ESTIN,STATUS='OLD')
  READ(4,*)CINI
  WRITE(*,*)'e também o plano de execução dos passos ('plpss,')...'
  OPEN(5,FILE=PLPSS,STATUS='OLD')
  READ(5,'(//,A3)')AUXIL
  GOTO 900
901  WRITE(*,*)'Erro no arq. 'estín,' ou no 'plpss,'..... <fim>'
  STOP
900  READ(5,910,END=901)CIN1,CFIN1,PASS,NEL,(PS(I),I=1,NEL)
  IF(CINI.LT.CIN1. OR .CINI.GE.CFIN1) GOTO 900
  TEST1=INT((CFIN1-CINI+1D-6)/PASS)*PASS+CINI-CFIN1
  IF (ABS(TEST1).GT.1D-6) THEN
    WRITE(*,*)'TEST1=',TEST1,CFIN1-CINI,PASS,CINI,CFIN1
    WRITE(*,*)'PROBLEMAS COM O PLANO DOS PASSOS'
    STOP
  ENDIF
  CLOSE(5)
910  FORMAT(D9.4,1X,D9.4,1X,D6.2,1X,I2,7(1X,D7.3))
  SM=0
  DO 91 I=1,NEL
91  SM=SM+PS(I)
  DO 92 I=1,NEL
92  PS(I)=PS(I)/SM
  CFIN=CINI+PASS
  LF=PASS
  CR2=LF
  WRITE(*,*)'OK'
  READ(4,1020)XXX,(P(1,I),I=1,NV)
  P(1,3)=P(1,3)+CTK
  P(1,5)=P(1,5)+CTK
  P(1,7)=P(1,7)+CTK
  READ(4,1021)XXX,(P(2,I),I=1,NV)
  READ(4,*)TEMPOR,DTEMPOR,FLAGEV
  CLOSE(4)
  DO 1015 I=1,NV
  P(2,I)=0.
  DO 1016 J=2,NEL+1
  NP1=(J-1)*2+1
```

```

      P(NP1,I)=P(1,I)
      P(NP1+1,I)=0.
1016 CONTINUE
      AO(I)=P(1,I)
      BO(I)=P(2,I)
1015 CONTINUE

*      CALCULOS PRELIMINARES
      NP=2*NEL+2
      N=NP*NV
      TOLRE=1D-8.
      TOLV=1D-8
      DP=DPART
      TEMPG=P(1,3)
      PRE=P(1,6)
      G=GRAV
      FMX=MXO
      FMA=MGO
      VELX=P(1,4)
      VELA=P(1,2)
      A=3.141592654*D1**2/4.
      ROXIS=(2.29*(1.-YO)+0.8*YO)/(1.-UMIO)
      MEDMOL=0.
      AMED=0.
      BMED=0.
      CMED=0.
      DMED=0.
      DO 2210 I=1,NGASG
      MEDMOL=MEDMOL+CY1(I)*PMG(I)
      AMED=AMED+CY1(I)*AG(I)
      BMED=BMED+CY1(I)*BG(I)
      CMED=CMED+CY1(I)*CG(I)
      DMED=DMED+CY1(I)*DG(I)
2210 CONTINUE
      AMED=AMED/MEDMOL
      BMED=BMED/MEDMOL
      CMED=CMED/MEDMOL
      DMED=DMED/MEDMOL
      CALL PROPGAS(NGASG,TEMPG,TEMPG,TCRG,VCRG,PMG,CY2,MEDMOL,PRE,AMED,
      $BMED,CMED,DMED,VISG,VISGP,KG,ROGA,CPG,AG,BG,CG,DG)
      CALL PROPGAS(NGASG,TEMPG,TEMPG,TCRG,VCRG,PMG,CY1,MEDMOL,PRE,AMED,
      $BMED,CMED,DMED,VISG,VISGP,KG,ROGA,CPG,AG,BG,CG,DG)
C' Estimariva para Vx: = VELX anterior
      REPE= DP*(VELA-VELX)*ROGA/VISG
9100      IF (REPE.LE.0.1) THEN
      VELT=DP**2*(ROXIS-ROGA)*G/18./VISG

```

```

        ELSE
        VELT=0.153*DP**1.14*(G*(ROXIS-ROGA))**0.71/VISG**0.43/ROGA**0.29
        ENDIF
        RET=ROGA*VELT*DP/VISG
9111  RET1=RET
        CD=(0.8+2.6*LOG(RET))*(24./RET+3.6/(RET)**0.313)
        VELT=SQRT(4.*G*DP*(ROXIS-ROGA)/3/ROGA/CD)
        RET=ROGA*VELT*DP/VISG
        IF (ABS(RET1-RET).GT.TOLRE) GOTO 9111
        WRITE(*,*) 'VELX=',VELX
        PL=1-FMX/ROXIS/A/VELX
        VELA=FMA/PL/A/ROGA
        VELP=VELA-VELT
        REP= DP*(VELA-VELP)*ROGA/VISG
        IF ((REPE.LE.0.1. AND .REP.GT.0.1). OR .(REPE.GT.0.1.
$AND .REP.LE.0.1)) THEN
        REPE=REP
        GOTO 9100
        ENDIF
        IF (ABS(REPE-REP).GT.TOLRE) THEN
        REPE=REP
        VELX=VELP
        GOTO 9111
        ENDIF
        IF (ABS(VELP-VELX).GT.TOLV) THEN
        VELX=VELP
        GOTO 9111
        ENDIF
        WRITE(*,*) 'RESULTADOS:'
        WRITE(*,*) 'POROSID=',PL
        WRITE(*,*) 'VELG=',VELA
        WRITE(*,*) 'VELX=',VELX
        P(1,1)=PL
        P(1,2)=VELA
        P(1,4)=VELX
*      Impressao dos resultados *****
        IUNITS=9
        OPEN(IUNITS,FILE=ESTIN,STATUS='UNKNOWN')
        WRITE(IUNITS,*)CINI
        P(1,3)=P(1,3)-CTK
        P(1,5)=P(1,5)-CTK
        P(1,7)=P(1,7)-CTK
        WRITE(IUNITS,1020)CINI,(P(1,I),I=1,NV)
        WRITE(IUNITS,1021)CINI,(P(2,I)/LF,I=1,NV)
        WRITE(IUNITS,*)TEMPOR,DTEMPOR/LF,FLAGEV

```

```

        CLOSE(IUNITS)
1112  CONTINUE
1020  FORMAT(F9.4,1X,F10.7,1X,4(F13.7,1X),F10.7,1X,F13.7,3(1X,F10.7))
1021  FORMAT(F9.4,10(1X,D13.7))
        END
        SUBROUTINE PROPGAS(NG,TEMP,TW,TCRIT,VCRIT,PM,CY,MEDMOL,PRE,AMED,
$BMED,CMED,DMED,  VISG,VISGP,KG,ROG,CPG,AG,BG,CG,DG)
        implicit double precision (a-h,o-z)
        REAL*8 TCRIT(27),CY(27),VCRIT(27),AG(27),BG(27),CG(27),DG(27)
        REAL*8 KCI,KCM,KG,MEDMOL,MIC,MIW,MU,MW,PM(27)
        FIG=0.
        PSC=0.
        FIW=0.
        ROG=0.
        KCM=0.
        PKC=0.
        DO 10 I=1,NG
        TRG=TEMP/TCRIT(I)
        TRW=TW/TCRIT(I)
        if (trg.gt.40. or . trg.lt.0) write(*,*)'trg=',trg,i,temp,ng
        MU=(1.9*TRG)**(0.9*0.4343*LOG(1.9*TRG))
        MW=(1.9*TRW)**(0.9*0.4343*LOG(1.9*TRW))
        MIC=33.3D-6*SQRT(PM(I)*TCRIT(I))/VCRIT(I)**(2./3.)*(1.058*TRG**
$0.645-0.261/MU)
        MIW=33.3D-6*SQRT(PM(I)*TCRIT(I))/VCRIT(I)**(2./3.)*(1.058*TRW**
$0.645-0.261/MW)
        FIG=FIG+CY(I)*SQRT(PM(I))*MIC
        FIW=FIW+CY(I)*SQRT(PM(I))*MIW
        PSC=PSC+CY(I)*SQRT(PM(I))
        CPG=(AG(I)+BG(I)*TEMP+CG(I)*TEMP**2+DG(I)*TEMP**3)/PM(I)
        KCI=MIC*(CPG+2.48/PM(I))
        KCM=KCM+CY(I)*KCI*PM(I)**(1./3.)
        PKC=PKC+CY(I)*PM(I)**(1./3.)
10  CONTINUE
        VISG=FIG/PSC
        VISGP=FIW/PSC
        KG=KCM/PKC
        ROG=MEDMOL*PRE/82.05/TEMP
        CPG=AMED+BMED*TEMP+CMED*TEMP**2+DMED*TEMP**3
        RETURN
        END

```

PLASOL.FOR

```

*****
*                                     PLASOL.FOR                                     *
* Descr:                                                                     *
*   Programa de simulacao do reator do processo Plasol. Requer               *
*   uso posterior do programa COND.FOR                                       *
* ATENCAO: As variaveis abaixo listadas devem ser substituidas pelos        *
*   respectivos valores ANTES DA COMPILACAO, elas estao em                   *
*   instrucoes PARAMETER....                                                 *
*                                                                              *
* NEM = numero de elementos MAXIMO                                           *
* NUMVA = numero de equacoes (VARIAVEIS) do modelo                         *
* NUNPAR = numero de parametros para cada variavel (= 2*NEM+2 )             *
* NEQM = numero total de parametros/equacoes (= N'UMEQ*N'UNPAR )           *
* NITMXD = numero maximo de iteracoes                                        *
*                                                                              *
* Descr:  Modificacoes atuais:                                               *
*   Sistema de radiacao (c/ absortividade)                                   *
*   Teste correl. stanton                                                    *
*   Layout renovado                                                          *
*   Execucao programada                                                      *
*   h vento estimado                                                         *
*   Redimensionamento facilitado das variaveis                             *
*                                                                              *
*****
      INTERFACE TO FUNCTION SYSTEM[C]
      +      (STRING)
      INTEGER*2 SYSTEM
      CHARACTER*1 STRING[REFERENCE]
      END

      PROGRAM PLASOL
*      DEFINICAO DAS VARIAVEIS
      implicit double precision (a-h,o-z)
      PARAMETER (NEM=1,NUMVA=10,NUMPAR=4,NEQM=40)
      INTEGER*2 SYSTEM
      REAL*8 RGAS,GRAV,PI,SIGMA
      REAL*8 KR,LF,LR,MCOMB,MXO,MGO,LER,LET, MEDMC
      CHARACTER*12 PROJN,DFN,DVN,PFN,ESTIN,PLPSS,AUXIL*3
      REAL*8 P(NUMPAR,NUMVA),PS(NEM)
      REAL*8 H(2,4),A(2,4),B(2,4)
      REAL*8 PMG(27),TCRG(27),VCRG(27),AG(27),BG(27),CG(27),DG(27)
      &,CY1(27),CY2(27)

```

```

      REAL*8 PMC(4),TCRC(4),VCRC(4),AC(4),BC(4),CC(4),DC(4),CYC(4)
      REAL*8 AO(NUMVA),BO(NUMVA)
      REAL*8 TWRP(NUMPAR),TWTF(NUMPAR),TWIF(NUMPAR),TWRI(NUMPAR)
*      COMMON BLOCKS
      COMMON H,A,B,P
      COMMON /PARM1/NV,NP
      COMMON /PARM2/AO,BO
      COMMON /PARM3/PS
      COMMON /TSISEQ/AEC,AT,ATT,AR,D1,D2,D3,D4,
&DEQC,DPART,EMR,EMX,EMIS,EPSR,EPST,ALPRI,ALPR,ALPT,ALPX,
&CORAMB,KR,PCO2,PH2O,LER,LET,
&LF,LR,MCOMB,MEDMC,MXO,NGASG,NGASC,TIN,YO,MGO
      COMMON /CONST/PI,GRAV,SIGMA,RGAS
      COMMON /DCPGAS/AG,BG,CG,DG,AC,BC,CC,DC
      COMMON /PROPG/TCRG,VCRG,PMG,CY1,CY2
      COMMON /PROPC/TCRC,VCRC,PMC,CYC,AMEDC,BMEDC,CMEDC,DMEDC
      COMMON /L/CR2,CINI
      COMMON /NITER/IT,KF1
      COMMON /RTW/TWRP,TWTF,TWIF,TWRI
      COMMON /XX/XX(NUMPAR)
      COMMON /EVAP/TEMPOR,DTEMPOR,FLAGEV,UMIO
      COMMON /PM/PMGAS,PMPRO
      COMMON /PARAME/APRM1,APRM2,APRM3,APRM4,APRM5
C$system
C***** Inicializacao da biblioteca e do ambiente grafico
C      call load_graph_lib

*      CONSTANTES
      PI=3.141592654
      GRAV=980.665
      RGAS=82.05
      SIGMA=1.354891D-12
      CTK=273.16

*      LEITURA DE DADOS
      WRITE (*,'(A\)'')' <ESC>[2JNome arquivo-projeto do banco de dados :
      READ(*,*)PROJN
      OPEN(4,FILE=PROJN,STATUS='OLD')
      READ(4,'(/,T50,A12)'')DFN
      READ(4,1000)DVN,PFN,ESTIN,PLPSS
      CLOSE(4)
1000 FORMAT(T50,A12)
      WRITE(*,*)'Lendo arquivo de dados fixos ('',dfn,'').....'
      OPEN(4,FILE=DFN,STATUS='OLD')
      READ(4,'(/,T70,D15.1)'')LR
      READ(4,1001)D1,D2,D3,D4,TIN,EMX,EMR,EPSR,EPST,ALPX,ALPRI,ALPR

```



```
    $,ALPT,EMIS
    CLOSE (4)
    TIN=TIN+273.16
1001 FORMAT(T70,D15.1)
    WRITE(*,*)'Lendo arquivo de dados variaveis (',dvn,')....'
    OPEN(4,FILE=DVN,STATUS='OLD')
    READ(4,'(/,T60,I2,')')NV
    READ(4,1002)MGO
    READ(4,1002)MXO
    READ(4,1002)YO
    READ(4,1002)UMIO
    READ(4,1002)DPART
    READ(4,1002)MCOMB
    READ(4,1002)APRM1
    CLOSE (4)
    MGO=MGO/3.6
    MXO=MXO/3.6
    MCOMB=MCOMB/3.6
1002 FORMAT(T60,D15.1)
    WRITE(*,*)'Lendo arquivo de propriedades fisicas (',pfn,')....'
    OPEN(4,FILE=PFN,STATUS='OLD')
    READ(4,'(//,T60,I2,//,A)')NGASG,AUXIL
    DO 101 I=1,NGASG
    READ(4,1006)PMG(I),TCRG(I),VCRG(I),AG(I),BG(I),CG(I),DG(I),CY1(I),
    $CY2(I)
    CY1(I)=CY1(I)/100
    CY2(I)=CY2(I)/100
    AG(I)=AG(I)*0.239
    BG(I)=BG(I)*0.239
    CG(I)=CG(I)*0.239
101 DG(I)=DG(I)*0.239
    READ(4,'(/,T60,D15.1)')PMGAS
    READ(4,1002)PMPRD
1003 FORMAT (T15,F6.3,T23,F5.1,T31,F5.2,T39,F9.3,T50,F9.3,T61,F9.3,T72,
    $F9.3,T83,F6.3)
1006 FORMAT (T15,F6.3,T23,F5.1,T31,F6.1,T39,D10.3,T50,D10.3,T61,D10.3
    $,T72,D10.3,T83,F6.3,T91,F6.3)
    READ(4,'(//,T60,I2,//,A)')NGASC,AUXIL
    DO 102 I=1,NGASC
    READ(4,1003)PMC(I),TCRC(I),VCRC(I),AC(I),BC(I),CC(I),DC(I),CYC(I)
    CYC(I)=CYC(I)/100.
    AC(I)=AC(I)*0.239
    BC(I)=BC(I)*0.239
    CC(I)=CC(I)*0.239
102 DC(I)=DC(I)*0.239
```

```

      READ(4, '(/.T60,D15.1)')KR
      READ(4,1002)CORAMB
      CLOSE(4)
      WRITE(*,*)'Lendo arquivo de estimativas iniciais ('.estin,').....'
      OPEN(4,FILE=ESTIN,STATUS='OLD')
C      READ(4, '(A3)')AUXIL
      READ(4,*)CINI
      WRITE(*,*)'e tambem o plano de execucao dos passos ('.plpss,')...'
      OPEN(5,FILE=PLPSS,STATUS='OLD')
      READ(5, '(//,A3)')AUXIL
      GOTO 900
901  WRITE(*,*)'Erro no arq. '.estin,' ou no '.plpss,'..... <fim>'
      CLOSE(11)
      CLOSE(12)
      CLOSE(13)
      CLOSE(14)
      STOP
900  READ(5,910,END=901)CIN1,CFIN1,PASS,NEL,(PS(I),I=1,NEL)
      IF(CINI.LT.CIN1. OR .CINI.GE.CFIN1) GOTO 900
      TEST1=INT((CFIN1-CINI+1D-6)/PASS)*PASS+CINI-CFIN1
      IF (ABS(TEST1).GT.1D-6) THEN
          WRITE(*,*)'TEST1=',TEST1,CFIN1-CINI,PASS,CINI,CFIN1
          WRITE(*,*)'PROBLEMAS COM O PLANO DOS PASSOS'
      CLOSE(11)
      CLOSE(12)
      CLOSE(13)
      CLOSE(14)
      STOP
      ENDIF
      CLOSE(5)
910  FORMAT(D9.4,1X,D9.4,1X,D6.2,1X,I2,10(1X,D7.3))
      SM=0
      DO 91 I=1,NEL
91  SM=SM+PS(I)
      DO 92 I=1,NEL
92  PS(I)=PS(I)/SM
      CFIN=CINI+PASS
      LF=PASS
      CR2=LF
      WRITE(*,*)'OK'
      READ(4,1020)XXX,(P(1,I),I=1,NV)
      P(1,3)=P(1,3)+CTK
      P(1,5)=P(1,5)+CTK
      P(1,7)=P(1,7)+CTK
      READ(4,1021)XXX,(P(2,I),I=1,NV)

```

```

        READ(4,*)TEMPOR,DTEMPOR,FLAGEV
        CLOSE(4)
        IF (FLAGEV.EQ.1)THEN
        TMP=TEMPOR
        TEMPOR=P(1,5)
        P(1,5)=TMP
        TMP=DTEMPOR
        DTEMPOR=P(2,5)
        P(2,5)=TMP
        ENDIF
        DO 1015 I=1,NV
        P(2,I)=0.
        DO 1016 J=2,NEL+1
        NP1=(J-1)*2+1
        P(NP1,I)=P(1,I)
        P(NP1+1,I)=0.
1016 CONTINUE
        AO(I)=P(1,I)
        BO(I)=P(2,I)
1015 CONTINUE

*          CALCULOS PRELIMINARES
        I=SYSTEM('TM START /LOG >>ITERA.RES'//CHAR(0))
118      NP=2*NEL+2
        N=NP*NV
        AT=PI*D1**2/4.
        ATT=PI*D3
        AR=PI*D2
        AEC=PI*(D3**2-D2**2)/4.
        DEQC=(D3-D2)
        LER=3.6/4.*(D3**2-D2**2)/D2
        LET=3.6/4.*(D3**2-D2**2)/D3
        PC02=CYC(2)
        PH20=CYC(1)
        MEDMC=0.
        AMEDC=0.
        BMEDC=0.
        CMEDC=0.
        DMEDC=0.
        DO 20 I=1,NGASC
        MEDMC=MEDMC+CYC(I)*PMC(I)
        AMEDC=AMEDC+CYC(I)*AC(I)
        BMEDC=BMEDC+CYC(I)*BC(I)
        CMEDC=CMEDC+CYC(I)*CC(I)
        DMEDC=DMEDC+CYC(I)*DC(I)
20 CONTINUE

```

```

    AMEDC=AMEDC/MEDMC
    BMEDC=BMEDC/MEDMC
    CMEDC=CMEDC/MEDMC
    DMEDC=DMEDC/MEDMC
    EPTR=1/EPST+D2/D3*(1/EPST-1)
    OPEN(11,FILE='ITERA.RES')
104  READ(11,'(A3/)',END=105)AUXIL
    GOTO 104
105  BACKSPACE 11
    OPEN(13,FILE='DERIV.RES')
106  READ(13,'(A3/)',END=107)AUXIL
    GOTO 106
107  BACKSPACE 13
    OPEN(12,FILE='VARI.RES')
120  READ(12,'(A3/)',END=121)AUXIL
    GOTO 120
121  BACKSPACE 12
    OPEN(14,FILE='TW.RES')
112  READ(14,'(A3/)',END=113)AUXIL
    GOTO 112
113  BACKSPACE 14

*      RESOLUCAO PELO METODO NUMERICO
    IT=1
    CALL COEFPH(1D-7,1D-8,KALKJ)
*      Impressao dos resultados *****
    WRITE(11,'(F9.4,5X,F9.4,5X,I3,5X)')CINI,CFIN,IT
C      I=SYSTEM('TM STOP START /N /LOG >>ITERA.RES'//CHAR(0))
    IF(KF1.NE.0)WRITE (*,'('' RESULTADO FINAL -'',I3,''' iteracoes: ''
    $)')IT
    IT=1
    IF (FLAGEV.EQ.1)THEN
    OPEN(8,FILE='UMID.RES')
108  READ(8,'(A3/)',END=109)AUXIL
    GOTO 108
109  BACKSPACE 8
    XXX=0.
    DO 54 J=1,NP,2
        WRITE(8,1111) LF*XXX+CINI,P(J,5),P(J+1,5)/LF
    IF (J.LT.NP-1) XXX=XXX+PS((J+1)/2)
54  CONTINUE
    CLOSE(8)
    ENDIF
    XXX=0.
    DO 55 J=1,NP,2
    IF (FLAGEV.EQ.1)THEN

```

```

        V5=TEMPOR-CTK
        DV5=0.
    ELSE
        V5=P(J,5)-CTK
        DV5=P(J+1,5)/LF
    ENDIF
    WRITE(12,1020) LF*XXX+CINI,P(J,1),P(J,2),P(J,3)-CTK,P(J,4),
$V5,P(J,6),P(J,7)-CTK,P(J,8),P(J,9),P(J,10)
    WRITE(13,1021) LF*XXX+CINI,(P(J+1,I)/LF,I=1,4),DV5,
$(P(J+1,I)/LF,I=6,10)
    IF (J.LT.NP-1) XXX=XXX+PS((J+1)/2)
55 CONTINUE
1111  FORMAT(F9.4,3X,D15.7,4X,D15.7)
1020  FORMAT(F9.4,1X,F10.7,1X,4(F13.7,1X),F10.7,1X,F13.7,3(1X,F10.7))
1021  FORMAT(F9.4,10(1X,D13.7))
    IF(KF1.NE.0)WRITE(*,*)' <ESC>[23;1H'
C    DEVE SER NP-1 se USO A CONDICAÇÃO DE CONTINUIDADE NA DERIVADA
    DO 1113 I=2,NP
        IF(KF1.NE.0)WRITE(*,')(F9.4,2X,F15.7,2X,F15.7,2X,F15.7,2X,F15.7)')
$CINI+LF*XX(I)
$,TWRF(I)-273.16,TWTF(I)-273.16,TWIF(I)-273.16,TWRI(I)-273.16
1113  WRITE(14,')(F9.4,2X,F15.7,2X,F15.7,2X,F15.7,2X,F15.7)')CINI+LF*XX
$(I),TWRF(I)-273.16,TWTF(I)-273.16,TWIF(I)-273.16,TWRI(I)-273.16
    IF (FLAGEV.EQ.1)THEN
        TMP=TEMPOR
        TEMPOR=P(NP-1,5)
        P(NP-1,5)=TMP
        TMP=DTEMPOR
        DTEMPOR=P(NP,5)
        P(NP,5)=TMP
    ENDIF
    IF (FLAGEV.EQ.0. AND .TEMPOR.NE.0. AND .ABS(P(NP-1,5)-373.16).
$    LT.1) THEN
        FLAGEV=1.
        KALKJ=1
    ENDIF
    IF (FLAGEV.EQ.1. AND .ABS(TEMPOR).LT.5E-3) THEN
        FLAGEV=0.
        TEMPOR=0.
        DTEMPOR=0.
        KALKJ=1
    ENDIF
    IUNITS=9
    OPEN(IUNITS,FILE=ESTIN,STATUS='UNKNOWN')
    WRITE(IUNITS,*)CFIN

```

```
P(NP-1,3)=P(NP-1,3)-CTK
P(NP-1,5)=P(NP-1,5)-CTK
P(NP-1,7)=P(NP-1,7)-CTK
WRITE(IUNITS,1020)CFIN,(P(NP-1,I),I=1,NV)
WRITE(IUNITS,1021)CFIN,(P(NP,I)/LF,I=1,NV)
WRITE(IUNITS,*)TEMPOR,DTEMPOR/LF,FLAGEV
CLOSE(IUNITS)
IF (CFIN.GE.LR) THEN
CLOSE(11)
CLOSE(12)
CLOSE(13)
CLOSE(14)
STOP
ENDIF
OPEN(4,FILE=ESTIN,STATUS='OLD')
READ(4,*)CINI
TMP=CINI
OPEN(5,FILE=PLPSS,STATUS='OLD')
READ(5,'(//,A3)')AUXIL
GOTO 9000
9010 WRITE(*,*)'Erro no arq. ',estin,' ou no ',plpss,'..... <fim>'
CLOSE(11)
CLOSE(12)
CLOSE(13)
CLOSE(14)
STOP
9000 READ(5,910,END=9010)CINI,CFIN1,PASS,NEL,(PS(I),I=1,NEL)
IF(CINI.LT.CINI1. OR .CINI.GE.CFIN1) GOTO 9000
TEST1=INT((CFIN1-CINI+1D-6)/PASS)*PASS+CINI-CFIN1
IF (ABS(TEST1).GT.1D-6) THEN
WRITE(*,*)'PROBLEMAS COM O PLANO DOS PASSOS'
WRITE(*,*)'TEST1=',TEST1,CFIN1-CINI,PASS,CINI,CFIN1
CLOSE(11)
CLOSE(12)
CLOSE(13)
CLOSE(14)
STOP
ENDIF
CLOSE(5)
IF (TMP.NE.CINI) KALKJ=1
SM=0
DO 991 I=1,NEL
991 SM=SM+PS(I)
DO 992 I=1,NEL
992 PS(I)=PS(I)/SM
```

```

      CFIN=CINI+PASS
      LF=PASS
      CR2=LF
      READ(4,1020)XXX,(P(1,I),I=1,NV)
      P(1,3)=P(1,3)+CTK
      P(1,5)=P(1,5)+CTK
      P(1,7)=P(1,7)+CTK
      READ(4,1021)XXX,(P(2,I),I=1,NV)
      READ(4,*)TEMPOR,DTEMPOR,FLAGEV
      CLOSE(4)
      IF (FLAGEV.EQ.1)THEN
        TMP=TEMPOR
        TEMPOR=P(1,5)
        P(1,5)=TMP
        TMP=DTEMPOR
        DTEMPOR=P(2,5)
        P(2,5)=TMP
      ENDIF
      DO 115 I=1,NV
        P(2,I)=0.
        DO 116 J=2,NEL+1
          NP1=(J-1)*2+1
          P(NP1,I)=P(1,I)
          P(NP1+1,I)=0.
116  CONTINUE
        AO(I)=P(1,I)
        BO(I)=P(2,I)
115  CONTINUE
      IF(KF1.NE.0)WRITE(*,*)' <ESC>[2J'
C      WRITE(*,')('' CALCULO DO PROXIMO PASSO de '',F9.4,'' ate '',F9.4
C      $)')CINI,CFIN
      GOTO 118
      END

```

```

*****
*
*   Programa para resolucao de sistemas de equacoes diferenciais ordi- *
*   narias usando o metodo da colocacao ortogonal em elementos finitos, *
*   onde as funcoes tentativa sao polinomios de Hermite.                *
*
*   Programador: Carlos Alberto Gontarski ----- em 17/12/89 ----
*
*****
      SUBROUTINE COEFPH(T1,T2,KALKJ)
      implicit double precision (a-h,o-z)
      PARAMETER (NEM=1,NUMVA=10,NUMPAR=4,NEQM=40)

```

```

      REAL*8  H(2,4),A(2,4),B(2,4),P(NUMPAR,NUMVA),XX(NUMPAR),PS(NEM)
      $,U(4),FUN(NUMVA)
      REAL*8  IJ(NEQM,NEQM)
      COMMON H,A,B,P
      COMMON /PARM1/NV,NP
      COMMON /PARM3/PS
      COMMON /XX/XX
      N=NV*NP

```

C ***** Carga das matrizes *****

C ***** MATRIZ H *****

```

      IF (KALKJ.EQ.0. AND .KKK.NE.0) GOTO 100
      H(1,1)=8.8490018D-1
      H(1,3)=1.1509982D-1
      H(2,1)=H(1,3)
      H(2,3)=H(1,1)
      H(1,2)=1.31445856D-1
      H(1,4)=-0.35220811D-1
      H(2,2)=-H(1,4)
      H(2,4)=-H(1,2)

```

C ***** MATRIZ A *****

```

      A(1,1)=-.1D+1
      A(1,3)=.1D+1
      A(2,1)=-.1D+1
      A(2,3)=.1D+1
      A(1,2)=2.88675136D-1
      A(1,4)=-A(1,2)
      A(2,2)=-A(1,2)
      A(2,4)=A(1,2)

```

C ***** MATRIZ B *****

```

      B(1,1)=-.346410162D+1
      B(1,3)=-B(1,1)
      B(2,1)=-B(1,1)
      B(2,3)=B(1,1)
      B(1,2)=-.273205081D+1
      B(1,4)=-7.3205081D-1
      B(2,2)=-B(1,4)
      B(2,4)=-B(1,2)

```

C ***** MATRIZ U *****

```

      U(1)=0.D+0
      U(2)=2.113248654D-1
      U(3)=7.886751346D-1
      U(4)=.1D+1

```

C ***** Calculo da matriz X *****

```

      XX(1)=0.D+0
      XX(NP)=.1D+1

```



```

      XX(2)=U(2)*PS(1)
      XX(3)=U(3)*PS(1)
      DO 101 I=4,NP-1
      I1=INT(I/2)
      I2=INT((I+I1-1)/I1)
      I3=5-I2
      XX(I)=XX(I-2)+PS(I1)*U(I2)+PS(I1-1)*U(I3)
101  CONTINUE
C *****  Calculo da inversa do Jacobiano *****
      NITMX=20
100  IF (KKK.EQ.0. OR .KALKJ.EQ.1) CALL JACOIN(IJ)
      KKK=1
      KALKJ=0
C *****  Resolucao do sistema de equacoes por BROYDEN *****
C      write(*,*)'Resolucao do sistema nao linear....'
      CALL BROYDE(T1,T2,IJ,IERPAR,NITMX)
C  ANALISE DE RESULTADO E CORRECAO DO TAM. DOS ELEMENTOS
      IF (IERPAR.EQ.0) RETURN
      IF (IERPAR.EQ.1) THEN
          IERPAR=0
          NITMX=20
          KKK=0
          GOTO 100
      ENDIF
      END

```

```

C-----
      SUBROUTINE OUTPUT(SMF)
      implicit double precision (a-h,o-z)
      PARAMETER (NEM=1,NUMVA=10,NUMPAR=4)
      INTEGER I,IT,J
C      integer*4 code,sc
      COMMON  H(2,4),A(2,4),B(2,4),P(NUMPAR,NUMVA)
      COMMON /PARM1/NV,NP
      COMMON /PARM3/PS(NEM)
      COMMON /L/CLF,CINI
      COMMON /NITER/ITT,KF1
C      IF(NP.GT.12) KF2=1
C      call get_key(sc,code)
C      if (code.eq.0)goto 100
C      IF (CHAR(SC).EQ.'C')THEN
C          KF1=1
C      ELSE IF (CHAR(SC).EQ.'S')THEN
C          KF3=0
C          KF1=0
C      ELSE IF (CHAR(SC).EQ.'D')THEN

```

```

C          KF1=2
C          WRITE(*,*)' <ESC>[2J'
C          ELSE
C              IF (CHAR(SC).EQ.'V')THEN
C                  KF2=1
C                  WRITE(*,*)' <ESC>[2J'
C                  ENDIF
C              IF (CHAR(SC).EQ.'T')KF2=0
C          ENDIF
C          IF (CHAR(SC).EQ.'P')THEN
C              finalizacao do ambiente grafico e da biblioteca grafica
C              call kill_graph_lib
C              close(11)
C              close(12)
C              close(13)
C              close(14)
C              STOP
C          ENDIF
C          KF3=1
C          kf1=1
100  IF (KF3.EQ.0)THEN
C              WRITE(*,'('' <ESC>[2J<ESC>[12;1H<ESC>[7m Simulacao em andamento
C              $-- Carlos<ESC>[0m'')')
C              KF3=1
C              endif
C              IF(KF1.EQ.1)THEN
C                  WRITE(*,'('' <ESC>[1;1H<ESC>[31;47m__Z:('',I2,'')_.....V1/V6___'',
C                  $''__V2/V7_____V3/V8_____S=<ESC>[32;41m'',D9.3,''_...''\)'
C                  $)ITT,SMF
C                  XXX=0.
C                  DO 54 J=1,NP,2
C                      write(*,*)
C                      WRITE(*,1111) CLF*XXX+CINI,P(J,1),P(J,2),P(J,3),P(J,4),P(J,5)
C                      IF(KF2.NE.1) THEN
C                          WRITE(*,1112) P(J+1,1),P(J+1,2),P(J+1,3),P(J+1,4),P(J+1,5)
C                          WRITE(*,1113) P(J,6),P(J,7),P(J,8),P(J,9),P(J,10)
C                          WRITE(*,1114)P(J+1,6),P(J+1,7),P(J+1,8),P(J+1,9),P(J+1,10)
C                      ELSE
C                          WRITE(*,1114) P(J,6),P(J,7),P(J,8),P(J,9),P(J,10)
C                      ENDIF
C                      IF (J.LT.NP-1) XXX=XXX+PS((J+1)/2)
54  CONTINUE
1111  FORMAT(' <ESC>[30;45m',F8.3,5(1X,F13.7))
1112  FORMAT(' <ESC>[31;40mDerivada',5(1X,F13.7))
1113  FORMAT(' <ESC>[35m          ',5(1X,F13.7))

```

```
1114  FORMAT(' <ESC>[32;40m          ',4(1X,F13.7),1X,F12.6\))
      ENDIF
      IF (KF1.EQ.2) THEN
        WRITE(*,'('' <ESC>[10;1H<ESC>[31;47m__Z:('',F9.4,'', A '',F9.4,
$'')__'',I2,'', ITERACOES_____=<ESC>[32;41m'',D9.3,
$'')_____'\'))CINI,CINI+CLF,ITT,SMF
      ENDIF
      END
```

C-----

```
SUBROUTINE BROYDE(T1,T2,IJ,IERPAR,NITMX)
  implicit double precision (a-h,o-z)
  PARAMETER (NEQM=40,NITMXD=30,NUMPAR=4,NUMVA=10)
  INTEGER I,N,IT,BN,J
  REAL*8 X,F,S,R,Q
  REAL*8 IJ
  REAL*8 LF
  DIMENSION X(NEQM),IJ(NEQM,NEQM),F(NEQM),S(NEQM,NITMXD),R(NEQM,
$NITMXD),Q(NEQM),SD(NITMXD)
  COMMON H(2,4),A(2,4),B(2,4),P(NUMPAR,NUMVA)
  COMMON /PARM1/NV,NP
  COMMON /TABS2/F
  COMMON /NITER/ITT,KF1
  N=NV*NP
  ZERO=1.D-8
```

C ***** Primeiro calculo da funcao *****

```
CALL ATX(X)
SMF=0.
CALL OUTPUT(SMF)
CALL FUNCAO(F)
```

***** CALCULO DE S INICIAL *****

```
DO 700 I=1,N
  S(I,1)=0.
  DO 801 K=1,N
801  S(I,1)=S(I,1)-(IJ(I,K))*F(K)
700  CONTINUE
  IT=1
```

***** CALCULO DO NOVO X(i) *****

```
880 DO 900 I=1,N
900  X(I)=X(I)+S(I,IT)
  CALL ATP(X)
```

```
C  WRITE(*,*)'*****ITERACAO :',IT,'*****'
  CALL FUNCAO(F)
```

***** CRITERIO DE PARADA *****

```
BN=0
smf=0.
```

```
      DO 1080 I=1,N
      SMF=SMF+ABS(F(I))
      IF (BN.EQ.1) GOTO 1080
      IF (ABS(F(I)).GT.T1) BN=1
      IF (ABS(X(I)).LT.ZERO) THEN
        IF (ABS(S(I,IT)).GT.T2) BN=1
        X(I)=0.
        GOTO 1080
      ENDIF
      IF (ABS(S(I,IT)/X(I)).GT.T2) BN=1,
1080  CONTINUE
      CALL OUTPUT(SMF)
      IF (BN.EQ.0) GOTO 1750
*****  CALCULO ITERATIVO DE Q  *****
      DO 1180 I=1,N
      Q(I)=0.D+0
      DO 800 K=1,N
      800  Q(I)=Q(I)+(IJ(I,K))*F(K)
1180  CONTINUE
      IF (IT.EQ.1) GOTO 1300
      DO 1260 J=1,IT-1
      S2=0.D+0
      DO 1660 K=1,N
      1660 S2=S2+S(K,J)*Q(K)
      DO 1720 I=1,N
      1720 Q(I)=Q(I)+(S(I,J)-R(I,J))*S2/SD(J)
1260  CONTINUE
*****  CALCULO MATRIZ R  *****
1300  DO 1320 I=1,N
1320  R(I,IT)=Q(I)+S(I,IT)
      J=IT
      SD(J)=0.D+0
      DO 1400 K=1,N
1400  SD(J)=SD(J)+S(K,J)*R(K,J)
      S2=0.D+0
      DO 1661 K=1,N
      1661 S2=S2+S(K,J)*Q(K)
      DO 1721 I=1,N
      1721 Q(I)=Q(I)+(S(I,J)-R(I,J))*S2/SD(J)
      IF (IT.EQ.NITMXD) GOTO 10000
      IF (IT.GT.NITMX. AND .SMF.GT.1) GOTO 10000
      IT=IT+1
      ITT=ITT+1
*****  CALCULO NOVO S  *****
      DO 1460 I=1,N
```

```

1460  S(I,IT)=-Q(I)
      GOTO 880
1750  IF(KF1.NE.0)WRITE(*,*)'<ESC>[Om      IMPRESSAO'
      RETURN
10000 IF(KF1.NE.1)WRITE (*,10001)NITMX
10001 FORMAT (1X,'NAO CONVERGIU EM ',I3,' ITERACOES')
      IERPAR=1
      END

```

C-----

```

      SUBROUTINE ATX(X)
      implicit double precision (a-h,o-z)
      PARAMETER (NUMVA=10,NUMPAR=4,NEQM=40)
      REAL*8 X(NEQM)
      COMMON H(2,4),A(2,4),B(2,4),P(NUMPAR,NUMVA)
      COMMON /PARM1/NV,NP
      K=1
      DO 2110 I=1,NV
      DO 2110 J=1,NP
      X(K)=P(J,I)
      K=K+1
2110  CONTINUE
      RETURN
      END

```

C-----

```

      SUBROUTINE ATP(X)
      implicit double precision (a-h,o-z)
      PARAMETER (NUMVA=10,NUMPAR=4,NEQM=40)
      REAL*8 X(NEQM)
      COMMON H(2,4),A(2,4),B(2,4),P(NUMPAR,NUMVA)
      COMMON /PARM1/NV,NP
      K=1
      DO 2120 I=1,NV
      DO 2120 J=1,NP
      P(J,I)=X(K)
      K=K+1
2120  CONTINUE
      RETURN
      END

```

C-----

```

      SUBROUTINE FUNCAO(F)
      implicit double precision (a-h,o-z)
      PARAMETER (NUMVA=10,NUMPAR=4,NEQM=40)
      REAL*8 F(NEQM),CCO(NUMVA),CC1(NUMVA),FUN(NUMVA)
      COMMON /PARM1/NV,NP
      COMMON /CJAC/JJ1,JKJ

```

```
      JJ1=NV+1
      JKJ=1
      CALL CONDX0(CCO)
      DO 2200 I=0,NV-1
2200  F(I*NP+1)=CCO(I+1)
      DO 2000 J=2,NP-1
      CALL SISEQ(FUN,J)
      DO 2100 I=0,NV-1
2100  F(I*NP+J)=FUN(I+1)
2000  CONTINUE
      CALL CONDX1(CC1)
      DO 2300 I=1,NV
2300  F(I*NP)=CC1(I)
      RETURN
      END
```

C-----

```
      REAL*8 FUNCTION Y(ORD,VAR,JJ)
      implicit double precision (a-h,o-z)
      REAL*8 HH(4)
      INTEGER HM,AN,VAR,ORD
      PARAMETER (NEM=1,NUMVA=10,NUMPAR=4,NEQM=40)
      COMMON H(2,4),A(2,4),B(2,4),P(NUMPAR,NUMVA)
      COMMON /PARM1/NV,NP
      COMMON /PARM3/PS(NEM)
      COMMON /TABS/UU,IEL
      COMMON /CJAC/JJ1,JKJ
      IF (JJ.EQ.0) GOTO 400
      IF (JJ.EQ.1) GOTO 200
      IF (JJ.EQ.NP) GOTO 300
      J=JJ-1
      HM=(3+(-1)**J)/2
      AN=J-HM
      Y=0.D+0
      DO 900 K=1,4
      IF (K.EQ.2. OR .K.EQ.4) THEN
          H24=PS(JJ/2)
      ELSE
          H24=.1D+1
      ENDIF
      IF (ORD-1) 100,110,120
100  Y=Y+P(K+AN,VAR)*H(HM,K)*H24
      GOTO 900
110  Y=Y+P(K+AN,VAR)*A(HM,K)*H24
      GOTO 900
120  Y=Y+P(K+AN,VAR)*B(HM,K)*H24
```

```
900  CONTINUE
      Y=Y/PS(JJ/2)**(ORD)
      RETURN
200  IF (ORD-1) 210,220,230
210  Y=P(1,VAR)
      GOTO 910
220  Y=P(2,VAR)*PS(1)
      GOTO 910
230  Y=-6.*P(1,VAR)-4.*PS(1)*P(2,VAR)+6.*P(3,VAR)-2.*PS(1)*P(4,VAR)
910  CONTINUE
      Y=Y/PS(1)**(ORD)
      RETURN
300  K=(NP-2)/2
      IF (ORD-1) 310,320,330
310  Y=P(NP-1,VAR)
      GOTO 920
320  Y=P(NP,VAR)*PS(K)
      GOTO 920
330  Y=6.*P(NP-3,VAR)+2.*PS(K)*P(NP-2,VAR)-6.*P(NP-1,VAR)+4.*PS(K)
      $*P(NP,VAR)
920  CONTINUE
      Y=Y/PS(K)**(ORD)
      RETURN
400  IF (ORD-1) 410,420,430
410  HH(1)=(1.-UU)**2*(1.+2.*UU)
      HH(2)=UU*(1.-UU)**2*PS(IEL)
      HH(3)=UU**2*(3.-2.*UU)
      HH(4)=UU**2*(UU-1.)*PS(IEL)
      GOTO 930
420  HH(1)=6.*UU**2-6.*UU
      HH(2)=(3.*UU**2-4.*UU+1.)*PS(IEL)
      HH(3)=-HH(1)
      HH(4)=(3.*UU**2-2.*UU)*PS(IEL)
      GOTO 930
430  HH(1)=12.*UU-6.
      HH(2)=(6.*UU-4.)*PS(IEL)
      HH(3)=-HH(1)
      HH(4)=(6.*UU-2.)*PS(IEL)
930  Y=0.
      DO 935 I=1,4
      AN=2*(IEL-1)
      Y=Y+P(AN+I,VAR)*HH(I)
935  CONTINUE
      Y=Y/PS(IEL)**(ORD)
      RETURN
```

END

C-----

```

SUBROUTINE INVERSA(A,X,N)
  implicit double precision (a-h,o-z)
  PARAMETER (NEQM=40)
  REAL*8 A(NEQM,NEQM)
  REAL*8 X(NEQM)
  INTEGER PVT(NEQM)
  DO 30 I=1,N
    PVT(I)=I

```

30 CONTINUE

C DET=1

C ----- INVERSAO -----

```

DO 10 I=1,N

```

10 A(I,I)=A(I,I)+1.D+0

```

DO 20 M=1,N

```

```

A(M,M)=A(M,M)-1.D+0

```

```

IF (M.EQ.N) GOTO 18

```

```

INDMA=M

```

```

DO 2 I=M+1,N

```

```

IF (ABS(A(INDMA,M)).GE.ABS(A(I,M))) GOTO 2

```

```

INDMA=I

```

2 CONTINUE

```

IF (INDMA.EQ.M) GOTO 18

```

```

ITMP=PVT(INDMA)

```

```

PVT(INDMA)=PVT(M)

```

```

PVT(M)=ITMP

```

```

TMP=X(INDMA)

```

```

X(INDMA)=X(M)

```

```

X(M)=TMP

```

```

A(INDMA,INDMA)=A(INDMA,INDMA)-1.D+0

```

```

DO 15 I=1,N

```

```

TMP=A(INDMA,I)

```

```

A(INDMA,I)=A(M,I)

```

```

A(M,I)=TMP

```

15 CONTINUE

```

A(INDMA,INDMA)=A(INDMA,INDMA)+1.

```

18 A(M,M)=A(M,M)+1.D+0

```

P=A(M,M)-1.D+0

```

```

WRITE (*, '( ' <ESC>[1AP= ',I3,2X,I3,2X,D11.5)')M,PVT(M),P

```

```

IF (P.EQ.0) GOTO 100

```

```

DET=DET*P

```

```

DO 31 J=1,N

```

31 A(M,J)=A(M,J)/P

```

X(M)=X(M)/P

```



```

      DO 21 I=1,N
      IF (I.EQ.M) GOTO 21
      D=A(I,M)
      X(I)=X(I)-D*X(M)
      DO 40 J=1,N
      A(I,J)=A(I,J)-D*A(M,J)
40    CONTINUE
21    CONTINUE
20    CONTINUE
      DO 70 M=1,N
      A(M,M)=A(M,M)-1.D+0
      DO 70 I=1,N
      IF (ABS(A(M,I)).LT.1E-7) A(M,I)=0.D+0
70    CONTINUE
      DO 80 I=1,N
60    IF(PVT(I).EQ.I) GOTO 80
      DO 50 J=1,N
      TMP=A(J,I)
      A(J,I)=A(J,PVT(I))
      A(J,PVT(I))=TMP
50    CONTINUE
      ITMP=PVT(I)
      PVT(I)=PVT(ITMP)
      PVT(ITMP)=ITMP
      GOTO 60
80    CONTINUE
C      WRITE(*,*)'DETERMINANTE= ',DET
      RETURN
100 WRITE(*, '(' IMPOSSIVEL RESOLVER, ELEMENTO A('',I2,'', '',I2,'') CO
&M VALOR ZERO....')')M,M
      STOP
      END

```

```

C-----
      SUBROUTINE JACOIN(H)
      implicit double precision (a-h,o-z)
      PARAMETER (NEM=1,NUMVA=10,NUMPAR=4,NEQM=40)
      REAL*8 SOMO(NEQM),CCO(NUMVA),CC1(NUMVA),FUN(NUMVA),P(NUMPAR,NUMVA)
      REAL*8 H(NEQM,NEQM)
      COMMON HH(2,4),A(2,4),B(2,4),P
      COMMON /PARM1/NV,NP
      COMMON /CJAC/JJ1,J
      NEQ=NV*NP
      DO 6 JH=1,NEQ
          SOMO(JH)=0.D+0
      DO 6 IH=1,NEQ

```

```

6      H(IH,JH)=0.D+0
      write (*,*)' ...Calculo do jacobiano.'
      DO 2 JJ1=1,NV
      DO 2 JJ2=1,NP
          JJ=(JJ1-1)*NP+JJ2
          IF(ABS(P(JJ2,JJ1)).LE.1.AND.ABS(P(JJ2,JJ1)).GT.(0.1))
$HNI=1.D-4
          IF(ABS(P(JJ2,JJ1)).LE.(0.1))HNI=1.D-5
          IF(ABS(P(JJ2,JJ1)).GT.1)HNI=1.D-3
          SINAL=-1.D+0
C  PARTICULARIZADO PARA O CASO DE C.I. 1' ESPECIE EM x=0
      IF (JJ2.LE.1) THEN
          DO 23 J=1,2
              P(JJ2,JJ1)=P(JJ2,JJ1)+HNI*SINAL
              CALL CONDXO(CCO)
              DO 2200 I=0,NV-1
                  SOMO(I*NP+1)=SOMO(I*NP+1)+SINAL*CCO(I+1)
2200          CONTINUE
              P(JJ2,JJ1)=P(JJ2,JJ1)-HNI*SINAL
              SINAL=-1.D+0*SINAL
23          CONTINUE
              GOTO 2400
          ENDIF
          IF (JJ2.GE.NP-1 .OR. JJ2.LE.2) THEN
              DO 13 J=1,2
                  P(JJ2,JJ1)=P(JJ2,JJ1)+HNI*SINAL
              CALL CONDX1(CC1)
              DO 2300 I=1,NV
                  SOMO(I*NP)=SOMO(I*NP)+SINAL*CC1(I)
2300          CONTINUE
              P(JJ2,JJ1)=P(JJ2,JJ1)-HNI*SINAL
              SINAL=-1.*SINAL
13          CONTINUE
          ENDIF
2400 J2=3
      IF (JJ2.LE.2) THEN
          J1=2
          J2=1
          ENDIF
      IF (JJ2.GE.NP-1) J2=1
      IF (JJ2.GT.2) J1=INT((JJ2-1)/2)*2
      DO 2000 JH=J1,J1+J2
          DO 3 J=1,2
              P(JJ2,JJ1)=P(JJ2,JJ1)+HNI*SINAL
          CALL SISEQ(FUN,JH)

```

```

                P(JJ2,JJ1)=P(JJ2,JJ1)-HNI*SINAL
                DO 4 K=1,NV
                KK=(K-1)*NP+JH
                SOMO(KK)=SOMO(KK)+SINAL*FUN(K)
4                CONTINUE
                SINAL=-1.D+0*SINAL
3                CONTINUE
2000 CONTINUE
                DO 5 K=1,NEQ
                H(K,JJ)=SOMO(K)/2./HNI
                if (abs(h(k,jj)).lt.1d-10) h(k,jj)=0.D+0
                SOMO(K)=0.D+0
5                CONTINUE
                write(*,*) '<ESC>[1Acoluna:',jj,'
2                CONTINUE
                write(*,*) '...invertendo...'
                CALL INVERSA(H,SOMO,NEQ)
                RETURN
                END
                SUBROUTINE REDPS
                WRITE(*,*) 'REDUZIR O PASSO'
                CLOSE(11)
                CLOSE(12)
                CLOSE(13)
                CLOSE(14)
                STOP
                END

```

C-----

```

                SUBROUTINE PROPFIS(TEMPX,CONV,MGO,MXO,YO,NGASG,TEMPG,TWR,MEDMOL,
                $PRE,NGASC,TEMPC,TWT,MEDMC,UMIO,UMI,AUX1,TORG,
                $ROXIS,CPX,DHR,VISG,VISGP,KG,RDGA,CPG,VISC,VISCP
                $,KC,ROC,CPC)
                implicit double precision (a-h,o-z)
                REAL*8 MEDMOL,MEDMC,KG,KC,MGO,MXO
                REAL*8 CY1(27),CY2(27)
                REAL*8 TCRG(27),VCRG(27),PMG(27),CYG(27),AMED,BMED,CMED,DMED
                REAL*8 TCRC(4),VCRC(4),PMC(4),CYC(4),AMEDC,BMEDC,CMEDC,DMEDC
                COMMON /DCP/BMED,CMED,DMED
                COMMON /DCPGAS/AG(27),BG(27),CG(27),DG(27),AC(4),BC(4),CC(4),DC(4)
                COMMON /PROPG/TCRG,VCRG,PMG,CY1,CY2
                COMMON /PROPC/TCRC,VCRC,PMC,CYC,AMEDC,BMEDC,CMEDC,DMEDC
                COMMON /CJAC/JJ1,JKJ
                COMMON /NMOL/YNGO,YNPF,YNAEV,FL
                COMMON /PM/PMGAS,PMPRO
                IF(JJ1.EQ.8.OR.MEDMOL.EQ.0.OR.JKJ.EQ.1.OR.FL.EQ.1)THEN

```

```

TORG=YO*(1.-CONV)/(1.-YO*CONV)
ROXIS=(2.29*(1.-YO)+0.8*YO)
C   Considerando que a umidade aumenta a massa da particula mas
C   nao altera o volume da particula...
ROXIS=ROXIS/(1.-UMIO)
MEDMOL=0.
AMED=0.
BMED=0.
CMED=0.
DMED=0.
YNGO=MGO/PMGAS
if (f1.NE.1) then
  ynaev=0
  else
YNAEV=(UMIO*MXO-UMI*ROXIS/(1.-UMI)*AUX1)/18.
  endif
YNPF=MXO*(1.-UMIO)*YO*CONV/PMPRO
DO 10 I=1,NGASG
IF (I.EQ.1) THEN
  CYG(I)=(CY1(I)*YNGO+YNAEV+CY2(I)*YNPF)/(YNGO+YNAEV+YNPF)
ELSE
  CYG(I)=(CY1(I)*YNGO+CY2(I)*YNPF)/(YNGO+YNAEV+YNPF)
ENDIF
MEDMOL=MEDMOL+CYG(I)*PMG(I)
AMED=AMED+CYG(I)*AG(I)
BMED=BMED+CYG(I)*BG(I)
CMED=CMED+CYG(I)*CG(I)
DMED=DMED+CYG(I)*DG(I)
10 CONTINUE
AMED=AMED/MEDMOL
BMED=BMED/MEDMOL
CMED=CMED/MEDMOL
DMED=DMED/MEDMOL
ENDIF
CPX=0.172+(0.1206+0.8179*TORG)*0.001*TEMPX
IF (TEMPX.GT.723.16) THEN
  DHR=180.
ELSE
  DHR=127.
ENDIF
IF(JJ1.EQ.3.OR.JJ1.EQ.7.OR.JJ1.EQ.6.OR.JJ1.EQ.8.OR.
$ROGA.EQ.0.OR.JKJ.EQ.1) THEN
  CALL PROPGAS(NGASG,TEMPG,TWR,TCRG,VCRG,PMG,CYG,MEDMOL,PRE,AMED,
$BMED,CMED,DMED,VISG,VISGP,KG,ROGA,CPG,AG,BG,CG,DG)
ENDIF

```

```

      IF(JJ1.EQ.7.OR.JJ1.EQ.6.OR.JJ1.EQ.8.OR.
$ROC.EQ.0.OR.JKJ.EQ.1) THEN
      P2=1.1
      CALL PROPGAS(NGASC,TEMPC,TWT,TCRC,VCRC,PMC,CYC,MEDMC,P2,AMEDC,
$BMEDC,CMEDC,DMEDC,VISC,VISCP,KC,ROC,CPC,AC,BC,CC,DC)
      IF (TEMPC.GE.773) THEN
          FATCP=1.06964-(3.928D-4)*TEMPC+(5.84357D-7)*TEMPC**2
$ -1.20233D-10*TEMPC**3-1.41947D-13*TEMPC**4+5.90108D-17*TEMPC**5
      ELSE
          FATCP=1
      ENDIF
      CPC=CPC*FATCP
      ENDIF
      RETURN
      END

```

C-----

```

      SUBROUTINE PROPGAS(NG,TEMP,TW,TCRIT,VCRIT,PM,CY,MEDMOL,PRE,AMED,
$BMED,CMED,DMED, VISC,VISGP,KG,ROG,CPG,AG,BG,CG,DG)
      implicit double precision (a-h,o-z)
      REAL*8 TCRIT(27),CY(27),VCRIT(27),AG(27),BG(27),CG(27),DG(27)
      REAL*8 KCI,KCM,KG,MEDMOL,MIC,MIW,MU,MW,PM(27)
      FIG=0.
      PSC=0.
      FIW=0.
      ROG=0.
      KCM=0.
      PKC=0.
      DO 10 I=1,NG
      TRG=TEMP/TCRIT(I)
      TRW=TW/TCRIT(I)
      if (trg.gt.40. or . trg.lt.0) write(*,*)'trg=',trg,i,temp,ng
      MU=(1.9*TRG)**(0.9*0.4343*LOG(1.9*TRG))
      MW=(1.9*TRW)**(0.9*0.4343*LOG(1.9*TRW))
      MIC=33.3D-6*SQRT(PM(I)*TCRIT(I))/VCRIT(I)**(2./3.)*(1.058*TRG**
$0.645-0.261/MU)
      MIW=33.3D-6*SQRT(PM(I)*TCRIT(I))/VCRIT(I)**(2./3.)*(1.058*TRW**
$0.645-0.261/MW)
      FIG=FIG+CY(I)*SQRT(PM(I))*MIC
      FIW=FIW+CY(I)*SQRT(PM(I))*MIW
      PSC=PSC+CY(I)*SQRT(PM(I))
      CPG=(AG(I)+BG(I)*TEMP+CG(I)*TEMP**2+DG(I)*TEMP**3)/PM(I)
      KCI=MIC*(CPG+2.48/PM(I))
      KCM=KCM+CY(I)*KCI*PM(I)**(1./3.)
      PKC=PKC+CY(I)*PM(I)**(1./3.)
10 CONTINUE

```

```

VISG=FIG/PSC
VISGP=FIW/PSC
KG=KCM/PKC
ROG=MEDMOL*PRE/82.05/TEMP
CPG=AMED+BMED*TEMP+CMED*TEMP**2+DMED*TEMP**3
RETURN
END

```

```

*****
*
* MODELO IMPLEMENTADO PARA SIMULACAO DO PROCESSO PLASOL - aq. p/ comb. *
*
* Sistema de 12 eq. diferenciais
*
*****
* Relacao das variaveis:
*
* Variavel independente : XX() ; UU() ; = comprimento do reator
*
* Variaveis dependentes :
*
* Numero : 01 = porosidade do leito == PORL
*           02 = velocidade do gas de arraste == VELG
*           03 = temperatura do gas de arraste == TEMPG
*           04 = velocidade das particulas de xisto == VELX
*           05 = temperatura das particulas de xisto == TEMPX
*           06 = pressao no reator == PRE
*           07 = temperatura do gas de combustao == TEMPC
*           08 = conversao em produtos == CONV
*           09 = concentracao de querogenio == CONCQ
*           10 = concentracao de betume == CONCB
*
*****

```

```

SUBROUTINE SISEQ(FUN,J)
  implicit double precision (a-h,o-z)
  PARAMETER (NUMPAR=4)
  REAL*8 FUN(10)
  REAL*8 K1,K2,KC,KG,KR,LF,LR,MCOMB,MEDMOL,MGO,MXO,MEDMC
  REAL*8 TWRF(NUMPAR),TWTF(NUMPAR),TWIF(NUMPAR),TWRI(NUMPAR)
  REAL*8 INV(2,2),LER,LET,LMR,XX(NUMPAR)
  COMMON /TSISEQ/AEC,AT,ATT,AR,D1,D2,D3,D4,
&DEQC,DPART,EMR,EMX,EMIS,EPSR,EPST,ALPRI,ALPR,ALPT,ALPX,
&CORAMB,KR,PCO2,PH2O,LER,LET,
&LF,LR,MCOMB,MEDMC,MXO,NGASG,NGASC,TIN,YO,MGO
  COMMON /DCP/BMED,CMED,DMED
  COMMON /CONST/PI,GRAV,SIGMA,RGAS
  COMMON /CJAC/JJ1,JKJ
  COMMON /RTW/TWRF,TWTF,TWIF,TWRI

```

```
COMMON /EVAP/TEMPOR,DTEMPOR,FLAGEV,UMIO
COMMON /NMOL/YNGO,YNPF,YNAEV,FL2
COMMON /XX/XX
COMMON /L/CR2,CINI
COMMON /PM/PMGAS,PMPRO
COMMON /PARAME/FRX,APRM2,APRM3,APRM4,APRM5
COMPR=CINI+XX(J)*CR2
IF (COMPR.LT.D2) COMPR=D2
FL2=FLAGEV
PORL=Y(0,1,J)
VELG=Y(0,2,J)
TEMPG=Y(0,3,J)
VELX=Y(0,4,J)
PRE=Y(0,6,J)
TEMPC=Y(0,7,J)
CONV=Y(0,8,J)
CONCQ=Y(0,9,J)
CONCB=Y(0,10,J)
V1=Y(1,1,J)/LF
V2=Y(1,2,J)/LF
V3=Y(1,3,J)/LF
V4=Y(1,4,J)/LF
V6=Y(1,6,J)/LF
V7=Y(1,7,J)/LF
V8=Y(1,8,J)/LF
V9=Y(1,9,J)/LF
V10=Y(1,10,J)/LF
IF (FLAGEV.EQ.1) THEN
  UMI=Y(0,5,J)
  IF (UMI.LT.-1D-4) CALL REDPS
  V11=Y(1,5,J)/LF
  TEMPX=TEMPOR
  V5=0.
ELSE
  UMI=TEMPOR
  V11=0.
  TEMPX=Y(0,5,J)
  IF (UMI.NE.0.AND.TEMPX.GT.374.16) CALL REDPS
  V5=Y(1,5,J)/LF
ENDIF
IF (TWR.eq.0) TWR=0.84*TEMPC
IF (TWT.eq.0) TWT=0.90*TEMPC
IF (TWI.eq.0) TWI=TIN+70.
AUX1=VELX*(1.-PORL)*AT
CALL PROPFIS(TEMPX,CONV,MGO,MXO,YO,NGASG,TEMPG,TWR,MEDMOL,PRE,
```

```

$NGASC, TEMPC, TWT, MEDMC, UMIO, UMI, AUX1, TORG,
$ROXISO, CPX, DHR, VISG, VISGP, KG, ROGA, CPG, VISC, VISC
$, KC, ROC, CPC)
ROXIS=ROXISO*(1.-UMIO)*(1.-YO*CONV)/(1.-UMI)
IF (FLAGEV.EQ.1) THEN
DRXDZ=ROXISO*(1.-UMIO)/(1-UMI)**2*V11
ELSE
DRXDZ=-ROXISO*(1.-UMIO)*YO*V8
ENDIF
DCPXDZ=((0.1206+0.8179*TORG)*0.001*V5+0.8179D-3*TEMPX*YO*(YO-1)
&/(1-YO*CONV)**2*V8)*(1.-UMI)+V11*(1.-CPX)
C      CPXseco==> CPXumido
      CPX=CPX*(1.-UMI)+UMI
      DCPDT=BMED+CMED*TEMPG+DMED*TEMPG**2
      DMX=ROXIS*(1.-PORL)*V4-ROXIS*VELX*V1+VELX*(1.-
&PORL)*DRXDZ
      DMUMI=(ROXIS*(1.-PORL)*VELX*V11+UMI*DMX)
      DMORG=-YO*MXO*(1.-UMIO)/AT*V8
      DRGDZ=1./RGAS/TEMPG*(PRE*((YNGO*PMGAS+YNPF*PMPRO+YNAEV*18.)*AT
$*(DMORG/PMPRO+DMUMI/18.)-(YNGO+YNPF+YNAEV)*AT*(DMORG+DMUMI))/
$(YNGO+YNPF+YNAEV)**2
$+MEDMOL*V6-
$PRE*MEDMOL/TEMPG*V3)
DMG=ROGA*VELG*V1+ROGA*PORL*V2+VELG*PORL*DRGDZ
FUN(1)=DMX-DMORG-DMUMI
FUN(2)=DMG+DMORG+DMUMI

REG=D1*VELG*ROGA*PORL/VISG
IF (REG.LE.2100) THEN
      FGF=16./REG
      ELSE IF (REG.GT.100000) THEN
            WRITE(*,*)'REG FORA DO INTERVALO ***'
            FGF=16./REG
            ELSE
            FGF=0.0791/REG**0.25
      ENDIF
      FSF=2.85D-2*SQRT(GRAV*D1)/VELX
      REP=PORL*ROGA*(VELG-VELX)*DPART/VISG
      IF (REP.GE.1000) THEN
            CD=0.44
            ELSE
            CD=24.*(1.+0.15*REP**0.687)/REP
      ENDIF
      BETA=3./4.*CD*ABS(VELG-VELX)*ROGA*PORL*(1.-PORL)/DPART
&/PORL**(2.65)
      DMTG=2.*ROGA*PORL*VELG*V2+ROGA*VELG**2*V1+

```



```

&PORL*VELG**2*DRGDZ
DPORP=PORL*V6*1.013D6
EMPG=GRAV*ROGA*PORL
DRAG=BETA*(VELG-VELX)
ATWG=2./D1*ROGA*PORL*VELG**2*FGF
DMTX=2.*ROXIS*(1.-PORL)*VELX*V4+(1.-PORL)*VELX**2
&*DRXDZ-ROXIS*VELX**2*V1
EMPX=GRAV*(1.-PORL)*ROXIS
ATWX=2./D1*ROXIS*(1.-PORL)*VELX**2*FSF
c   if (jj1.eq.11) write(*,*)'V6=',v6
FUN(3)=DMTG+DPORP+EMPG+DRAG+ATWG
FUN(4)=DMTX+V6*1.013D6-DPORP+EMPX+ATWX-DRAG

REP=REP/PORL
BV=(1.-PORL)/PORL
FBV=0.308-74.625*BV
IF (FBV.LT.0) FBV=0.001
C   IF (BV.LT.(2.3D-4). OR .BV.GT.1D-2. OR .REP.LT.20. OR .REP.GT.790
C   $)WRITE(*,*)'CALCULO DE HGX NAO OBEDECE INTERVALO DE VALIDADE '
HGX=KG/DPART*(2.+((0.4*SQRT(REP))**1.25+(FBV*REP**0.82)**1.25)**
$(4./5.))
PRG=CPG*VISG/KG
REG=ROGA*VELG*D1/VISG
HS=ROGA*CPG*VELG/PRG**0.6
REC=MCOMB/AEC*DEQC/VISC
PRC=CPC*VISC/KC
IF (REC.GT.2100)THEN
  HCC=KC/DEQC*0.023*REC**0.8*PRC**0.4
  IF (COMPR/DEQC.LT.80)THEN
    HCR=HCC*(D3/D2)**0.45*(1.+((D3-D2)/COMPR)**0.7)
    HCT=HCC*(VISC/VISCP)**0.14*(1.+((D3-D2)/COMPR)**0.7)
  ELSE
    HCR=HCC*(D3/D2)**0.45
    HCT=HCC*(VISC/VISCP)**0.14
  ENDIF
ELSE
  HCR=KC/DEQC*1.86*(REC*PRC*DEQC/COMPR)**(1./3.)*
$(VISC/VISCP)**0.14
  HCT=HCR
ENDIF

H1=HCR*PI*D2
AX=6.*(1-PORL)/DPART*AT
H6=SIGMA/((1.-ALPRI)/ALPRI/PI/D1+1./PI/D1/FRX+(1.-ALPX)/ALPX/AX)
H8=2.*PI*KR/LOG(D2/D1)
HX1=1.34096

```

```

HX4=HCT*D3
HX5=2.*8.469449D-5/HX1/LOG(D4/D3)
HX6=1.42*2.39D-5
HX7=SIGMA*EMIS
D4M=D4/100.
HX3=CORAMB*(HX6/4./(TWI-TIN)**(3./4.)/D4M**0.25+
$HX7*((TWI-TIN)*4.*TWI**3-(TWI**4-TIN**4))/(TWI-TIN)**2)
RR=(1.-ALPR)/ALPR/AR
RT=(1.-ALPT)/ALPT/ATT
RRE=1./(AR+AR**2*(1./ATT+1./(ATT+AR)))
RTE=1./(ATT+AR+AR*ATT/(AR+ATT))
RCE=RTE
LMR=D3-D2
IF (JJ1.EQ.11) THEN
    TOLQ=1.D-7
ELSE
    TOLQ=1.D-3
ENDIF

```

C BALANCOS NAS PAREDES

10 DQCRC=H1*(TEMPC-TWR)

C radiacao

```

TWM=(TWR+TWT)/2.
EPSC=EPC02(TEMPC,PC02*LMR)+CH20(PH20,LMR)*EPH20(TEMPC,PH20,LMR)
ALPC=EPC02(TWM,PC02*LMR)*(TEMPC/TWM)**0.65+EPH20(TWM,PH20,LMR)
$*CH20(PH20,LMR)*(TEMPC/TWM)**0.45
RC=(1.-ALPC)/ALPC/(AR+ATT)
AJO=(TEMPC**4*EPSC/ALPC/(RC+RCE)+TWR**4*EPSR/ALPR/(RR+RRE)
$+TWT**4*EPST/ALPT/(RT+RTE))/(1./(RC+RCE)+1./(RT+RTE)
$+1./(RR+RRE))
DQRADR=SIGMA*(TWR**4*EPSR/ALPR-AJO)/(RR+RRE)
DQRADT=SIGMA*(TWT**4*EPST/ALPT-AJO)/(RT+RTE)
DQRADC=SIGMA*(TEMPC**4*EPSC/ALPC-AJO)/(RC+RCE)
TWR1=TWR-(DQCRC-DQRADR)/H8
IF (REG.GT.2300) THEN
    HSUSP=HS*0.332*(TEMPG/TWR1)**0.11/REG**0.5
ELSE
    HSUSP=HS*0.0296*(2./(SQRT(TWR1/TEMPG)+1.))*1.6/REG**0.2
ENDIF
DQRXR=H6*(TWR1**4*EMR/ALPRI-TEMPX**4*EMX/ALPX)
DQSUSP=HSUSP*PI*D1*(TWR1-TEMPG)
FTWR=DQCRC-DQSUSP-DQRXR-DQRADR

DQCTC=HX4*(TEMPC-TWT)
AUX=DQCTC-DQRADT/PI-HX5*TWT**HX1
IF (AUX.GT.0) THEN

```

```

C      WRITE(*,*) '<ESC>[1AAUX<zero'
      TWT=1.01*TWT
      GOTO 10
ENDIF
TWI=(-(AUX)/HX5)**(1/HX1)
IF (TWI.LT.TIN) THEN
C      WRITE(*,*) '<ESC>[1ATwis<Tamb'
      TWT=1.01*TWT
      GOTO 10
ENDIF
HAMB=(CORAMB*(HX6*((TWI-TIN)/D4M)**0.25+
&HX7*(TWI**4-TIN**4)/(TWI-TIN))+1.53108D-4)
DQAMB=D4*(TWI-TIN)*HAMB
FTWT= HX5*(TWT**HX1-TWI**HX1)-DQAMB

IF (ABS(FTWR).LT.TOLQ. AND .ABS(FTWT).LT.TOLQ) GOTO 20
DALPCT = (-TEMPC**0.65*EPCO2(TWM,PCO2*LMR)*1.15/TWM**1.65 -1.45
$*EPH20(TWM,PH20,LMR)*CH20(PH20,LMR)*TEMPC**0.45/TWM**(1.45))/2.
DAJOR=(EPSR/ALPR*4.*TWR**3/(RR+RRE)-EPSC*TEMPC**4/(RC+RCE)
$/ALPC**2*DALPCT)/(1./(RC+RCE)+1./(RT+RTE)
$+1./(RR+RRE))
DAJOT=(EPST/ALPT*4.*TWT**3/(RT+RTE)-EPSC*TEMPC**4/(RC+RCE)
$/ALPC**2*DALPCT)/(1./(RC+RCE)+1./(RT+RTE)
$+1./(RR+RRE))
DDQRRR = SIGMA/(RR+RRE)*(EPSR/ALPR*4.*TWR**3-DAJOR)
DDQRRT = -SIGMA*DAJOT/(RR+RRE)
DDQRRTT = SIGMA/(RT+RTE)*(4.*TWT**3*EPST/ALPT-DAJOT)
DDQRTR = -SIGMA*DAJOR/(RT+RTE)
DTWR1 = 1.+(H1+DDQRRR)/H8
DTWR2 = DDQRRT/H8
INV(1,1)=-H1-DDQRRR-DTWR1*(HSUSP*PI*D1+H6*EMR/ALPRI*4.*TWR1**3)
INV(1,2)=-DDQRRT-DTWR2*(HSUSP*PI*D1+4.*H6*EMR/ALPRI*TWR1**3)
DTWIR=(-(AUX)/HX5)**(1./HX1-1.)/HX1*
$DDQRTR/PI/HX5
DTWIT=(-(AUX)/HX5)**(1./HX1-1.)/HX1*
$(HX4+DDQRRT/PI+HX5*TWT** (HX1-1.)*HX1)/HX5
DAMBR=D4*DTWIR*((TWI-TIN)*HX3+HAMB)
DAMBT=D4*DTWIT*((TWI-TIN)*HX3+HAMB)
INV(2,1)=-HX5*HX1*TWI** (HX1-1.)*DTWIR-DAMBR
INV(2,2)=HX5*HX1*(TWT** (HX1-1.)-TWI** (HX1-1.)*DTWIT)-DAMBT
DET=INV(1,1)*INV(2,2)-INV(1,2)*INV(2,1)
TWR=TWR-(INV(2,2)*FTWR-INV(1,2)*FTWT)/DET
TWT=TWT-(INV(1,1)*FTWT-INV(2,1)*FTWR)/DET
GOTO 10

C      FIM DO CALCULO DOS BALANCOS NAS PAREDES
20     DQGXC=HGX*(TEMPC-TEMPX)*AX

```

```

DHRT=-DMORG*DHR
DHX=DMX*TEMPX*CPX+ROXIS*VELX*(1.-PORL)*(CPX*V5+TEMPX*DCPXDZ)
DHVAP=-540.*DMUMI
FUN(5)=-DQGXC/AT-DQRXR/AT+DHRT+DHX+DHVAP

```

```

DHG=DMG*CPG*TEMPG+ROGA*VELG*PORL*(CPG+TEMPG*DCPDT)*V3
DHP=-DMORG*CPG*(TEMPG-TEMPX)
DHVP=-DMUMI*0.5*(TEMPG-TEMPX)
FUN(6)=-DQSUSP/AT+DQGXC/AT+DHG+DHP+DHVP

```

```

DHC=MCOMB*CPC*V7
FUN(7)=PI*DQCTC+DQCRC+DQRADC+DHC
IF (JKJ.EQ.1) THEN
    TWRf(J)=TWR
    TWTF(J)=TWT
    TWIF(J)=TWI
    TWRI(J)=TWR1

```

```

ENDIF
IF (TEMPX.GT.523.16) THEN
    K1=996.04*EXP(-9500./1.987/TEMPX)
    K2=3.64D+7*EXP(-26500./1.987/TEMPX)
ELSE
    K1=0.
    K2=0.
ENDIF
FUN( 8)=VELX*YO*V8-K2*CONCB
FUN( 9)=VELX*V9+K1*CONCQ
FUN(10)=VELX*V10-K1*CONCQ+K2*CONCB

```

```

RETURN
END

```

```

C-----
FUNCTION EPC02(T,PLE)
DOUBLE PRECISION EPC02,PLE,T
EPC02=7.178352*PLE**(1./3.)/SQRT(T)
END

```

```

C-----
FUNCTION EPH20(T,P,L)
DOUBLE PRECISION EPH20,P,L,T
EPH20=71.78352*P** .8*L** .6/T
END

```

```

C-----
FUNCTION CH20(PH20,L)
DOUBLE PRECISION CH20,PH20,L
CH20 =1.+(1.096*(PH20*L)**(-7.01661D-3)-1.)*PH20/0.2

```

END

C

```

SUBROUTINE CONDXO(FUN)
implicit double precision (a-h,o-z)
REAL*8 FUN(10)
COMMON /PARM2/AO(10),BO(10)
FUN( 1)=AO( 1)-Y(O, 1,1)
FUN( 2)=AO( 2)-Y(O, 2,1)
FUN( 3)=AO( 3)-Y(O, 3,1)
FUN( 4)=AO( 4)-Y(O, 4,1)
FUN( 5)=AO( 5)-Y(O, 5,1)
FUN( 6)=AO( 6)-Y(O, 6,1)
FUN( 7)=AO( 7)-Y(O, 7,1)
FUN( 8)=AO( 8)-Y(O, 8,1)
FUN( 9)=AO( 9)-Y(O, 9,1)
FUN(10)=AO(10)-Y(O,10,1)
END

```

C-----

```

SUBROUTINE CONDX1(FUN)
implicit double precision (a-h,o-z)
REAL*8 FUN(10)
COMMON /PARM1/NV,NP
J=NP
CALL SISEQ(FUN,J)
RETURN
END

```

[illegible]

DERIV.FOR

[illegible]

```

*                DERIV.FOR                *
* Descr:                                                *
*   Prepara tabela  que auxilia  na analise das diferencas entre as  *
*   derivadas primeira encontradas pelo extremo esquerdo e direito.  *
*

```

```
SUBROUTINE INPINT(A,N)
CHARACTER*(*) A
WRITE(*,'(1X,A\\)')A
READ(*,*)N
```

```

RETURN
END
SUBROUTINE INPCAR(A,B)
CHARACTER*(*)A,B
WRITE(*,'(1X,A\)' )A
READ(*,'(A)')B
RETURN
END
SUBROUTINE APAGTEL
WRITE(*,*) '<ESC>[2J'
END

```

C-----

```

PROGRAM DERIV
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)

CHARACTER PATH*20,SG*1,ARQG*12,COMMEN*40
REAL*8 YMEDIA(10),YMAIOR(10),D(10),DO(10),DMAIOR(10),ZMAIOR(10)
DIMENSION IVAR(4)
PATH= '
WRITE(*,*) '*****'
CALL INPCAR('PATH =',PATH)
CALL INPCAR('SAIDA GRAFICA (S/N)? ',SG)
IF (SG.EQ.'S')THEN
    I=1
300    CALL INPINT('NUMERO DA VARIABEL :',IVAR(I))
        IF (IVAR(I).GT.10.OR.IVAR(I).LT.0) GOTO 300
        IF (IVAR(I).EQ.0) GOTO 301
        I=I+1
        GOTO 300
301    IVART=I-1
        CALL INPCAR('NOME DO ARQUIVO P/ GRAFICO: ',ARQG)
        OPEN(5,FILE=ARQG)
ENDIF
OPEN(4,FILE=PATH//'DERIV.RES')
DO 1 I=1,10
YMEDIA(I)=0.
1    YMAIOR(I)=-9.D-99
    NMEDIA=0.
    ZO=-1.
2    READ(4,1021)Z,(D(I),I=1,10)
1021  FORMAT(F9.4,10(1X,D13.7))
    IF(Z.EQ.ZO) GOTO 10
    DO 3 I=1,10
3    DO(I)=D(I)
    ZO=Z

```

```

        IF(Z.EQ.1500)GOTO 100
        GOTO 2
10      DO 4 I=1,10
        DIF=(D(I)-DO(I))
        YMEDIA(I)=YMEDIA(I)+ABS(DIF)
        IF (ABS(DIF).GT.ABS(YMAIOR(I)).AND.DO(I).NE.O)THEN
            DMAIOR(I)=DO(I)
            ZMAIOR(I)=ZO
            YMAIOR(I)=DIF
        ENDIF
4        CONTINUE
        NMEDIA=NMEDIA+1
        IF(SG.EQ.'S') THEN
            IF (DO(8).EQ.O)THEN
                DO(8)=1
                D(8)=1
            ENDIF
            WRITE(5,1022)Z,((D(IVAR(I))-DO(IVAR(I)))/
$DO(IVAR(I))*100,I=1,IVART)
        ENDIF
1022    FORMAT(F6.1,3(1X,D13.7))
        GOTO 2
100     IF (SG.EQ.'S')THEN
        WRITE(5,*)'VARIAVEIS: ',(IVAR(I),I=1,IVART)
        CLOSE(5)
        ENDIF
        CALL INPCAR('NOME DO ARQUIVO PARA TABELAS: ',ARQG)
        OPEN(6,FILE=ARQG)
        CALL INPCAR('COMENTARIOS: ',COMMEN)
        WRITE(6,*)COMMEN
        WRITE(6,(''_____Maior diferenca_____Diferenca me'',
$'dia_____')')
        WRITE(6,(''var __ Z _____ VALOR _____ % _____ VALOR ''',
$'_____ % _____')')
        WRITE(6,(''_____')',
$'_____')')
        DO 5 I=1,10
5        WRITE(6,1023)I,ZMAIOR(I),YMAIOR(I),YMAIOR(I)/DMAIOR(I)*100.,
$YMEDIA(I)/NMEDIA,YMEDIA(I)/NMEDIA/DMAIOR(I)*100.
1023    FORMAT(I2,1X,F7.1,2(1X,D13.7,1X,F13.7))
        WRITE(6,(''_____')',
$'_____')')
        CLOSE (6)

```

END

DECISAO.FOR

```

*****
*                               DECISAO.FOR                               *
* Descr:                                                                  *
*   Prepara tabelas que auxiliam na analise das diferencas entre dois  *
*   conjuntos de resultados -- usado para a analise parametrica      *
*                                                                       *
*****
      SUBROUTINE INPINT(A,N)
      CHARACTER*(*) A
      WRITE(*,'(1X,A\)' )A
      READ(*,*)N
      RETURN
      END
      SUBROUTINE INPCAR(A,B)
      CHARACTER*(*) A
      CHARACTER*(*) B
      WRITE(*,1)A
1      FORMAT(' ',A\ )
      READ(*,2)B
2      FORMAT(A)
      RETURN
      END
C-----
      PROGRAM DECISAO
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
      CHARACTER PATH*20(7),ARQP*12,TITUL*20,TGS*8(7),RPATH*20,MLIN*7(10)
      REAL*8 DMED(7,10),VMAI(10),DMAI(10),ZMAI(10),DER(200,10),
      $VAR(200,10),ZC(200),VAR1(10),DVAR1(10),VAR2(10),DVAR2(10),FDIF(7)
      $,TWRX(7),TWRZ(7),TWRD(7),TWRM(7),TWIX(7),TWIZ(7),TWID(7),TWIM
      $(7),VELINT(7),XFINAL(7)
      DIMENSION NDIF(7)
      DATA MLIN /'<ESC>[11;OH','<ESC>[12;OH','<ESC>[13;OH','<ESC>[14;OH'
      $,'<ESC>[15;OH','<ESC>[16;OH','<ESC>[17;OH','<ESC>[18;OH',
      $'<ESC>[19;OH','<ESC>[20;OH'/
      CALL INPCAR('<ESC>[2JArquivo de Parametros =',ARQP)
      OPEN(4,FILE=ARQP)
      READ(4,*)NCFG,IFLTE

```



```

READ(4,*)TITUL,(PATH(I),I=1,NCFG),(TGS(I),I=1,NCFG),RPATH
OPEN(1,FILE=RPATH//'.ADP')
WRITE(1,('' Parametro analisado : '',A20)')TITUL
WRITE(1,(''-----'',
$''-----'',
$''-----''))
WRITE(1,*)'    Maiores diferencas (absolutas) :'
WRITE(1,(''-----'',
$''-----'',
$''-----''))
WRITE(1,('' Caso      Poros.   Vg      Tg      Vx      Tx  '',
$''  Press.   Tc      Conv.   Quer.   Bet.      Twr  '',
$''TwI''))
WRITE(1,(''-----'',
$''-----'',
$''-----''))

```

```

C    TWS
    WRITE(*,*)' Lendo  TWs... CASO : <ESC>[s1'
    I=1
    OPEN(21,FILE=PATH(1)//'TW.RES')
21   READ(21,8022,END=3000)ZC(I),(VAR(I,J),J=1,4)
    I=I+1
    GOTO 21
8022  FORMAT(F9.4,2X,F15.7,2X,F15.7,2X,F15.7,2X,F15.7)
3000  CONTINUE
    CLOSE(21)
    DO 22 IJ=2,NCFG
    WRITE(*,*)' <ESC>[u',IJ
    J3=IJ+20
    OPEN(J3,FILE=PATH(IJ)//'TW.RES')
    FDIF(IJ)=0.
    NDIF(IJ)=0
    TWRX(IJ)=0.
    TWRZ(IJ)=0.
    TWRD(IJ)=0.
    TWRM(IJ)=0.
    TWIX(IJ)=0.
    TWIZ(IJ)=0.
    TWID(IJ)=0.
    TWIM(IJ)=0.
    NMEDIA =0
25   READ(IJ+20,8022,END=4000)Z,(VAR1(J),J=1,4)
    II=1
26   IF (ABS(ZC(II)-Z).GT.0.0001)THEN
    if (zc(ii).gt.z) then

```

```

        write(*,*)'Tirar z=',z,'do caso',ij
        read (*,*)z
        stop
    endif
    II=II+1
    GOTO 26
ENDIF
C  CALCULO DO MAIOR    TW
    DIF=VAR1(1)-VAR(II,1)
    IF (ABS(DIF).GT.ABS(TWRD(IJ))) THEN
    IF (IFLTE.EQ.1)WRITE(*,*)Z,VAR1(1),DIF
    TWRD(IJ)=DIF
    TWRZ(IJ)=Z
    TWRX(IJ)=VAR1(1)
    ENDIF
C  CALCULO DA MEDIA
    TWRM(IJ)=TWRM(IJ)+ABS(DIF)
    FDIF(IJ)=FDIF(IJ)+ABS(VAR1(1)/VAR(II,1)-1)
    NDIF(IJ)=NDIF(IJ)+1
C  CALCULO DO MAIOR    TW
    DIF=VAR1(3)-VAR(II,3)
    IF (ABS(DIF).GT.ABS(TWID(IJ))) THEN
    TWID(IJ)=DIF
    TWIZ(IJ)=Z
    TWIX(IJ)=VAR1(3)
    ENDIF
C  CALCULO DA MEDIA
    TWIM(IJ)=TWIM(IJ)+ABS(DIF)
    FDIF(IJ)=FDIF(IJ)+ABS(VAR1(3)/VAR(II,3)-1)
    NDIF(IJ)=NDIF(IJ)+1
    NMEDIA=NMEDIA+1
    GOTO 25
4000  CONTINUE
    TWRM(IJ)=TWRM(IJ)/NMEDIA
    TWIM(IJ)=TWIM(IJ)/NMEDIA
    CLOSE(IJ+20)
22    CONTINUE

    I=1
    WRITE(*,*)' Lendo  CASO ... : <ESC>[s1'
    OPEN(7,FILE=PATH(1)//'VARI.RES')
    OPEN(14,FILE=PATH(1)//'DERIV.RES')
11    READ(7,8020,END=1000)ZC(I),(VAR(I,J),J=1,10)
    IF (ZC(I).EQ.1500)XFINAL(1)=VAR(I,8)
    READ(14,8021)Z,(DER(I,J),J=1,10)
    I=I+1

```

```
GOTO 11
CLOSE(7)
CLOSE(14)
8020  FORMAT(F9.4,1X,F10.7,1X,4(F13.7,1X),F10.7,1X,F13.7,3(1X,F10.7))
8021  FORMAT(F9.4,10(1X,D13.7))
1000  CONTINUE
      VELINT(1)=0.
      DO 12 IJ=2,NCFG
        WRITE(*,*)' <ESC>[u',IJ
        OPEN(IJ+6,FILE=PATH(IJ)//'VARI.RES')
        J2=IJ+13
        OPEN(J2,FILE=PATH(IJ)//'DERIV.RES')
        DO 13 J=1,10
          VELINT(IJ)=0.
          ZMAI(J)=0.
          VMAI(J)=0.
          DMAI(J)=0.
          DMED(IJ,J)=0.
13      CONTINUE
          READ(IJ+6,8020,END=2000)Z1,(VAR1(J),J=1,10)
          READ(IJ+13,8021)Z1,(DVAR1(J),J=1,10)
15      READ(IJ+6,8020,END=2000)Z2,(VAR2(J),J=1,10)
          READ(IJ+13,8021)Z2,(DVAR2(J),J=1,10)
          IF(Z2.EQ.Z1)THEN
            DO 14 J=1,10
14          DVAR1(J)=DVAR2(J)
            GOTO 15
          ENDIF
          IF (Z2.EQ.1500)XFINAL(IJ)=VAR2(8)
          II=1
16      IF (ABS(ZC(II)-Z1).GT.0.0001)THEN
          II=II+1
          GOTO 16
        ENDIF
31      IF (ABS(ZC(II+1)-Z2).GT.0.0001)THEN
          IF (ABS(ZC(II+1)-Z1).LT.0.0001)THEN
            II=II+1
            GOTO 31
          ELSE
            WRITE(*,*)'SITUACAO NAO PREVISTA'
            STOP
          ENDIF
        ENDIF
C      CALCULO DO MAIOR
        DO 17 J=1,10
```

```

        DIF=VAR1(J)-VAR(II,J)
        IF (ABS(DIF).GT.ABS(DMAI(J))) THEN
        IF(IFLTE.EQ.1) WRITE(*,2340)MLIN(J),J,Z1,VAR1(J),DIF
2340  FORMAT(' ',A7,'Var:',I2,' Z:',F6.1,
        $' Valor:',F12.6,' DIF:',F12.6)
        DMAI(J)=DIF
        ZMAI(J)=Z1
        VMAI(J)=VAR1(J)
        ENDIF
17  CONTINUE
C  CALCULO DA MEDIA
    HZ=Z2-Z1
    IF (IJ.EQ.2)THEN
    VELINT(1)=VELINT(1)+HZ*(VAR(II,4)+VAR(II+1,4))/2.+ (DER(II,4)-
    $DER(II+1,4))*HZ**2/12.
    ENDIF
    VELINT(IJ)=VELINT(IJ)+HZ*(VAR1(4)+VAR2(4))/2.+(DVAR1(4)-DVAR2(4))
    $*HZ**2/12.
    DO 18 J=1,10
    DMED(IJ,J)=DMED(IJ,J)+HZ/1500.*((VAR1(J)-VAR(II,J)+VAR2(J)-VAR(
    $II+1,J))/2.+ (DVAR1(J)-DER(II,J)-DVAR2(J)+DER(II+1,J))*HZ/12.)
    IF (VAR(II,J).EQ.0)THEN
    FDF=0.0
    NDIF(IJ)=NDIF(IJ)-1
    ELSE
    FDF=ABS(VAR1(J)/VAR(II,J)-1)
    ENDIF
    FDIF(IJ)=FDIF(IJ)+FDF
    NDIF(IJ)=NDIF(IJ)+1
18  CONTINUE
    Z1=Z2
    DO 19 J=1,10
    VAR1(J)=VAR2(J)
    DVAR1(J)=DVAR2(J)
19  CONTINUE
    GOTO 15
2000 CONTINUE
    FDIF(IJ)=FDIF(IJ)/NDIF(IJ)
    WRITE(1,'(''Zmaior  '' ,12(F8.3,1X))')(ZMAI(J),J=1,10),TWRZ(IJ)
    $,TWIZ(IJ)
    WRITE(1,'(A8,F8.5,1X,4(F8.2,1X),F8.5,1X,F8.2,3(1X,F8.5),
    $2(1X,F8.2))')TGS(IJ),(VMAI(J),J=1,10),TWRX(IJ),TWIX(IJ)
    DO 90 J=1,10
    IF (VMAI(J).EQ.0.AND.ZMAI(J).EQ.0.AND.DMAI(J).EQ.0)THEN
    VMAI(J)=1.

```

```

ENDIF
90  CONTINUE

WRITE(1,(''Relacao '' ,12(F8.4,1X))')(VMAI(J)/(VMAI(J)-DMAI(J))
$,J=1,10),TWRX(IJ)/(TWRX(IJ)-TWRD(IJ)),TWIX(IJ)/(TWIX(IJ)-TWID(IJ))
WRITE(1,(''-----'',
$''-----'',
$''-----''))
CLOSE(IJ+6)
CLOSE(IJ+13)
12  CONTINUE
C  TABELA DAS DIFERENCAS MEDIAS
WRITE(1,*)
WRITE(1,(''      DIFERENCAS MEDIAS :'''))
WRITE(1,(''-----'',
$''-----''))
WRITE(1,('' Variavel      '' ,6(3X,A8))')(TGS(I),I=2,NCFG)
WRITE(1,(''-----'',
$''-----''))
WRITE(1,('' Porosidade '' ,1P,6(1X,D10.3))')(DMED(IJ,1),IJ=2,NCFG)
WRITE(1,('' V gas      '' ,1P,6(1X,D10.3))')(DMED(IJ,2),IJ=2,NCFG)
WRITE(1,('' T gas      '' ,1P,6(1X,D10.3))')(DMED(IJ,3),IJ=2,NCFG)
WRITE(1,('' V xisto    '' ,1P,6(1X,D10.3))')(DMED(IJ,4),IJ=2,NCFG)
WRITE(1,('' T xisto    '' ,1P,6(1X,D10.3))')(DMED(IJ,5),IJ=2,NCFG)
WRITE(1,('' Pressao    '' ,1P,6(1X,D10.3))')(DMED(IJ,6),IJ=2,NCFG)
WRITE(1,('' T gcomb     '' ,1P,6(1X,D10.3))')(DMED(IJ,7),IJ=2,NCFG)
WRITE(1,('' Conversao  '' ,1P,6(1X,D10.3))')(DMED(IJ,8),IJ=2,NCFG)
WRITE(1,('' Querogenio  '' ,1P,6(1X,D10.3))')(DMED(IJ,9),IJ=2,NCFG)
WRITE(1,('' Betume      '' ,1P,6(1X,D10.3))')(DMED(IJ,10),IJ=2,
$NCFG)
WRITE(1,('' TWR        '' ,1P,6(1X,D10.3))')(TWRM(IJ),IJ=2,NCFG)
WRITE(1,('' TWI        '' ,1P,6(1X,D10.3))')(TWIM(IJ),IJ=2,NCFG)
WRITE(1,(''-----'',
$''-----''))
WRITE(1,('' FDIF (%) : '' ,1P,6(1X,F10.6))')(100*FDIF(IJ),IJ=2,
$NCFG)
WRITE(1,(''-----'',
$''-----''))
WRITE(1,('' CONV. FINAL'' ,1P,6(1X,D10.3))')(XFINAL(IJ),
$IJ=2,NCFG)
WRITE(1,('' Relacao(Cf)'' ,6(1X,F10.3))')(XFINAL(IJ)/XFINAL(1)
$,IJ=2,NCFG)
WRITE(1,('' TRESID      '' ,1P,6(1X,D10.3))')(1500.**2/VELINT(IJ),
$IJ=2,NCFG)
WRITE(1,('' Relacao(Tr)'' ,6(1X,F10.3))')(VELINT(1)/VELINT(IJ)
$,IJ=2,NCFG)

```

```

WRITE(1, '( '-----' ,
$ '-----' ) )
WRITE(1, '( ' TRESID      = ' ,1P,1X,D10.3,3X,A8) ' ) (1500.**2/
$VELINT(1)),tgs(1)

DO 9999 I=1,30
9999 CLOSE(I)
WRITE(*,*) 'GERAL.TAB.....'
OPEN (1,FILE=RPATH//' .TGA')
WRITE(1, '(1X,A20,1X,6(3X,A8)) ' )TITUL,(TGS(I),I=2,NCFG)
WRITE(1, '( ' FDIF (%) :      ' ,1P,6(1X,F10.6)) ' )
$(100*FDIF(IJ),IJ=2,NCFG)
CLOSE(1)
END

```

GRAFICOS.FOR

```

*****
*                                GRAFICOS.FOR                                *
* Descr:                                                                *
*   Prepara arquivos com dados para construcao de graficos.          *
*                                                                           *
*****

PROGRAM GRAFICOS
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
INTEGER*2 SYSTEM
CHARACTER PATH*20(7),ARQP*12,TITUL*20,TGS*8(7),RPATH*20,ISQ*1
$,MLIN*7(10),AUXIL*3,arqzs*12,ARQZ3S*12,APPAR*2,APVAR*2(12)
REAL*8 VAR(200,10),ZC(200),VAR1(10),VAR2(10)
$,ZS(50),G1(50,3),G2(50,3),G3(3)
DIMENSION IQCA(7)
DATA MLIN / '<ESC>[11;OH', '<ESC>[12;OH', '<ESC>[13;OH', '<ESC>[14;OH'
$, '<ESC>[15;OH', '<ESC>[16;OH', '<ESC>[17;OH', '<ESC>[18;OH',
$ '<ESC>[19;OH', '<ESC>[20;OH' /
DATA APVAR / 'PO', 'VG', 'TG', 'VX', 'TX', 'PR', 'TC', 'XP', 'QX', 'BX',
$ 'WR', 'WI' /
CALL INPCAR(' <ESC>[2JArquivo de Parametros =',ARQP)
OPEN(4,FILE=ARQP)
READ(4,*)NCFG,IFLTE
READ(4,*)TITUL,(PATH(I),I=1,NCFG),(TGS(I),I=1,NCFG),RPATH
READ(4,*)APPAR,NC

```

```

      READ(4,*)(IQCA(I),I=1,NC)
      READ(4,*)NG
      READ(4,*)ARQZS,ARQZ3S
      READ(4,*)NVAR
      READ(4,*)ISQ
      IF (NG.NE.3) THEN
        OPEN(2,FILE=ARQZS)
      ELSE
        OPEN(2,FILE=ARQZ3S)
        OPEN(1,FILE=RPATH//APPAR//'3'//APVAR(NVAR)//ISQ//'.DAT')
      ENDIF
      READ(2,*)NZ
      READ(2,*)(ZS(I),I=1,NZ)
      CLOSE(2)
      IF (NVAR.GT.10) THEN
C      TWS
      WRITE(*,*)' Lendo TWs... CASO : <ESC>[s1'
      I=1
      OPEN(21,FILE=PATH(1)//'TW.RES')
21      READ(21,8022,END=3000)ZC(I),(VAR(I,J),J=1,4)
      I=I+1
      GOTO 21
8022      FORMAT(F9.4,2X,F15.7,2X,F15.7,2X,F15.7,2X,F15.7)
3000      CONTINUE
      CLOSE(21)
      DO 22 IJO=1,NC
      IJ=IQCA(IJO)
      WRITE(*,*)' <ESC>[u',IJ
      J3=IJ+20
      OPEN(J3,FILE=PATH(IJ)//'TW.RES')
      IZGR=0
5000      IZGR=IZGR+1
25      READ(IJ+20,8022,END=4000)Z,(VAR1(J),J=1,4)
      IF ((ZS(IZGR)-Z).GT.0.001) GOTO 25
      ZS(IZGR)=Z
      II=1
26      IF (ABS(ZC(II)-Z).GT.0.0001)THEN
      II=II+1
      GOTO 26
      ENDIF
      IF(NG.NE.3) THEN
C      GRAFICO 1 E 2
      IF (NVAR.EQ.11)THEN
        G1(IZGR,IJO)=VAR1(1)
        IF(VAR(II,1).EQ.0) THEN

```

```

        G2(IZGR,IJO)=100.*(VAR1(1)-VAR(II,1))
    ELSE
        G2(IZGR,IJO)=100.*(VAR1(1)-VAR(II,1))/VAR(II,1)
    ENDIF
ELSE
    G1(IZGR,IJO)=VAR1(3)
    IF(VAR(II,3).EQ.0) THEN
        G2(IZGR,IJO)=100.*(VAR1(3)-VAR(II,3))
    ELSE
        G2(IZGR,IJO)=100.*(VAR1(3)-VAR(II,3))/VAR(II,3)
    ENDIF
ENDIF
ELSE
    GRAFICO 3
    IF (NVAR.EQ.11) THEN
        G3(IZGR)=VAR1(1)
    ELSE
        G3(IZGR)=VAR1(3)
    ENDIF
ENDIF
IF(IZGR.LT.NZ) GOTO 5000
IF(NG.EQ.3) THEN
    WRITE(1,'(A8,3(3X,F15.3))')TGS(IJ),(G3(I),I=1,NZ)
ENDIF
4000 CONTINUE
CLOSE(IJ+20)
22 CONTINUE
ELSE
    I=1
    WRITE(*,*)' Lendo CASO ... : <ESC>[s1'
    OPEN(7,FILE=PATH(1)//'VARI.RES')
11 READ(7,8020,END=1000)ZC(I),(VAR(I,J),J=1,10)
    I=I+1
    GOTO 11
8020 FORMAT(F9.4,1X,F10.7,1X,4(F13.7,1X),F10.7,1X,F13.7,3(1X,F10.7))
C8021 FORMAT(F9.4,10(1X,D13.7))
1000 CONTINUE
CLOSE(7)
DO 12 IJO=1,NC
    IJ=IQCA(IJO)
    WRITE(*,*)' <ESC>[u',IJ
    OPEN(IJ+6,FILE=PATH(IJ)//'VARI.RES')
    IZGR=0
5500 IZGR=IZGR+1
5250 READ(IJ+6,8020,END=2000)Z1,(VAR1(J),J=1,10)

```



```

        IF (ABS(ZS(IZGR)-Z1).GT.0.001) GOTO 5250
        II=1
16      IF (ABS(ZC(II)-Z1).GT.0.0001) THEN
        II=II+1
        GOTO 16
        ENDIF
19      CONTINUE
        IF(NG.NE.3) THEN
C        GRAFICO 1 E 2
          G1(IZGR,IJO)=VAR1(NVAR)
          IF(VAR(II,NVAR).EQ.0) THEN
            G2(IZGR,IJO)=100.*(VAR1(NVAR)-VAR(II,NVAR))
          ELSE
            G2(IZGR,IJO)=100.*(VAR1(NVAR)-VAR(II,NVAR))/VAR(II,NVAR)
          ENDIF
        ELSE
C        GRAFICO 3
          G3(IZGR)=VAR1(NVAR)
        ENDIF
        IF(IZGR.LT.NZ) GOTO 5500
        IF(NG.EQ.3) THEN
          IF (NVAR.EQ.1.OR.NVAR.EQ.6.OR.NVAR.EQ.8.OR.NVAR.EQ.9.OR.
$NVAR.EQ.10) THEN
            WRITE(1,'(A8,3(3X,F15.7))')TGS(IJ),(G3(I),I=1,NZ)
          ELSE
            WRITE(1,'(A8,3(3X,F15.3))')TGS(IJ),(G3(I),I=1,NZ)
          ENDIF
        ENDIF
2000    CONTINUE
        CLOSE(IJ+6)
12      CONTINUE
        ENDIF
C        ESCREVE GRAFICOS 1 E 2
        WRITE(*,*)'CONTROL.LOG.....'
        I=SYSTEM('TM /LOG >>CONTROL.LOG'//CHAR(0))
        OPEN (1,FILE='CONTROL.LOG')
9898    READ(1,'(A3/)',END=9897)AUXIL
        GOTO 9898
9897    BACKSPACE 1
        WRITE(1,'('' Parametro estudado :'',A20,'' Variavel :'',A2)')
        $TITUL,APVAR(NVAR)
        IF (NG.NE.3) THEN
          OPEN(5,FILE=RPATH//APPAR//'1'//APVAR(NVAR)//ISQ//'.DAT')
          OPEN(6,FILE=RPATH//APPAR//'2'//APVAR(NVAR)//ISQ//'.DAT')
          DO 5010 II=1,NZ

```

```

      IF (NVAR.EQ.1.OR.NVAR.EQ.6.OR.NVAR.EQ.8.OR.NVAR.EQ.9.OR.
$NVAR.EQ.10)THEN
      WRITE(5,8030)ZS(II),(G1(II,J),J=1,NC)
      WRITE(6,8030)ZS(II),(G2(II,J),J=1,NC)
      ELSE
      WRITE(5,8031)ZS(II),(G1(II,J),J=1,NC)
      WRITE(6,8030)ZS(II),(G2(II,J),J=1,NC)
      ENDIF
5010  CONTINUE
      CLOSE(5)
      CLOSE(6)
8030  FORMAT(F8.2,3(3X,F15.7))
8031  FORMAT(F8.2,3(3X,F15.3))
C     CABECALIO NO LOG  G1 E G2
C     TABELA GRAF1 e 2
      WRITE(1,*)'-----'
$-----'
      WRITE(1,'(1X,' ' Z(cm) ' ',6(6X,A8,4X))')(TGS(IQCA(I)),I=1,NC)
      WRITE(1,*)'-----'
$-----'
      CLOSE(1)
      ELSE
C     CABECALIO NO LOG  G3
      WRITE(1,*)'-----'
$-----'
      WRITE(1,'(A8,3(2X,' 'Z=' ',F9.3,5X))')'CASO :',(ZS(I),I=1,NZ)
      WRITE(1,*)'-----'
$-----'
      ENDIF
      DO 9999 I=1,30
9999  CLOSE(I)
      END

```

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] ALLRED, V. D. Kinetics of oil shale pyrolysis. Chem. Eng. Prog., Littleton, v.62, n.8, p.55 – 60, aug.1966.
- [2] ALLRED, V. D. Kinetics of oil shale pyrolysis. Chem. Eng. Prog. Symp. Series, v.63, p.100 – 111, 1966.
- [3] ARASTOOPOUR, H., GIDASPOW, D. Analysis of IGT pneumatic conveying data and fast fluidization using a thermodynamic model. Powder Technology, v.22, p. 77 – 87, 1979.
- [4] ARASTOOPOUR, H., GIDASPOW, D. Vertical pneumatic conveying using four hydrodynamic models. I&EC Fundamentals, v.18, p. 123 – 130, 1979.
- [5] AZAD, F. H., MODEST, M. F. Combined radiation and convection in absorbing, emitting and anisotropically scattering gas-particulate tube flow. Int. J. Heat Mass Transfer, v.24, n.10, p.1681 – 1698, 1981.
- [6] BERKER, A., TULIG, T. J. Hydrodynamic of gas-solid flow in a catalytic cracker riser: implications for reactor selectivity performance. Chem. Eng. Sci., London, v.41, n.4, p.821 – 827, 1986.
- [7] BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N. Transport phenomena. New York : Wiley, 1960. 780p.
- [8] BOOTHROYD, R. G., HAQUE, H. Fully developed heat transfer to a gaseous suspension of particles flowing turbulently in ducts of different size. J. Mech. Eng. Science, v.12, n.3, p.191 – 200, 1970.
- [9] BUDDE, K., HEBECKER, D., SCHMIDT, H. Mathematical description of heat transfer process in flowing suspension at high temperatures. Inter. Chem. Eng., Berlin, v. 18, n.4, p.575 – 581, 1978.

- [10] CAMPBELL, J.H., COBURN, T.T. Oil shale retorting: effects of particle size and heating rate on oil evolution and intraparticle oil degradation. In Situ, v.2, n.1, p.1 – 47, 1978.
- [11] CAPES, C. E., NAKAMURA, K. Vertical pneumatic conveying: an experimental study with particles in the intermediate and turbulent flow regimes. Canadian J. of Chem. Eng., Ontario, v. 51, p.31 – 38, 1973.
- [12] CAREY, G. F., FINLAYSON, B. A. Orthogonal collocation on finite elements. Chem. Eng. Sci., v.30, p.587 – 596, 1975.
- [13] DAVIDSON, J. J. Symposium on fluidization: discussion. Trans. Inst. Chem. Eng., v.39, p.230 – 232, 1961.
- [14] DAVIS, M. E. Numerical methods and modeling for chemical engineers. New York : John Wiley & Sons, 1978. 258p.
- [15] DEPEW, C. A. Heat transfer to pneumatically conveyed glass particles of fixed size. Journal of Heat Transfer, Trans. ASME, v.85, p.164 – 172, may 1963.
- [16] DRUKER, J. B., GONÇALVES, C. A. Estudo comparativo de perdas térmicas em tanques de grande porte. B. téc. Petrobrás, Rio de Janeiro, v.19, n.1, p.13 – 19, mar.1976.
- [17] DUNG, N. V. A mathematical model of dilute phase transport combustion of spent oil shale. Fuel Processing Technology, Amsterdam, v.17, p.235 – 262, 1988.
- [18] ECHIGO, R. et al. Radiative heat transfer by solid suspension laminar flow, with a radiating fluid in a circular tube with constant wall temperature. International Chem. Eng., v.13, n.3 , p.546 – 552, jul.1973.
- [19] FAN, L., SATIJA, S. Noncatalytic gas-solid reactions in a vertical pneumatic transport reactor. AIChE Journal, v.30, n.1, p.21 – 29, jan.1984.
- [20] FARBAR, L., MORLEY, M. J. Heat transfer to flowing gas-solids mixtures in a circular tube. Ind. and Eng. Chem., v.49, n.7, p.1143 – 1150, jul.1957.
- [21] FINLAYSON, B. A. Nonlinear analysis in chemical engineering. New York : McGraw-Hill, 1980. 366p.

- [22] FREIRE, J. T., GUBULIN, J. C.
Tópicos especiais em sistemas particulados, v.2, 1986.
- [23] GIDASPOW, D. Hydrodynamic of fluidization and heat transfer:
supercomputer modeling. Appl. Mech. Rev., v.39, n.1, p.1 – 23, jan.1986.
- [24] GIDASPOW, D. One dimensional steady gas-solid flow. Lecture notes, 28
p.
- [25] GIDASPOW, D., ETTEHADIEH, B. Fluidization in two-dimensional beds
with a jet. 2. hidrodynamic modeling. Ind. Eng. Chem. Fundamen., v.22,
n.2, p.193 – 201, 1983.
- [26] GONTARSKI, C. A. U. et al. Aplicação do método de colocação ortogonal
em elementos finitos na simulação de um reator de leito de arraste.
Anais do II Seminário de Transferência e Recuperação de Calor, Rio de
Janeiro, v.1, p. 55 – 77, jun.1990.
- [27] HEHL, M. E. Linguagem de programação estruturada:FORTRAN 77. São
Paulo : McGraw-Hill, 1986.
- [28] HILL JR., C. G. An introduction to chemical engineering kinetics
& reactor design. New York : John Wiley & Sons, 1977. 594p.
- [29] HOLMAN, J. P. Transferência de calor. São Paulo : McGraw-Hill, 1983.
639p.
- [30] HOOKE, R., JEEVES, T. A. Direct search solution of numerical and
statistical problems. J. Assoc. Comp. Mach., v.8, p.212 – 229, 1961.
- [31] JENSON, V. G., JEFFREYS, G. V. Mathematical methods in chemical
engineering. 2.ed. New York : Academic Press, 1977. 599p.
- [32] JEPSON, G. et al. Heat transfer from gas to wall in a gas/solids transport
line. Trans. Instn. Chem. Engrs., v.41, p.207 – 211, 1963.
- [33] KONNO, H., SAITO, S. Pneumatic conveying of solids through straight
pipes. Journal of Chem. Eng. of Japan, Tokio, v.2, n.2, p.211 – 217, 1969.

- [34] MARTIGNONI, W. P., GOLDSTEIN Jr, L., SANTANA, C. C. Estudo preliminar da modelagem da pirólise de finos de xisto em leito de arraste. Anais do I Congresso Brasileiro de Transferência de Calor e Massa, p.367 – 377, 1987.
- [35] MARTIGNONI, W. P. Modelagem e simulação aplicada ao desenvolvimento de um processo de pirólise de xisto. Anais do III Simpósio Paranaense de Engenharia na Indústria, Curitiba, 1988.
- [36] MARTIGNONI, W. P. et al. Desenvolvimento experimental de um processo para pirólise de finos de xisto. Anais do II Simpósio Nacional sobre Fontes Novas e Renováveis de Energia (SINERGE), Curitiba, 1989.
- [37] McADAMS W. H. Heat transmission. 3.ed. New York : McGraw-Hill, 1954. 532p.
- [38] MEIER, H. F. Modelagem, simulação e otimização de um reator de leito móvel para pirólise de finos de xisto. Campinas, 1990. 140p. Dissertação (Mestrado em Desenvolvimento de Processos) - Curso de Pós-Graduação em Engenharia Química, UNICAMP.
- [39] MICKLEY, H. S., SHERWOOD, T. K., REED, C. E. Applied mathematics in chemical engineering. 2.ed. New Delhi : Tata McGraw-Hill, 1984.
- [40] MIKHEYEV, M. Fundamentals of heat transfer. Moscow : Peace, [s.d.] 376p.
- [41] MINOUX, M. Mathematical programming; theory and algorithms. London : John Wiley & Sons, 1986. 489p.
- [42] NAKAMURA, K., CAPES, C. E. Vertical pneumatic conveying: a theoretical study of uniform and annular particle flow models. The Canadian J. of Chem. Eng., v.51, p.39 – 46, 1973.
- [43] NUNES, N. V., LAVAQUIAL, F. P. Aquecimento de tanques a vapor. B. téc. Petrobrás, Rio de Janeiro, v.14, p.69 – 82, jun.1971.
- [44] PACITTI, T., ATKINSON, C. P. Programação e métodos computacionais. 2.ed. Rio de Janeiro : LTC – Livros Técnicos e Científicos Ed., 1977. 665p.

- [45] PERRY, R. H. et al. Chemical engineers' handbook. 4.ed. New York : McGraw-Hill, 1963.
- [46] PETROBRÁS-SIX. Livro de dados básicos. São Mateus do Sul.
- [47] REDDY, K. V. S., PEI, D. C. T. Particle dynamic in solid-gas flow in a vertical pipe. I&EC Fundamentals, v.8, n.3, p.490 - 497, 1969.
- [48] REID, R. C., PRAUSNITZ, J. M., SHERWOOD, T. K. The properties of gases and liquids. 3rd edition, Ed. McGraw-Hill Book Company, 1977.
- [49] ROWE, P. N. Drag forces in a hidraulic model of fluidized bed. Trans. Inst. Chem. Eng., v.39, p.175 - 180, 1961.
- [50] SADEK, S. E. Heat transfer to air-solids suspensions in turbulent flow. Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., v.11, n.1, p.133 - 135, 1972.
- [51] SANDHU, S. S., HASHEMI, H. R. A model for simultaneous heating and devolatilization for a single coal particle in a hot gas stream in the presence of a thermal radiative field. AIChE Journal, v.31, n.10, p.1714 - 1717, 1985.
- [52] SHARP DO BRASIL. Matriz inversa. IN: _____. PC-1211 R/RP - Manual de Programação. Editora da Sharp. 306 p. p.3 - 4.
- [53] SIEDAR, E. N., TATE, C. E. Heat transfer and pressure drop of liquids in tubes. Ind. Eng. Chem., v.28, p.1429, 1936.
- [54] STEMERDING, S. The pneumatic transport of cracking catalyst in vertical risers. Chem. Eng. Sci., v.17, p.599 - 608, 1962.
- [55] TORREZAN, L., SARTORI, D., SANTANA, C. C. Coeficiente global de transferência de calor gás-sólidos no transporte pneumático. Anais do XI Encontro Sobre Escoamento em Meios Porosos, v.I, p. 94 - 107, 1983.
- [56] UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ. Biblioteca Central. Normas para apresentação de trabalhos. Curitiba : Editora da Universidade Federal do Paraná, 1981. 183p.
- [57] VILLADSEN, J. V., MICHELSEN, M. L. Solutions of Differential Equations Models by Polynomial Aproximation. New Jersey : Ed. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1978.

- [58] VILLADSEN, J. V., STEWART, W. E. Solution of boundary-value problems by orthogonal collocation. Chem. Eng. Sci., v.22, p.1483 - 1501, 1967.
- [59] VORTMEYER, D., SCHAEFER, R. J. Equivalence of one and two-phase models for heat transfer process in packed beds: one dimensional theory. Chem. Eng. Sci., v.29, p.485 - 491, 1974.
- [60] WEN, C. Y., YU, Y. H. Mechanics of fluidization. Chem. Eng. Prog. Symp. Series, v.62, n.62, p.100 - 111, 1965.
- [61] WHITE, R. E. An Introduction to the Finite Element Method with Applications to Nonlinear Problems. New York : John Wiley & Sons, 1985.
- [62] WILKINSON, G. T., NORMAN, J. R. Heat transfer to a suspension of solids in a gas. Trans. Instn. Chem. Engrs., v.45, p.314 - 318, 1967.
- [63] YANG, W. C. Correlations for solid friction factors in vertical and horizontal pneumatic conveyings. AIChE Journal, v.20, p.605 - 607, 1974.
- [64] YAWS, C. L. et al. Correlation constant for chemical compounds. Chem. Eng., p.79 - 87, aug.1976.
- [65] ZENZ, F. A. Two phase fluid-solid flow. Ind. Eng. Chem., v.41, p.2801 - 2806, 1949.