



Comunicação Científica

ANÁLISE DA COMBUSTÃO INCOMPLETA: UM PROCESSO DE MODELAGEM MATEMÁTICA

GT 04 – Modelagem Matemática

Renan Gabbi, UNIJUÍ, renan.matematica@yahoo.com.br
Ângela Patricia Spilimbergo, UNIJUÍ, patspi@unijui.edu.br

Resumo: Este trabalho destina-se ao estudo da composição e das propriedades dos produtos de combustão de combustíveis de biomassa, utilizados em instalações energéticas como fornalhas para secagem de grãos. Para o cálculo foi utilizado o modelo Alemassov *et al.* (1973) que é descrito pelas equações: da dissociação das moléculas/radicais em átomos, da conservação da quantidade de átomos nos produtos de combustão e a equação de Dalton. Essas equações formam um volumoso sistema de equações algébricas não lineares, que é resolvido pelo método de Newton. Para determinar as propriedades foi aplicado o modelo de processos quimicamente equilibrados em conjunto com o método do “meio local reagente”. Este método é utilizado com o objetivo de avaliar a combustão incompleta na composição e nas propriedades dos produtos de combustão. Foram obtidas informações sobre as propriedades dos produtos de combustão de quatro combustíveis de biomassa, considerando que 5% do CH_4 não participam do processo de combustão, constituindo assim o que se chama de “meio local reagente” (MLR). Os cálculos determinaram as propriedades dos produtos de combustão tais como; composição, temperatura, calor específico “equilibrado” e “congelado”, massa molecular média, viscosidade, condutibilidade térmica, entre outras.

Palavras-chave: Biomassa; Combustão Incompleta; Equilíbrio Químico; Modelagem Matemática.

Introdução

Em várias instalações energéticas (fornos, caldeiras, geradores de gás, propulsores, fornalhas, etc.) para criar energia mecânica, elétrica ou térmica são realizados processos de combustão e no resultado desses processos aparecem os produtos de combustão. A composição e as propriedades desses produtos são de grande importância para os projetistas, quando da elaboração do projeto de construção de uma respectiva instalação. Por exemplo:

- para a determinação de regimes de funcionamento de fornalhas para secagem de grãos (rendimento, transferência de calor nas paredes, etc.) é necessário conhecer a temperatura dos produtos de combustão, o calor específico e a viscosidade entre outros;



Comunicação Científica

- para determinação das características de fluxos reagentes em tubeiras, é necessário conhecer ao longo da tubeira, a temperatura, a pressão, a massa molecular média, a viscosidade e também a velocidade e o impulso específico na saída.

Os processos de combustão em diferentes instalações energéticas são descritos muitas vezes por modelos que consideram que o meio reagente permanece no estado de equilíbrio químico. Entre esses modelos os mais conhecidos são Alemassov *et al.* (1973) e Gordon e McBride (1971). Eles levam em conta processos de dissociação em meios reagentes de alta temperatura e são descritos por um sistema de equações algébricas não lineares.

O presente trabalho destina-se ao estudo da influência da combustão incompleta na composição e nas propriedades dos produtos de combustão de combustíveis de biomassa, (dois tipos de lixo urbano e dois tipos de papelão), que podem ser utilizados em fornalhas para secagem de grãos (Fig. 1), com o objetivo de gerar ar quente, levando em conta que o meio reagente se encontra no estado de equilíbrio químico. Para o cálculo da composição e das propriedades se utiliza o modelo Alemassov *et al.* (1973) em conjunto com o “método do meio local reagente” (Spilimbergo *et al.*, 1998). Entre as principais propriedades pode-se citar: temperatura, calor específico, massa molecular média, viscosidade, condutibilidade térmica, entre outras.

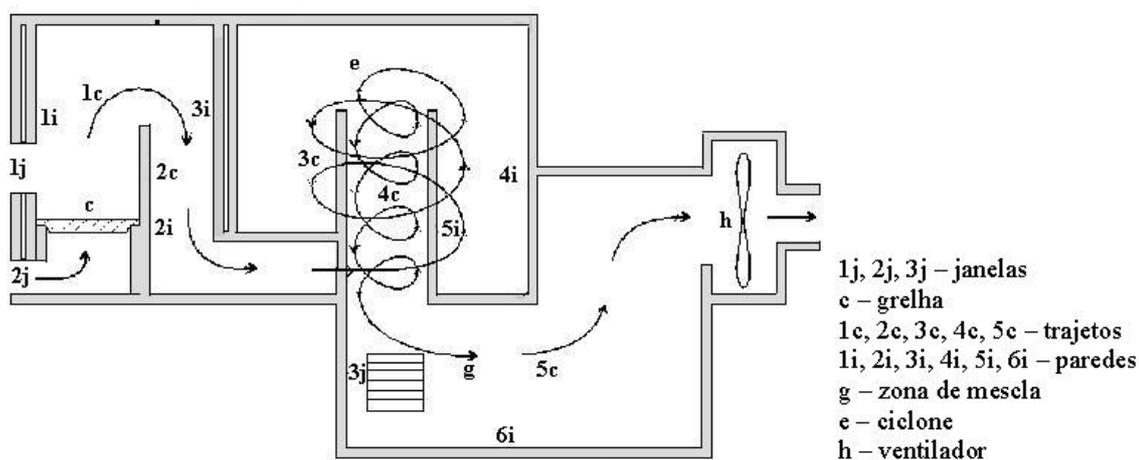


Figura 1 - Esquema de uma fornalha para secagem de grãos



Comunicação Científica

Materiais e Métodos

Durante o desenvolvimento da pesquisa utilizou-se a metodologia da modelagem matemática em conjunto com *softwares*, os quais possibilitaram chegar aos resultados finais. Os dados iniciais de cada combustível pesquisado, para a realização de simulações numéricas, foram obtidos da literatura (Jenkins, 1990). E para o estudo dos métodos numéricos de resolução de sistemas de equações algébricas não lineares realizaram-se revisões bibliográficas.

Modelo Matemático

O modelo Alemassov *et al.* (1973) está descrito detalhadamente em Auth e Iskhacova (1996) e está baseado nas seguintes suposições: todas as substâncias estão em equilíbrio químico entre si e com a temperatura (T) e a pressão (P); a priori está definido o conjunto das substâncias, que é constituído por “m” tipos de moléculas e radicais ($j = 1, \dots, m$) e “n” tipos de átomos ($i = 1, \dots, n$); para cada substância (átomo ou molécula/radical) são conhecidas as dependências: $H_q = f(T)$ e $S_q^0 = f(T)$, sendo $q = m + n$, ou seja, todas as substâncias do meio reagente: átomos e moléculas/radicais, H_q a entalpia molar da q -ésima substância e S_q^0 entropia da q -ésima substância quando $P = 1\text{atm}$; é válida a equação de estado do gás ideal para cada substância reagente gasosa.

Equações do Modelo

O modelo Alemassov *et al.* (1973) é constituído basicamente por três tipos de equações, descritas a seguir.

1) A equação da dissociação das moléculas nos átomos, que fornecesse um número de equações igual ao número de moléculas do meio reagente:



Comunicação Científica

$$\frac{\prod_i P_i^{a_{ij}}}{P_j} = K_j \quad (1)$$

onde, P_i e P_j são as pressões parciais do átomo i e molécula (radical) j , a_{ij} é a quantidade do átomo i em uma molécula (radical) j e K_j é a constante de dissociação pela pressão.

2) A equação da conservação da quantidade de átomos nos produtos de combustão, que fornecesse um número de equações igual ao número de átomos contidos no meio reagente:

$$\sum_j a_{ij} \cdot P_j + P_i = M_p \cdot b_{ip} \quad (2)$$

onde, M_p é a constante de proporcionalidade que assegura $P_q = n_q$ (P_q e n_q são respectivamente, a pressão parcial e a quantidade dos moles da q -ésima substância dos produtos de combustão) e b_{ip} é a quantidade do i -ésimo átomo na fórmula condicional do propelente (Spilimbergo, Castelli e Auth, 1999).

3) Equação de Dalton:

$$\sum_{q=1}^{m+n} P_q = P \quad (3)$$

Se forem conhecidos os valores da pressão P e da temperatura T é possível determinar as grandezas P_i , P_j , e M_p . Mas como regra para condições de combustão, a temperatura T é incógnita e neste caso, junto com (1)-(3), é necessário utilizar a equação da energia:

$$I_p - I_{pc} = 0 \quad (4)$$

onde, I_p e I_{pc} são as entalpias mássicas do propelente e dos produtos de combustão, respectivamente. As relações (1)-(3) fornecem um volumoso sistema de equações algébricas não lineares, e para sua resolução utiliza-se o método de Newton. Para este trabalho, no modelo Alemassov *et al.* (1973), foi então incluído o conceito de MLR, pois frequentemente em câmaras de combustão, o processo de combustão não se realiza totalmente devido à mistura não ser uniforme, ou seja, alguma parte do combustível pode



Comunicação Científica

não participar do processo de combustão. Tradicionalmente, a avaliação dessas alterações é realizada com base na diminuição da entalpia do bipropelente, admitindo que, parte de energia “desaparece”. Este procedimento pode avaliar a temperatura dos produtos de combustão, mas apresenta erros consideráveis, na composição dos produtos de combustão. O método MLR não apresenta esta falha.

Exemplos das equações do modelo considerando a combustão incompleta

Considerando como bipropelente o “ $\text{CH}_4 + \text{N}_{52}\text{O}_{14}$ ”, mostrar-se-á as equações do modelo de equilíbrio químico, considerando a combustão incompleta. Para tanto, admite-se que, além do meio reagente principal (C, H, N, O, H_2 , O_2 , OH, H_2O , CH_4 , N_2 , CO e CO_2), existe na câmara de combustão uma pequena zona, chamada Meio Local Reagente (MLR), que contém somente o combustível (CH_4) e possui temperatura igual a do meio principal. Admitindo-se que 95% do CH_4 fica no meio principal e 5% no meio local, é evidente que o meio local inclui apenas os átomos C e H e as moléculas CH_4 e H_2 . Para distingui-los das mesmas substâncias que estão no meio principal são utilizados novos símbolos: Cx, Hx, CxHx_4 e Hx_2 . Com relação ao combustível, sua entalpia (I_c) não é alterada, mas sua fórmula condicional deverá se apresentar na forma: $[\text{C}_{0,95}\text{H}_{3,8}\text{Cx}_{0,05}\text{Hx}_{0,2}]$. Supondo-se que $P=100$ atm e $\alpha_{\text{ox}} = 0,8$, obtém-se a fórmula condicional do bipropelente que é dada por: $[\text{C}_{0,95}\text{H}_{3,8}\text{Cx}_{0,05}\text{Hx}_{0,2}\text{N}_{3,2}\text{O}_{1,2}]$. Além disso, admite-se que o meio reagente total (principal + local) é constituído pelas substâncias: C, H, N, O, H_2 , O_2 , OH, H_2O , CH_4 , N_2 , CO, CO_2 , CxHx_4 , Hx_2 , Cx e Hx. Dessa forma, automaticamente, o sistema de equações inicial será complementado pelas equações de dissociação das moléculas Hx_2 e CxHx_4 , pelas equações da conservação dos átomos Hx e Cx e na equação de Dalton serão acrescentadas as pressões parciais das substâncias do MLR, como mostrado a seguir.

a) Equação de Dalton:

$$P_C + P_H + P_N + P_O + P_{\text{Hx}} + P_{\text{Cx}} + P_{\text{H}_2} + P_{\text{O}_2} + P_{\text{OH}} + P_{\text{H}_2\text{O}} + P_{\text{CH}_4} + P_{\text{N}_2} + P_{\text{CO}} + P_{\text{CO}_2} + P_{\text{CxHx}_4} + P_{\text{Hx}_2} = 100$$



Comunicação Científica

b) Equações da conservação da quantidade de átomos:

- 1) átomo C $\Rightarrow P_{CH_4} + P_{CO} + P_{CO_2} + P_C = 0,95 \cdot Mp$
- 2) átomo H $\Rightarrow 2P_{H_2} + P_{OH} + 2P_{H_2O} + 4P_{CH_4} + P_H = 3,8 \cdot Mp$
- 3) átomo N $\Rightarrow 2P_{N_2} + P_N = 1,2 \cdot Mp$
- 4) átomo O $\Rightarrow 2P_{O_2} + P_{OH} + P_{H_2O} + P_{CO} + P_{CO_2} + P_O = 3,2 \cdot Mp$
- 5) átomo Hx $\Rightarrow 4P_{C_xH_x} + 2P_{H_x_2} + P_{H_x} = 0,2 \cdot Mp$
- 6) átomo Cx $\Rightarrow P_{C_xH_x_4} + P_{C_x} = 0,05 \cdot Mp$

c) Equações da dissociação das moléculas/radicais nos átomos:

$$\text{Molécula/radical } H_2 \Rightarrow \frac{P_H^2}{P_{H_2}} = K_{H_2}$$

$$\text{Molécula/radical } N_2 \Rightarrow \frac{P_N^2}{P_{N_2}} = K_{N_2}$$

$$\text{Molécula/radical } O_2 \Rightarrow \frac{P_O^2}{P_{O_2}} = K_{O_2}$$

$$\text{Molécula/radical } CO \Rightarrow \frac{P_C \cdot P_O}{P_{CO}} = K_{CO}$$

$$\text{Molécula/radical } OH \Rightarrow \frac{P_H \cdot P_O}{P_{OH}} = K_{OH}$$

$$\text{Molécula/radical } CO_2 \Rightarrow \frac{P_C \cdot P_O^2}{P_{CO_2}} = K_{CO_2}$$

$$\text{Molécula/radical } H_2O \Rightarrow \frac{P_H^2 \cdot P_O}{P_{H_2O}} = K_{H_2O}$$

$$\text{Molécula/radical } C_xH_x_4 \Rightarrow \frac{P_{C_x} \cdot P_{H_x}^4}{P_{C_xH_x_4}} = K_{C_xH_x_4}$$

$$\text{Molécula/radical } CH_4 \Rightarrow \frac{P_C \cdot P_H^4}{P_{CH_4}} = K_{CH_4}$$

$$\text{Molécula/radical } H_x_2 \Rightarrow \frac{P_{H_x}^2}{P_{H_x_2}} = K_{H_x_2}$$

Simulações Numéricas

Utilizando o aplicativo existente foram realizados vários cálculos para determinar as propriedades dos produtos de combustão de combustíveis de biomassa, avaliando a influência da combustão incompleta desses combustíveis. As informações necessárias sobre os combustíveis foram obtidas em Jenkins (1990) e preparadas conforme mostrado



Comunicação Científica

em Spilimbergo *et al.* (1998). Os combustíveis de biomassa utilizados foram dois tipos de papelão e dois tipos de lixo urbano.

Pode-se considerar a combustão incompleta de algumas substâncias voláteis (CO , CH_4 , C_2H_4 , C_6H_6 , etc.) que saem do combustível no andamento do seu aquecimento. Em particular neste trabalho, admite-se que o metano (CH_4 liberado, leva 5% do carbono contido no combustível) não se mistura com o oxidante e só decompõe-se atingindo a mesma temperatura do meio reagente. Este efeito deve influir nas características dos produtos de combustão. Admite-se que o meio principal é constituído pelas substâncias H, O, N, C, Ar, Si, H_2 , O_2 , H_2O , CO , CO_2 , OH, CH, N_2 , NO, SiO_2^* , C^* e o MLR pelas substâncias: H_x , C_x , H_xH_2 , $\text{C}_x\text{H}_x\text{H}_4$ e C_x^* . A Tabela 1 mostra as fórmulas condicionais dos quatro combustíveis pesquisados, considerando a combustão completa e incompleta.

Tabela 1 – Fórmulas condicionais dos combustíveis pesquisados

Combustível	Combustão Completa	Combustão Incompleta
Lixo Urbano 1	$[\text{C}_{3,97}\text{H}_{6,00}\text{O}_{2,46}\text{N}_{0,11}\text{Si}_{0,20}]$	$[\text{C}_{3,77}\text{H}_{4,80}\text{O}_{2,46}\text{N}_{0,11}\text{Si}_{0,20}\text{C}_x\text{H}_x\text{H}_2]_{0,20}$
Lixo Urbano 2	$[\text{C}_{2,83}\text{H}_{4,60}\text{O}_{2,67}\text{N}_{0,08}\text{Si}_{0,63}]$	$[\text{C}_{2,69}\text{H}_{3,68}\text{O}_{2,67}\text{N}_{0,08}\text{Si}_{0,63}\text{C}_x\text{H}_x\text{H}_2]_{0,14}$
Papelão 1	$[\text{C}_{3,64}\text{H}_{5,70}\text{O}_{2,99}\text{N}_{0,02}\text{Si}_{0,09}]$	$[\text{C}_{3,46}\text{H}_{4,56}\text{O}_{2,99}\text{N}_{0,11}\text{Si}_{0,09}\text{C}_x\text{H}_x\text{H}_2]_{0,18}$
Papelão 2	$[\text{C}_{4,93}\text{H}_{9,25}\text{O}_{1,92}\text{N}_{0,02}\text{Si}_{0,02}]$	$[\text{C}_{4,68}\text{H}_{7,40}\text{O}_{1,92}\text{N}_{0,02}\text{Si}_{0,02}\text{C}_x\text{H}_x\text{H}_2]_{0,25}$

Principais resultados

A seguir estão apresentados alguns resultados numéricos sobre algumas das propriedades dos produtos de combustão com “ar” dos combustíveis pesquisados. As simulações foram realizadas para $P = 10^5 \text{ Pa}$ e $\alpha_{\text{ox}} = 0,1 \dots 3,0$.

Na Figura 2 estão mostradas as dependências da T e μ , como $f(\alpha_{\text{ox}})$ para a combustão completa e incompleta do papelão 1, sendo que o valor α_{ox} representa excesso ($\alpha_{\text{ox}} > 1$) ou falta ($\alpha_{\text{ox}} < 1$) de oxidante no processo de combustão. É evidente que existe diferença entre as temperaturas para $0,3 < \alpha_{\text{ox}} < 0,8$, em média $\Delta T = T_{\text{com}} - T_{\text{inc}} \approx -60 \text{ K}$ e na região onde $\alpha_{\text{ox}} > 0,8$ tem-se em média $\Delta T \approx 140 \text{ K}$. Esta diferença e sua inversão podem ser explicadas da seguinte forma: ΔT está condicionado por dois fatores: primeiramente, para a

Comunicação Científica

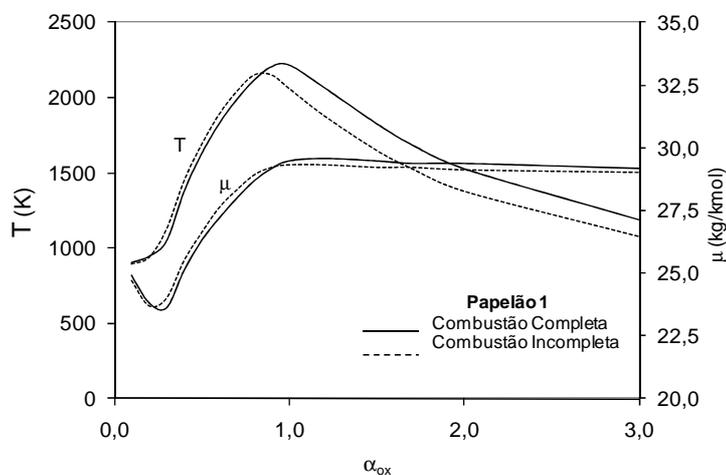


Fig. 2 – Influência da combustão incompleta em T e μ

combustão incompleta, uma parte do combustível não entra em contato com o oxidante, então quando $\alpha_{ox} < 1$ este fato contribui para o aumento da T. Mas quando $\alpha_{ox} > 1$, este fator condiciona a diminuição da temperatura; por outro lado, a parte do combustível que não entra em contato com o oxidante, exige para a sua decomposição (em todo o intervalo de variação de α_{ox}) alguma quantidade de calor, e isto vai contribuir para a diminuição da T. Então quando $\alpha_{ox} < 1$, ambos os fatores agem em direções contrárias o que condiciona a pequena diferença ΔT e seu sinal negativo, mas quando $\alpha_{ox} > 1$, os fatores agem em uma mesma direção e neste caso ΔT aumenta e inverte o sinal. Observa-se também (Fig. 2), que a diferença entre as massas moleculares possui semelhança com ΔT .

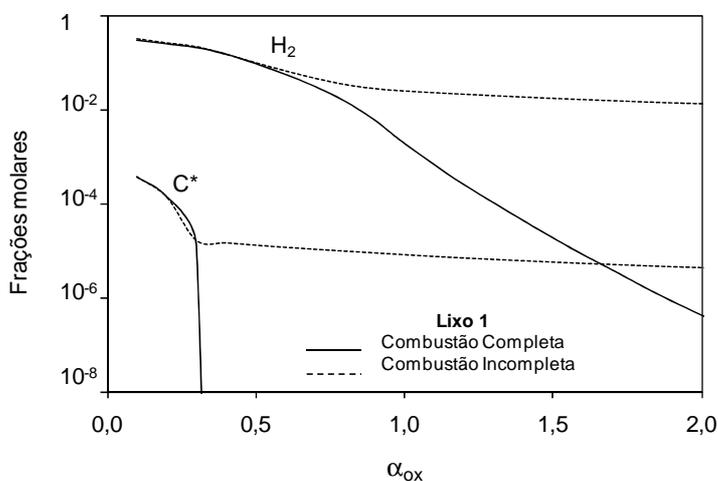


Fig. 3 – Influência da combustão incompleta nas frações molares

Comunicação Científica

A Figura 3 mostra as dependências das substâncias C^* e H_2 em função de α_{ox} , para a combustão completa e incompleta do lixo urbano 1. No caso da combustão completa o carbono condensado está desaparecendo para $\alpha_{ox} \approx 0,3$; mas para a combustão incompleta C^* ainda existe para $\alpha_{ox} > 1$, pois o metano do MLR decompõe-se em C^* (como Cx^*) e H_2 (como Hx_2) os quais não entram em contato com o oxidante.

A Figura 4 mostra o calor específico para a combustão completa e incompleta do lixo urbano 2. É evidente que existe diferença considerável (até 15%) na região onde α_{ox} varia de 0,8 a 1,2 e esta diferença esta condicionada por ΔT e pela forte dependência entre a temperatura e a composição nesta região.

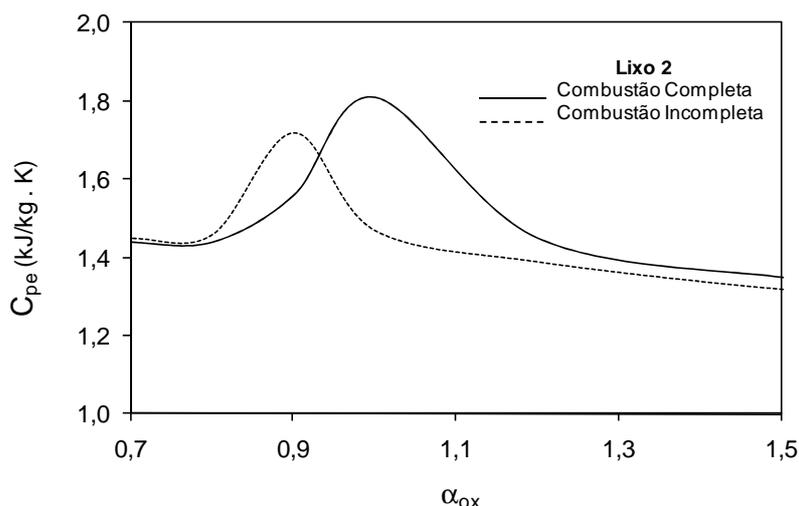


Fig. 4 – Influência da combustão incompleta no C_{pe}

Conclusões

Este trabalho foi desenvolvido partindo-se do problema da modelagem matemática dos processos quimicamente equilibrados, em instalações energéticas. De acordo com o estudo realizado é possível fazer as seguintes considerações finais: o modelo (Alemassov *et al.*, 1973) foi complementado com o método do MLR e este método nos quadros dos processos quimicamente equilibrados permite avaliar a influência da mistura imperfeita nas propriedades dos produtos de combustão de uma forma mais rápida do que a utilizada usualmente e para isso foi realizado um volume considerável de cálculos para determinar



Comunicação Científica

os produtos de combustão de combustíveis de biomassa, sendo eles dois tipos de papelão e dois tipos de lixo urbano, obtendo-se a partir desses cálculos as propriedades que são necessárias conhecer para projetar fornalhas para secagem de grãos: massa molecular média, entalpia, viscosidade, calor específico, entre outras.

Referências

ALEMASOV, V. E., *et al.* **Propriedades termodinâmicas e termofísicas dos produtos de combustão.** Moscou: VINITI, 1973. 535p.

AUTH, C. J. e ISKHAKOVA, R. L.: **Pesquisa das propriedades termodinâmicas e termofísicas dos produtos de combustão de biomassa**, Proceedings of 6th Brazilian Congress of Engineering and Thermal Sciences, Florianópolis, SC, Vol. III, (1996), 1769-1774.

GORDON, S., McBRIDE, B. J. NASA SP-273 (**Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks and chapman-jouguet**). Washington, 1971. 245p.

JENKINS, B. M.: **Fuel Properties for Biomass Materials**, Proceedings of International Symposium on Application and Management of the Energy in Agriculture, Indiana, 1990.

SFILIMBERGO, A. P., AUTH, C. J., ISKHAKOVA, R. L., ROSANELLI, M.: **Simulação numérica de processos de combustão utilizando os métodos das grandes moléculas e do meio local reagente**, Anais da Feira e Congresso de ar condicionado, refrigeração, aquecimento e ventilação do Mercosul, Porto Alegre, (1998), CD-ROOM.

SFILIMBERGO, A. P., CASTELLII, C. A. e AUTH, C. J.: **Simulação numérica das propriedades dos produtos de combustão de diferentes espécies de carvão**, Proceedings of the XX Computational Methods in Engineering (CILAMCE), São Paulo, (1999), CD-ROOM.