



ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA – PROJETO E FABRICAÇÃO

TRABALHO DE FORMATURA

ProComb



PROGRAMA DE CÁLCULOS DE COMBUSTÃO

Autor: Sérgio Rodrigues Soares

Orientador: Prof.Dr. José Roberto Simões Moreira

dezembro de 1999

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer a todas as pessoas que auxiliaram e contribuíram direta ou indiretamente para a conclusão deste trabalho.

Sendo assim dedico este trabalho:

Ao meu orientador, Prof.Dr. José Roberto Simões Moreira, cujos conhecimentos estão imersos neste trabalho e que foi a pessoa fundamental para a realização deste projeto.

Aos meus pais, Fernando Faria Soares e Dirce Rodrigues Soares que sempre acreditaram no meu potencial e que me incentivaram em todos os momentos da minha vida.

Agradeço também às pessoas que dedicaram parte do seu tempo no desenvolvimento deste trabalho, dentre elas:

C.Greco Térmica e Fluidos pelo apoio financeiro e também ao Prof. Clemente Greco que auxiliou durante todo o desenvolvimento do projeto.

Todos os alunos de graduação e pós-graduação pertencentes ao SISEA – Laboratório de Sistemas Energéticos Alternativos.

ÍNDICE

RESUMO	4
1. INTRODUÇÃO	5
1.1 CARACTERÍSTICAS DO PROGRAMA PROCOMB	6
2.FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	8
2.1 COMBUSTÍVEIS	8
2.1.1 <i>Combustíveis Sólidos e Líquidos</i>	9
2.1.2 <i>Combustíveis Gasosos e Misturas Gasosas</i>	9
2.1.3 <i>Misturas Genéricas</i>	10
2.2 EQUAÇÃO GERAL DA COMBUSTÃO	11
2.2.1 <i>Relação Ar-Combustível</i>	12
3. BALANÇO MÁSSICO	14
3.1 BALANÇO ELEMENTAR POR ESPÉCIE QUÍMICA	14
3.2 DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DOS PRODUTOS COM EXCESSO DE AR	16
3.3 DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DO COMBUSTÍVEL	16
3.4 DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DO OXIDANTE SEM EXCESSO DE AR	19
3.4.1 <i>Oxidante : Ar Atmosférico sem Enriquecimento</i>	20
3.4.2 <i>Oxidante Genérico com Fator de Enriquecimento Molar</i>	20
3.4.3 <i>Oxidante Genérico com Fator de Enriquecimento Mássico</i>	21
3.4.4 <i>Oxidante Genérico com Fator de Enriquecimento Volumétrico</i>	23
3.5 COMBUSTÃO COM EXCESSO DE OXIDANTE	23
4.EQUILÍBRIO QUÍMICO DOS PRODUTOS DE COMBUSTÃO	26
4.1 DISSOCIAÇÃO DO VAPOR DE ÁGUA H_2O	27
4.2 DISSOCIAÇÃO DO GÁS CARBÔNICO CO_2	28
4.3 EQUACIONAMENTO DAS REAÇÕES DE DISSOCIAÇÃO	29
4.3.1 <i>Equilíbrio do CO_2</i>	29
4.3.2 <i>Equilíbrio do H_2O</i>	30
5. NOVA EQUAÇÃO GERAL DA COMBUSTÃO	32
6. TEMPERATURA ADIABÁTICA DE CHAMA	33
6.1 ENTALPIA DOS REAGENTES	34
6.1.1 <i>Cálculo da Entalpia de Formação</i>	35
6.1.2 <i>Cálculo da Entalpia Sensível</i>	36
6.2 CÁLCULO DA TEMPERATURA ADIABÁTICA DE CHAMA	37
7. MÉTODOS NUMÉRICOS	39
7.1 MÉTODO DE NEWTON RHAPSON	39
7.2 MÉTODO DA DICOTOMIA	40
8. DADOS DE ENTRADA	42
8.1 COMBUSTÍVEL	43
8.2 PROPRIEDADES DO OXIDANTE E DO COMBUSTÍVEL	43
8.3 TROCAS TÉRMICAS	45
8.4 TIPOS DE OXIDANTE	46
8.5 EXCESSO DE OXIDANTE	46
8.6 GASES DE OUTROS PROCESSOS	47

9. RESULTADOS	49
9.1 EQUAÇÃO DE COMBUSTÃO	49
9.2 VAZÕES	50
9.2.1 Cálculo das Vazões	52
9.3 ANÁLISE DOS PRODUTOS	54
9.4 TEMPERATURAS	55
9.4.1 Temperatura Adiabática de Chama	55
9.4.2 Temperatura dos Produtos	55
9.4.3 Temperatura de Orvalho	56
9.5 OUTRAS PROPRIEDADES	57
9.5.1 Massa Molar	57
9.5.2 Densidade dos Produtos	57
9.5.3 Perdas por Escape	58
9.5.4 Calor Específico	58
9.5.5 Entalpia dos Produtos de Combustão	59
10. BANCO DE DADOS	61
10.1 MISTURA GASOSA	63
10.2 MISTURA GENÉRICA	63
11. GRÁFICOS	66
11.1 Exemplo 1 – Análise dos Produtos	67
11.2 Exemplo 2 – Temperatura Adiabática de Chama / Temperatura dos Produtos	68
11.3 Exemplo 3 – Vazão do Oxidante / Vazão dos Produtos	71
12. UNIDADES	72
13. MANIPULAÇÃO DE ARQUIVOS	75
14. AJUDA	76
15. ESTRUTURA DO PROGRAMA	76
16. EXEMPLOS	80
16.1 EXEMPLO 1 – COMBUSTÍVEL SÓLIDO – CARVÃO MINERAL (MINA DE TUBARÃO)	80
16.2 EXEMPLO 2 – COMBUSTÍVEL GASOSO – GÁS DE COQUERIA	81
17. REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA	83
18. ANEXO A	84
19. ANEXO B	85
19. ANEXO C	86
19. ANEXO D	87
19. ANEXO E	89

ÍNDICE DE FIGURAS

<i>Figura 1 - Utilização de diversos fornos industriais.</i>	5
<i>Figura 2 - Enriquecimento do oxidante</i>	21
<i>Figura 3 - Sensores para a avaliação da chama</i>	33
<i>Figura 4 - Câmara de Combustão</i>	37
<i>Figura 5 - Visualização do Teorema de Bolzano</i>	41
<i>Figura 6 - Janela Principal</i>	42
<i>Figura 7 - Seleção do combustível.</i>	43
<i>Figura 8 - Alguns dados de entrada</i>	45
<i>Figura 9 - Enriquecimento do oxidante</i>	46
<i>Figura 10 - Definição do excesso de oxidante.</i>	47
<i>Figura 11 - Equação da Combustão</i>	50
<i>Figura 12 - Resultado das vazões dos produtos de um combustível sólido</i>	52
<i>Figura 13 - Resultado da Análise dos Produtos</i>	54
<i>Figura 14 - Resultado das Temperaturas</i>	56
<i>Figura 15 - Exemplo de um processo de resfriamento isobárico no diagrama T-s.</i>	56
<i>Figura 16 - Resultado das Outras Propriedades</i>	60
<i>Figura 17 - Janela do Banco de Dados</i>	62
<i>Figura 18 - Janela para se adicionar uma mistura gasosa.</i>	63
<i>Figura 19 - Janela para se adicionar uma mistura genérica</i>	64
<i>Figura 20 - Gráfico de Análise dos Produtos</i>	67
<i>Figura 21 - Resultado da combustão do carvão vegetal com O₂ puro.</i>	68
<i>Figura 22 - Gráfico da temperatura adiabática de chama da combustão do H₂.</i>	69
<i>Figura 23 - Gráfico da temperatura adiabática de chama calculada com e sem dissociação</i>	70
<i>Figura 24 - Gráfico da temperatura adiabática de chama e temperatura dos produtos.</i>	70
<i>Figura 25 - Gráfico de vazão mássica</i>	71
<i>Figura 26 - Sistema de unidades – usuário</i>	73
<i>Figura 27 - Projetos dispostos em cascata.</i>	77
<i>Figura 28 - Projetos dispostos lado a lado</i>	77

RESUMO

Este trabalho tem como objetivo principal o desenvolvimento de um programa de cálculos de combustão que possa auxiliar os profissionais, professores e pesquisadores que trabalham com processos de combustão.

Para isto, foi desenvolvido um programa que pudesse abranger o maior número possível de processos de combustão.

Sendo assim, o usuário deve fornecer diversos parâmetros de entrada como: combustível, temperatura do oxidante e do combustível, dados sobre perdas de calor, tipo de oxidante, fator de enriquecimento, excesso de oxidante e ainda se há inclusão de gases de outros processos e outros dados mais.

A partir destes dados o programa calcula diversos resultados entre eles estão: vazões mássicas e volumétricas do oxidante e dos produtos, temperatura adiabática de chama, equação estequiométrica da reação, densidade e massa molar dos produtos, calores específicos, entalpias, etc.

1. INTRODUÇÃO

A combustão é uma das reações químicas mais utilizadas pelo homem moderno, e além disto, é também uma das reações mais antigas do conhecimento humano.

Seu conhecimento mudou sensivelmente a vida do homem na antiguidade e ainda hoje é uma das maiores responsáveis por revoluções tecnológicas [1]. Por exemplo, as máquinas a vapor, os motores de combustão interna, as turbinas e os motores de foguete.

A combustão é uma reação química que pode ser resumida na oxidação de um combustível com uma grande liberação de energia em forma de luz e calor.

Dentre os seus diversos fins o processo de combustão é utilizado para principalmente geração de formas mais úteis de energia. A energia liberada no processo de combustão é utilizada nas mais diversas indústrias desde de químicas, siderúrgicas, metalúrgicas, entre outras. A energia térmica liberada no processo de combustão também pode ser empregada para a produção de outras formas de energia, entre as quais, a elétrica nas termelétricas, mecânica para os transportes presentes nos motores de combustão interna. Outras formas de emprego da combustão incluem o uso doméstico e industrial dos processos de preparo de alimentos, e também como fonte de calor para aquecimento de uma forma geral.



Figura 1 - Utilização de diversos fornos industriais.

Devida a sua grande importância, existem diversos programas de cálculos de combustão como o AComb feito pelo IPT (Instituto de Pesquisa Tecnológica). Entretanto, a maior parte dos programas deste tipo possuem uma certa finalidade que acaba restringindo sua utilização.

A grande vantagem do programa ProComb, é que este é um programa versátil. Ele foi desenvolvido de forma a permitir uma constante atualização e adição de novos componentes .

Esta primeira parte do projeto foi denominada "Estequiometria" pois envolve basicamente a parte de estequiometria da combustão. Além disto, estão previstos vários outros tipos de cálculos termodinâmicos para serem incorporados posteriormente como por exemplo, psicrometria dos produtos de combustão.

Estes novos componentes do programa poderão utilizar resultados calculados em outras partes do programa permitindo um intercâmbio de informações dentro do próprio programa. Assim pode-se fazer um projeto complexo utilizando-se para isto o mesmo software de maneira mais rápida e eficiente.

1.1 Características do Programa ProComb

A idéia principal do programa é que ele atinja o maior número de casos possíveis de combinação de variáveis que interfiram no processo de combustão. Deste modo, que ele possibilite a análise da combustão feita nas mais diversas formas como por exemplo: com excesso de ar, com enriquecimento de O_2 , com praticamente qualquer tipo de combustível nas fases sólida, líquida ou gasosa, com pré-aquecimento do oxidante ou do combustível, com variação em algumas propriedades termodinâmicas do oxidante por exemplo; umidade, pressão e temperatura.

O programa possui um banco de dados dos combustíveis capaz de armazenar todos os tipos de dados exigidos pelo programa sobre estes. O banco de dados é capaz de incluir e excluir combustíveis e propriedades do mesmo. Alterar composição química e os valores de algumas propriedades.

Com relação às unidades, o Sistema Internacional será utilizado como unidade padrão do programa, mas também há a possibilidade de que o usuário utilize outros dois padrões o Técnico e o Inglês caso seja este o seu interesse. Ainda há a possibilidade de que o usuário defina seu próprio sistema de unidades chamado de "Usuário". Este sistema é uma mistura de todos os sistemas anteriores definido pelo usuário.

Nos resultados do programa são expostos as principais propriedades dos produtos de combustão de uma forma clara e objetiva, através dos diversos recursos existentes nas linguagens de programação visuais

O programa foi desenvolvido em Delphi2 que utiliza o ambiente Windows 95 e as versões posteriores como sistema operacional.

O programa foi elaborado no SISEA - Laboratório de Sistemas Energéticos Alternativos da Escola Politécnica de São Paulo com o apoio do CNPq (Conselho Nacional de Pesquisa).

Colaboraram também para o desenvolvimento do ProComb a empresa C.Greco Térmica e Fluidos Ltda.

2.FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Combustíveis

Existem atualmente diferentes tipos de combustíveis desde derivados do petróleo (hidrocarbonetos) que são os mais comuns, passando pelos gases, como o hidrogênio e até cascas de sementes e bagaço de cana-de-açúcar.

Os principais tipos de combustíveis ainda são os hidrocarbonetos. Estas substâncias são assim chamadas porque sua fórmula química se apresenta da forma C_xH_y onde basicamente só átomos de carbono e hidrogênio estão presentes na molécula do combustível.

Entretanto, neste programa procurou-se uma visão mais ampla sobre os combustíveis e também uma melhor maneira de serem utilizados para facilitar os cálculos existentes nas soluções das equações.

Assim os combustíveis foram divididos em cinco categorias:

- Sólidos;
- Líquidos;
- Gasosos;
- Misturas Gasosas;
- Misturas Genéricas;

Todo os combustíveis utilizados pelo programa possuem uma composição química pré-definida, a qual incluem não somente os elementos carbono e hidrogênio, mas também outros elementos que geralmente estão presentes na forma de contaminantes e umidade.

Deste modo, apenas os seguintes elementos químicos podem compor os combustíveis sólidos e líquidos: carbono, hidrogênio, oxigênio, nitrogênio e enxofre. Os demais componentes que podem estar presentes no combustível são: a umidade e o teor de cinza. Qualquer outro elemento químico diferente de C, H, O, N e S pode ser considerado como parte integrante das cinzas pois não irá participar da combustão.

Os teores de cada componente devem ser dados de formas diferentes dependendo do tipo de combustível, isto é melhor explicado nos capítulos que se seguem.

2.1.1 Combustíveis Sólidos e Líquidos

Os combustíveis sólidos e líquidos são tratados de forma semelhante pelo programa por duas razões principais.

A primeira razão de se utilizar estes dois tipos de combustível de uma mesma maneira é que suas análises imediata e elementares são geralmente fornecidas em base mássica, isto é, por unidade de massa de combustível.

A análise imediata de um combustível fornece as porcentagens de umidade, cinzas, material volátil e carbono fixo por unidade de massa de combustível. Já a análise elementar é feita com o combustível sem umidade e esta fornece as porcentagens de carbono, hidrogênio, oxigênio, nitrogênio, enxofre e cinzas.

Dependendo da presença ou não da umidade na análise do combustível estas também podem ser chamadas de base seca ou base úmida. Assim, a análise imediata fornece a composição do combustível em base mássica úmida e a análise elementar em base mássica seca.

Todos elementos presentes no combustível devem ser fornecidos em base mássica úmida.

A segunda razão é pelo fato de que os calores específicos são considerados constantes.

2.1.2 Combustíveis Gasosos e Misturas Gasosas

Para combustíveis gasosos devem ser fornecidos os teores dos seguintes gases: CH_4 (butano), C_2H_2 (etino ou acetileno), C_2H_6 (etano), C_3H_6 (propeno), C_3H_8 (propano), C_4H_{10} (butano), C_5H_{12} (pentano), H_2 (hidrogênio), O_2 (oxigênio), N_2 (nitrogênio), CO_2 (dióxido de carbono), CO (monóxido de

carbono), H_2S (gás sulfídrico ou sulfeto de hidrogênio) e também H_2O (vapor de água).

Os combustíveis gasosos possuem duas diferenças importantes em relação aos sólidos e líquidos.

A primeira é que sua composição é fornecida em base úmida volumétrica. Além disto, como a teor de cinzas dos combustíveis gasosos em base volumétrica é muito baixo ele é desconsiderado.

A segunda razão é que os calores específicos dos gases e misturas gasosas não são considerados constantes. As equações que definem a variação do calor específico em função da temperatura estão descritas no Anexo A.

2.1.3 Misturas Genéricas

As misturas genéricas representam uma mistura de todos os demais tipos de combustível.

Desta forma, é possível se construir combustíveis genéricos compostos de uma parte sólida, outra líquida e outra gasosa. A única ressalva é feita ao se fazer um mistura genérica utilizando-se misturas gasosas ou então outras misturas genéricas.

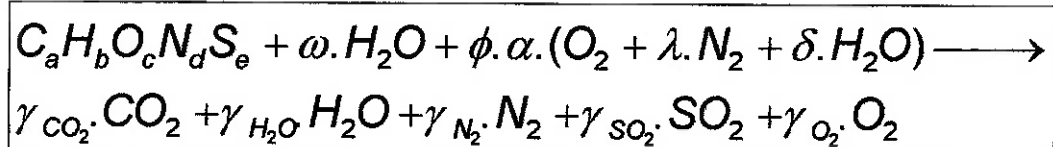
Este tipo de combustível é utilizado em processos de combustão em fornos multi-combustíveis onde os queimadores estão habilitados a utilizar uma mistura de combustível como por exemplo gás natural e carvão.

O programa tratará estes combustíveis de forma semelhante aos combustíveis sólidos, pois após serem definidos as porcentagens de cada tipo de combustível eles são transformados em bases mássicas úmidas.

Entretanto, o calor específico é considerado constante para a parte correspondente aos combustíveis sólidos e líquidos e variável para os gasosos.

2.2 Equação Geral da Combustão

A primeira equação geral da combustão utilizada pelo programa é descrita abaixo para um mol de combustível:



As cinzas presentes no combustível não participam da reação de combustão por isso não estão representadas na equação acima.

A primeira parcela dos reagentes representa o combustível incluindo-se aí o termo referente à umidade. A segunda é o oxidante podendo este ser o ar atmosférico ou um oxidante genérico. No lado direito da equação estão representados os possíveis produtos da combustão.

É importante ressaltar que muitos produtos intermediários são formados durante o processo de combustão, mas iremos considerar apenas os produtos finais da combustão.

Tomando-se como base um processo de combustão comum o oxigênio fornecido provém do ar. A composição do ar pode ser descrita como composta de aproximadamente: 21% de Oxigênio, 78% de Nitrogênio e 1% de Argônio e outros gases. Como o Argônio e outros gases praticamente não participam da combustão eles foram desconsiderados na reação química. Assim o ar atmosférico teórico utilizado neste programa será composto por 20,9% de O_2 e 79,1% de N_2 . Se esta hipótese é feita o nitrogênio passa a ser chamado alguma vezes de "nitrogênio atmosférico" e seu peso molecular passa de 28,013 para 28,16.

Sendo assim, para cada mol de O_2 presente no ar existirão 3,78 moles de N_2 . Além disto, como o ar carrega consigo um certa quantidade de vapor de água existe uma parcela de H_2O na equação que representa esta umidade do ar que será considerada neste programa.

2.2.1 Relação Ar-Combustível

Num processo de combustão existe uma quantidade mínima de oxigênio que deve ser fornecido para que a combustão seja completa e todo o combustível possa ser oxidado. Quando ocorre a combustão completa não há a presença de O_2 e nem de CO nos produtos de combustão.

Essa quantidade de ar necessária para a combustão completa chama-se “ar teórico”. Experimentalmente sabe-se que apenas o ar teórico não é suficiente para que a combustão seja completa, mas iremos considerá-la suficiente neste estudo.

Variando-se a quantidade de ar pode-se chegar a três diferentes tipos de combustão:

- **Combustão incompleta ou sub-estequiométrica** : Acontece quando utiliza-se uma quantidade de ar menor do que o “ar teórico”. Neste tipo de combustão se a quantidade de ar for um pouco menor que a quantidade de ar teórico então parte do carbono irá reagir com o oxigênio para formar monóxido de carbono ao invés de dióxido de carbono. Entretanto, se a quantidade for muito menor, então parte do combustível não irá queimar e parte dele aparecerá nos produtos. Este tipo de combustão não será considerada no programa.
- **Combustão com “Ar Teórico”** : Como o próprio nome diz acontece quando utiliza-se a quantidade exata de ar para que a combustão seja completa. Neste tipo de combustão não aparece O_2 nos produtos de combustão.
- **Combustão com “Ar Real”** : É a combustão feita com a quantidade de ar realmente utilizada. Como na maioria dos processos de combustão esta quantidade é maior do que a estequiométrica, este ar será representado no programa como um excesso de ar.

Usualmente, utiliza-se a nomenclatura AC para indicar a relação ar combustível ou então CA combustível-ar onde a relação entre elas está descrita abaixo:

$$AC = \frac{1}{CA} \quad (2.1)$$

Esta relação pode ser dada tanto em base mássica como em base molar. A transformação de uma base para a outra pode ser feita da seguinte forma:

$$AC_{massa} = \frac{m_{ar}}{m_{comb}} = \frac{n_{ar} \cdot M_{ar}}{n_{comb} \cdot M_{comb}} = AC_{molar} \cdot \frac{M_{ar}}{M_{comb}} \quad (2.2)$$

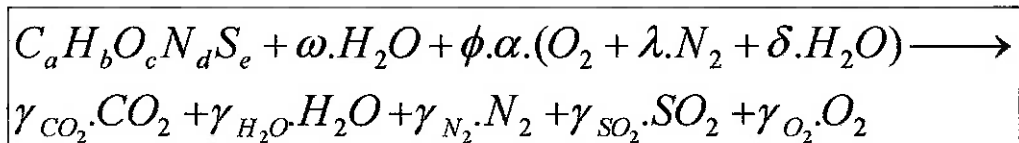
O excesso de ar pode então ser definido como:

$$\phi = \frac{AC}{AC_s}, \text{ onde o subscrito s significa ar estequiométrico ou ar teórico.}$$

Neste trabalho chamaremos este excesso de ar ~~de~~ como coeficiente de ar. Assim, para um coeficiente de ar igual a dois deverá ser entendido como um quantidade duas vezes a estequiométrica.

3. BALANÇO MÁSSICO

Observando-se novamente a equação geral da combustão pode-se notar que dentre os diversos coeficientes presentes na equação alguns podem ser obtidos através dos dados de entrada enquanto que outros necessitam de um equacionamento.



Fazendo-se a distinção dos coeficientes temos :

⇒ Coeficientes conhecidos : a, b, c, d, e, ω , ϕ , λ , δ .

⇒ Coeficientes desconhecidos : γ_{CO_2} , γ_{H_2O} , γ_{N_2} , γ_{SO_2} , γ_{CO_2} , γ_{O_2} , α .

Neste estudo, utilizou-se a seguinte nomenclatura:

ϕ → para o coeficiente de ar (excesso de ar).

α → para o coeficiente de ar estequiométrico.

O valor de δ é obtido através da umidade absoluta do ar, portanto ele não representa uma incógnita ao sistema.

Sendo assim, através do balanceamento dos elementos químicos é possível se encontrar todos os valores dos coeficientes desconhecidos.

3.1 Balanço Elementar por Espécie Química

Para a resolução do problema, primeiramente, monta-se as equações para cada elemento químico separadamente.

Através das equações de alguns dos elementos já é possível se obter os primeiros resultados dos coeficientes dos produtos:

$$C : \gamma_{CO_2} = a ; \quad (1)$$

$$H : 2.\gamma_{H_2O} = b + 2.\alpha.\delta.\phi ; \quad (2)$$

$$N : 2.\gamma_{N_2} = d + 2.\alpha.\lambda.\phi ; \quad (3)$$

$$S : \gamma_{SO_2} = e ; \quad (4)$$

$$O : 2.\gamma_{CO_2} + \gamma_{H_2O} + 2.\gamma_{SO_2} + 2.\gamma_{O_2} = c + w + \alpha.\phi.(2 + \delta) ; \quad (5)$$

De posse de todas as equações procedem-se os seguintes passos para o cálculo dos coeficientes:

$$\gamma_{CO_2} = a , \quad \gamma_{SO_2} = e$$

Agora temos que calcular o valor de α . Então substituímos a expressão 2 na expressão 5:

$$2.\gamma_{CO_2} + \frac{b}{2} + w + \alpha.\phi.\delta + 2.\gamma_{SO_2} + 2.\gamma_{O_2} = c + w + \alpha.\phi.(2 + \delta)$$

Admitindo-se como combustão completa e ar teórico verificamos que: $\phi=1$ e $\gamma_{O_2}=0$ e assim pode-se isolar o valor de α e obter a relação:

$$\alpha = a + e + \frac{b}{4} - \frac{c}{2}$$

E assim calcula-se os demais coeficientes:

$$\gamma_{H_2O} = \frac{b}{2} + \alpha.\delta , \quad \gamma_{N_2} = \frac{d}{2} + \alpha.\lambda$$

3.2 Determinação dos Coeficientes dos Produtos com Excesso de Ar

Para a determinação dos coeficientes com excesso de ar utiliza-se o mesmo sistema de equações descritos no Cap.3.1.

Entretanto, neste caso, não utilizaremos a hipótese de combustão com ar teórico, mas um processo de combustão com o ar real. Então, os valores do coeficiente de ar " ϕ " e o coeficiente do O_2 nos produtos passam a ser incógnitas.

Como o valor de α agora já é conhecido as incógnitas podem ser isoladas em cada equação tornando-se o cálculo trivial:

$$\gamma_{CO_2} = a$$

$$\gamma_{H_2O} = \frac{b}{2} + \omega + \alpha \cdot \delta \cdot \phi$$

$$\gamma_{N_2} = \frac{d}{2} + \alpha \cdot \lambda \cdot \phi$$

$$\gamma_{SO_2} = e$$

$$\gamma_{O_2} = \frac{c}{2} - a - e - \frac{b}{4} + \alpha \cdot \phi$$

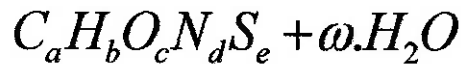
Onde o valor de ϕ é o coeficiente de ar e é obtido através da relação ar-combustível :

$$AC = \phi \cdot AC_s$$

É importante ressaltar que neste estudo não se considera a combustão incompleta.

3.3 Determinação dos Coeficientes do Combustível

O valor dos coeficientes podem ser determinados a partir da sua composição em base mássica úmida. Os coeficientes do combustível estão dispostos da seguinte forma:



- a → número de átomos de carbono presente na molécula elementar do combustível
- b → número de átomos de hidrogênio presente na molécula elementar do combustível
- c → número de átomos de oxigênio presente na molécula elementar do combustível
- d → número de átomos de nitrogênio presente na molécula elementar do combustível
- e → número de átomos de enxofre presente na molécula elementar do combustível
- ω → número de moléculas de água presente na molécula elementar do combustível

Para se passar as composições de base mássica para base molar é feito o seguinte procedimento:

- $\%C = \frac{X \text{ (gramas de carbono)}}{Mt \text{ (massa total do comb. com cinzas)}}$
- $\%C \cdot \frac{1}{Mc} = \frac{X \text{ (gramas de carbono)}}{Mt \text{ (massa total do comb. com cinzas)}} \cdot \frac{1 \text{ (mol)}}{12 \text{ (gramas)}}$
- $Y = \frac{X}{Mc}$
- $= \frac{Y \text{ (moles de carbono)}}{Mt \text{ (massa total do comb. com cinzas)}}$

Somando –se todos os elementos do combustível :

$$SS = \sum_a^w \frac{Y_i}{Mt}$$

$$SS = \frac{\text{moles de comb. sem cinzas}}{\text{Massa de comb. com cinzas}}$$

Transformando- se os valores para porcentagens molares de cada elemento por mol de combustível temos :

$$\frac{Y \text{ (mols de carbono)}}{M_t \text{ (massa total do comb. c/ cinzas)}} \cdot \frac{1 \text{ (Massa de comb. com cinzas)}}{SS \text{ (moles de comb. s/ cinzas)}}$$

$$a = \frac{\text{mols de carbono}}{\text{mols de comb. sem cinzas}}$$

E isto é feito para todos os elementos inclusive a água.

Para combustíveis gasosos os cálculos são um pouco diferentes .

Como as porcentagens molares são iguais as porcentagens volumétricas basta se saber quantos átomos do elemento estão presentes em cada gás multiplicá-lo pela porcentagem volumétrica do gás presente no combustível fazendo isto para todos os gases. Assim, obtém-se a quantidade molar de cada elemento que está presente no combustível.

$$a = (\%CH_4) + 2.(\%C_2H_2 + \%C_2H_6) + 3.(\%C_3H_6 + \%C_3H_8) + 4.(\%C_4H_{10}) + 5.(\%C_5H_{12}) + (\%CO_2 + \%CO)$$

Depois transforma-se tudo para a base de um mol de combustível:

$$SS=(a+b+c+d+e+\omega)$$

$$a=a/SS, b=b/SS, c=c/SS, d=d/SS, e=e/SS, \omega=\omega/SS$$

Existe um fator "tr" que multiplica as porcentagens molares. Ele corrige estes valores quando há alguma alteração na composição das cinzas ou da umidade e distribui a massa entre os outros elementos afim de que a soma continue dando 100%.

Assim para sólidos líquido e misturas genéricas o cálculo fica como:

$$a = \%C \cdot \frac{1}{Mc} \cdot tr \text{ onde } tr = \frac{(100 - nova_umidade - nova_cinza)}{(100 - umidade_original - cinza_original)}$$

Como para os gases não existe cinza a correção só é feita para alterações da quantidade de umidade.

$$a = a \cdot tr \text{ e } tr = \frac{(100 - nova_umidade)}{(100 - umidade_original)}$$

Desta forma são calculados os valores dos coeficientes do combustível.

3.4 Determinação dos Coeficientes do Oxidante sem Excesso de Ar

Para o cálculo dos coeficientes do oxidante é preciso se definir que tipo de oxidante será utilizado e a umidade absoluta do mesmo.

Na grande maioria das vezes utiliza-se o ar atmosférico mesmo como oxidante. Entretanto, pode-se efetuar um enriquecimento do ar atmosférico com O_2 ou até mesmo utilizá-lo como oxidante puro quando se deseja obter elevadas temperaturas da chama.

$$\phi \cdot \alpha \cdot (O_2 + \lambda \cdot N_2 + \delta \cdot H_2O)$$

O termo referente ao oxidante na reação de combustão está exposto abaixo, com todas as suas possíveis variáveis.

Como não está sendo considerado excesso de ar a variável $\phi = 1$ e o cálculo da variável α já foi demonstrado anteriormente, pois seu valor depende não somente do tipo de oxidante, mas como também da composição do combustível.

Desta forma, restam apenas duas incógnitas λ e δ para serem determinadas.

3.4.1 Oxidante : Ar Atmosférico sem Enriquecimento

No caso em que utiliza-se o ar atmosférico como oxidante, existe uma relação molar definida entre O_2 e N_2 . Como foi dito anteriormente a composição do ar adotada neste estudo é de 20,9% O_2 e de 79,1% N_2 , portanto:

$$\lambda = \frac{n_{N_2}}{n_{O_2}} = 3,78 \quad (3.1)$$

Como a variável " λ " foi calculada a variável " δ " pode ser determinada a partir do valor da umidade absoluta:

$w = \frac{\text{Massa de vapor de água}}{\text{Massa de ar seco}} = \text{umidade absoluta}$

$$w = \frac{m_{H_2O}}{(m_{N_2} + m_{O_2})} = \frac{\delta M_{H_2O}}{(\lambda M_{N_2} + M_{O_2})} \therefore \delta = \frac{w.(M_{O_2} + 3,78.M_{N_2})}{M_{H_2O}} \quad (3.2)$$

Assim são determinados os valores de λ e δ para o caso de utilizar-se o ar atmosférico com oxidante.

3.4.2 Oxidante Genérico com Fator de Enriquecimento Molar

O termo oxidante genérico será utilizado quando a composição do oxidante for diferente da composição do ar atmosférico padrão.

Esta diferenciação ocorre principalmente pela introdução de O_2 puro junto ao ar atmosférico.

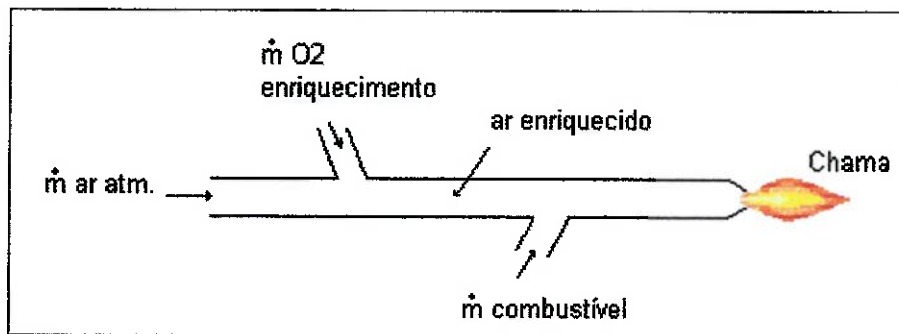


Figura 2 - Enriquecimento do oxidante

Neste primeiro tipo de fator de enriquecimento o usuário deve fornecer a nova relação N_2/O_2 do oxidante. No caso do ar atmosférico padrão esta relação é igual a 3,78.

Recordando-se do termo do oxidante da equação de combustão nota-se que esta nova relação fornecida pelo usuário representa exatamente o valor da variável λ .

Assim, resta apenas calcular o valor de δ que pode ser determinado substituindo-se o valor de λ na equação (3.2).

3.4.3 Oxidante Genérico com Fator de Enriquecimento Mássico

Neste tipo de fator de enriquecimento é necessário que o usuário entre com a razão de vazão mássica do O_2 /ar atmosférico.

Quando esta razão for igual a zero significa que não há introdução de um enriquecimento por O_2 . Ou seja, a composição do oxidante é igual a do ar atmosférico.

A partir do valor do fator de enriquecimento, que será denotado pela letra A , e o conceito de conservação da massa efetuam-se os seguintes procedimentos para a determinação das variáveis λ e δ .

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{m_{O_2}}{m_{atm}} = A \\ m_{total} = m_{atm} + m_{O_2} \end{array} \right.$$

como

$$\begin{aligned}
m_{\text{atm}} &= m_{\text{O}_2} + m_{\text{N}_2} + m_{\text{H}_2\text{O}} \\
&= n_{\text{O}_2'} \cdot M_{\text{O}_2} + n_{\text{N}_2} \cdot M_{\text{N}_2} + n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot M_{\text{H}_2\text{O}} \\
&= n_{\text{O}_2'} \cdot (M_{\text{O}_2} + \lambda' \cdot M_{\text{N}_2} + \delta' \cdot M_{\text{H}_2\text{O}}) \\
m_{\text{total}} &= s \cdot (M_{\text{O}_2} + \lambda \cdot M_{\text{N}_2} + \delta \cdot M_{\text{H}_2\text{O}})
\end{aligned}$$

e a massa de enriquecimento de O_2

$$m_{\text{O}_2} = n_{\text{O}_2''} \cdot M_{\text{O}_2}$$

Substituindo-se estes valores no sistema de equações;

$$\begin{aligned}
A &= \frac{n_{\text{O}_2''} \cdot M_{\text{O}_2}}{n_{\text{O}_2'} \cdot (M_{\text{O}_2} + \lambda' \cdot M_{\text{N}_2} + \delta' \cdot M_{\text{H}_2\text{O}})} \\
s \cdot (M_{\text{O}_2} + \lambda \cdot M_{\text{N}_2} + \delta \cdot M_{\text{H}_2\text{O}}) &= n_{\text{O}_2''} \cdot M_{\text{O}_2} + n_{\text{O}_2'} \cdot (M_{\text{O}_2} + \lambda' \cdot M_{\text{N}_2} + \delta' \cdot M_{\text{H}_2\text{O}})
\end{aligned}$$

Colocando-se em evidência M_{O_2} na primeira equação e chamando de μ , a razão entre as massas moleculares dos os elementos e M_{O_2} tem-se:

$$\begin{aligned}
n_{\text{O}_2''} &= n_{\text{O}_2'} \cdot B \\
\text{onde } B &= A \cdot (1 + \lambda' \cdot \mu_{\text{N}_2} + \delta' \cdot \mu_{\text{H}_2\text{O}})
\end{aligned}$$

Na segunda equação coloca-se também M_{O_2} em evidência para fazer o seu cancelamento e substitui-se o valor de $n_{\text{O}_2''}$ pelo valor calculado na equação acima:

$$s \cdot (1 + \lambda \cdot \mu_{\text{N}_2} + \delta \cdot \mu_{\text{H}_2\text{O}}) = (B+1) \cdot n_{\text{O}_2'} \cdot (1 + \lambda' \cdot \mu_{\text{N}_2} + \delta' \cdot \mu_{\text{H}_2\text{O}})$$

Igualando-se os termos referentes a cada elemento tem-se:

$$s = n_{\text{O}_2'} \cdot (B+1); \quad s \cdot \lambda = n_{\text{O}_2'} \cdot \lambda'; \quad s \cdot \delta = n_{\text{O}_2'} \cdot \delta'$$

Como deseja-se saber o valor de $n_{\text{O}_2'}$ para $s=1$:

$$n_{\text{O}_2'} = \frac{1}{B+1} \text{ e portanto } \lambda = \frac{\lambda'}{B+1} \text{ e } \delta = \frac{\delta'}{B+1} \quad (3.3)$$

3.4.4 Oxidante Genérico com Fator de Enriquecimento Volumétrico

Para este caso a o valor do fator de enriquecimento é dada pela razão entre as vazões volumétricas de O_2 e ar atmosférico .

Para o cálculo dos coeficientes do oxidante procede-se da mesma maneira descrita no item anterior, pois existe um proporção entre a vazão volumétrica e a vazão mássica.

Para se chegar a esta proporção substitui-se a razão volumétrica pela razão molar pois sabe-se que é a mesma e depois aplica-se a definição do número de moles.

$$\frac{Q_{O_2}}{Q_{atm}} = \frac{n_{O_2}}{n_{atm}} = \frac{m_{O_2}}{M_{O_2}} \cdot \frac{M_{atm}}{m_{atm}} = \frac{m_{O_2}}{m_{atm}} \cdot \frac{M_{atm}}{M_{O_2}} \quad (3.4)$$

Às vezes, pode-se utilizar um valor específico para a massa molecular do ar, neste caso utilizou-se o valor de $M_{atm} = 28.97$. Como $M_{O_2} = 31.999$ tem-se que a proporção entre as vazões volumétrica e mássica é igual a:

$$\frac{\dot{Q}_{O_2}}{\dot{Q}_{atm}} = 0.90534 \cdot \frac{\dot{m}_{O_2}}{\dot{m}_{atm}} \quad (3.5)$$

Assim, os procedimentos posteriores do cálculo de λ e δ são feitos do mesmo modo do fator de enriquecimento mássico.

3.5 Combustão com Excesso de Oxidante

A combustão com excesso de oxidante é uma prática muito comum pois ela garante que todo o combustível utilizado está sendo queimado. Este excesso, às vezes, também pode ser utilizado para um controle da temperatura dos produtos para que estes não atinjam níveis muito elevados.

A introdução de um excesso de oxidante é tratada de maneira simples pois irá alterar apenas o valor da variável ϕ , que representa este excesso no termo do oxidante, pois todos os demais termos independem do excesso.

Entretanto, existirão quatro casos possíveis de se introduzir o excesso de ar.

1º Caso : Coeficiente de Ar

Em muitos livros o excesso de ar é dado em termos de porcentagem. Assim, quando se deseja uma quantidade duas vezes maior que a estequiométrica diz-se que há um excesso de 200% de ar.

Entretanto, neste trabalho optou-se pelo termo coeficiente de ar e ele deve ser fornecido em valores unitários. Então, para um excesso de 200% de ar o valor do coeficiente de ar é igual a 2.

Sendo o excesso de ar um dado de entrada no programa basta simplesmente atribuir este valor à variável ϕ ,

2º Caso : Excesso de O₂ e CO nos Produtos

Estes dois casos representam um consequência da utilização do excesso de ar e não como um causador deste excesso.

Quando se utiliza um excesso de ar as quantidades molares dos produtos de combustão são alteradas. Desta forma, elas se tornam um meio interessante de se determinar qual excesso de ar está sendo utilizado no processo de combustão.

Assim, a partir de uma certa quantidade de CO₂ ou O₂ presente nos produtos, terá que ser determinado qual o valor do coeficiente de ar ϕ para que esta condição seja satisfeita.

Para a medição da quantidade de O₂ e CO₂ existem dois processos: um em que o resultado é fornecido em base úmida e outro onde o resultado é fornecido em base seca. A diferença entre os dois é que nos resultados em base seca retira-se o vapor de água nos produtos de combustão antes da análise e no resultado em base úmida a medição é feita com vapor de água presente nos produtos.

Além disto, estes resultados são normalmente fornecidos em porcentagens volumétricas. Desta forma as condições inseridas no programa poderão ser:

- ⇒ %O₂ (base úmida) ;
- ⇒ % O₂ (base seca);
- ⇒ %CO₂ (base úmida) ;
- ⇒ % CO₂ (base seca);

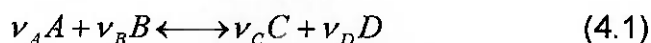
Para a determinação do coeficiente de ar, irá ser utilizado o método da dicotomia melhor explicado no Cap.7.2.

4.EQUILÍBRIO QUÍMICO DOS PRODUTOS DE COMBUSTÃO

Durante o processo de combustão são formados diversos produtos intermediários. Muitos deles surgem em um período muito curto de tempo e logo reagem com outros elementos como é o caso dos átomos de hidrogênio que são formados pela reação $H_2 \leftrightarrow 2H$. Por isto, este trabalho preocupou-se apenas com os principais produtos finais da combustão.

Entretanto, para que existam apenas determinados produtos de combustão é necessário que exista um certo equilíbrio químico entre alguns elementos. Um dos fatores que mais influenciam no equilíbrio destas substâncias é a temperatura, assim se considerarmos como a temperatura dos produtos próxima à temperatura adiabática de chama este equilíbrio pode favorecer ao aparecimento de alguns produtos intermediários.

Para a definição de equilíbrio considera-se a seguinte reação:



Onde os valores de “ ν ” são os valores dos coeficientes estequiométricos.

Da termodinâmica sabe-se que para uma determinada temperatura (T), existe um valor definido de K que relaciona estes coeficientes da seguinte forma:

$$K = \frac{a_C^{\nu_C} \cdot a_D^{\nu_D}}{a_B^{\nu_B} \cdot a_A^{\nu_A}} \quad (4.2)$$

Onde o coeficiente “ a ” representa a atividade de cada componente.

Para dar continuidade a demonstração duas hipóteses são feitas: a primeira de solução ideal e a outra de gás perfeito.

Uma solução ideal é aquela onde a variação de um elemento da mistura provoca um variação do volume da mistura desprezível. Isto é bemválido quando se está trabalhando com a hipótese de gás ideal. Desta forma, pode-se admitir uma mistura de gases como uma solução ideal

Sendo assim, através desta hipótese podemos considerar a atividade com uma função da fugacidade de cada um dos componentes:

$$a_i = \frac{y_i \cdot f_i}{f_i^o} \quad (4.3)$$

A segunda hipótese a ser feita é a de gás perfeito que será utilizada durante todo este estudo. Quando esta hipótese é satisfeita pode-se considerar a fugacidade como sendo a própria pressão parcial dos elementos. Desta forma, é possível se obter uma relação entre os valores da constante K e os coeficientes estequiométricos na forma:

$$K = \frac{y_C^{v_C} \cdot y_D^{v_D}}{y_A^{v_A} \cdot y_B^{v_B}} \cdot \left(\frac{p}{p^o} \right)^{v_C + v_D - v_A - v_B} \quad (4.4)$$

Vários livros possuem os valores de K tabelados em função da temperatura para diversas reações de dissociação.

4.1 Dissociação do Vapor de Água H₂O

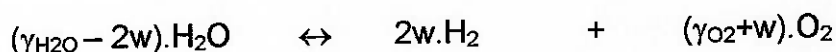
Em altas temperaturas uma das mais importantes reações de dissociação é a do vapor de água.

Na reação de dissociação considerada neste estudo o vapor de água se dissociará em H₂ e O₂.

As quantidades de gás hidrogênio e oxigênio formados depende de uma série de fatores e o cálculo de suas quantidades molares foram feitas da seguinte forma:

	$2.H_2O$	$\leftrightarrow$	$2.H_2$	+	O_2
número de moles					
Inicial	γ_{H_2O}		0		γ_{O_2}
Variação	$-2w$		$+2w$		$+w$
No equilíbrio	$(\gamma_{H_2O} - 2w)$		$2w$		$(\gamma_{O_2} + w)$

A reação de dissociação do vapor de água é então reescrita como sendo:



4.2 Dissociação do Gás Carbônico CO_2

A dissociação do gás carbônico é a outra reação de dissociação considerada no programa.

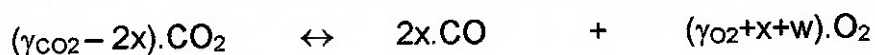
Ela tem uma importância especial no programa pois será o único caso responsável pelo aparecimento do monóxido de carbono CO como constituinte dos produtos de combustão.

Este é um gás altamente tóxico e por isso de grande importância para estudos relacionados com a poluição do ar.

Na dissociação do gás carbônico há o surgimento de CO e O_2 . As quantidades de cada componente foram determinadas considerando-se já a dissociação do vapor de água:

	$2.CO_2$	$\leftrightarrow$	$2.CO$	+	O_2
número de moles					
Inicial	γ_{CO_2}		0		$\gamma_{O_2} + w$
Variação	$-2x$		$+2x$		$+x$
No equilíbrio	$(\gamma_{CO_2} - 2x)$		$2x$		$(\gamma_{O_2} + x + w)$

A reação de dissociação do gás carbônico passa a ser descrita como:



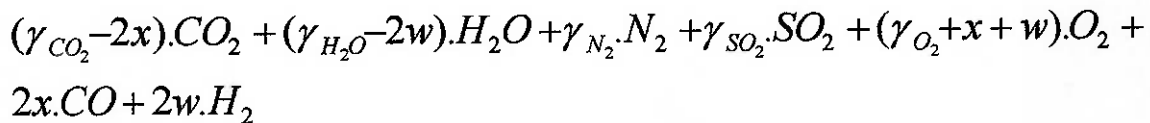
4.3 Equacionamento das Reações de Dissociação

Considerando-se agora estas duas novas reações de dissociação, aparecem dois novos gases que irão compor os produtos finais de combustão que são :

- monóxido de carbono (CO);
- gás hidrogênio (H₂);

Além disso, os coeficientes dos produtos de combustão tem que sofrer algumas alterações para que sejam consideradas as reações de dissociação.

Assim, os produtos finais de combustão passarão a ser descritos como:



Devido ao aparecimento das duas novas incógnitas x e w duas novas equações serão necessárias.

Estas duas novas equações dizem respeito ao equilíbrio da reação de dissociação e será utilizada da seguinte forma:

4.3.1 Equilíbrio do CO₂

Para o equação de equilíbrio do CO₂ temos que o valor de K é dado por:

$$K = \frac{y_C^{v_C} \cdot y_D^{v_D}}{y_A^{v_A} \cdot y_B^{v_B}} \cdot \left(\frac{p}{p^o} \right)^{v_C + v_D - v_A - v_B} \quad (4.5)$$

Onde os valores de “ v_i ” representam os coeficientes estequiométricos da reação de dissociação.

Já os valores de “ y_i ” são as pressões parciais de cada componente nos produtos de combustão .

Como as pressões parciais possuem o mesmo valor das frações molares estas incógnitas são obtidas através da própria reação de combustão.



$$v_A = 2; \quad v_C = 2; \quad v_D = 1;$$

$$2. \quad y_A = (\gamma_{\text{CO}_2} - 2x); \quad y_C = 2x; \quad y_D = (\gamma_{\text{O}_2} + x + w);$$

Substituindo-se os valores na equação (4.5) para a determinação da constante de equilíbrio :

$$K_{\text{CO}_2} = \frac{(2x)^2 \cdot (\gamma_{\text{O}_2} + x + w)}{(\gamma_{\text{CO}_2} - 2x)^2} \cdot \left(\frac{p}{p^o} \right)^1 \quad (4.6)$$

Onde :

p = pressão atmosférica local em MPa.

p^o = pressão de referência que será de 0,101325 MPa.

4.3.2 Equilíbrio do H_2O

A equação de equilíbrio água foi construída da mesma forma que a do CO_2 .

Os valores obtidos dos coeficientes foram :



$$v_A = 2; \quad v_C = 2; \quad v_D = 1;$$

$$2. \quad y_A = (\gamma_{\text{H}_2\text{O}} - 2w); \quad y_C = 2w; \quad y_D = (\gamma_{\text{O}_2} + x + w);$$

Substituindo-se estes valores na equação (4.5) para o cálculo da constante de equilíbrio K:

$$K_{H_2O} = \frac{(2w)^2 \cdot (\gamma_{O_2} + x + w)}{(\gamma_{H_2O} - 2w)^2} \cdot \left(\frac{p}{p^o} \right)^1 \quad (4.7)$$

Desta forma, foram obtidas mais duas reações que devem ser consideradas no balanço mássico para o cálculo das quantidades molares de cada produto da combustão.

É importante ressaltar que os valores de K são obtidos em função da temperatura através da tabela presente no Anexo B.

Como os valores de K estão numa forma discreta é preciso se fazer uma interpolação entre os pontos para se obter o valor em qualquer temperatura.

A forma de interpolação constitui-se em utilizar-se dois valores de K abaixo da temperatura em que se deseja saber o seu valor e um acima.

Depois, constrói-se um polinômio de segundo grau sobre estes três pontos e então substitui-se o valor da temperatura no polinômio para se descobrir o valor de K.

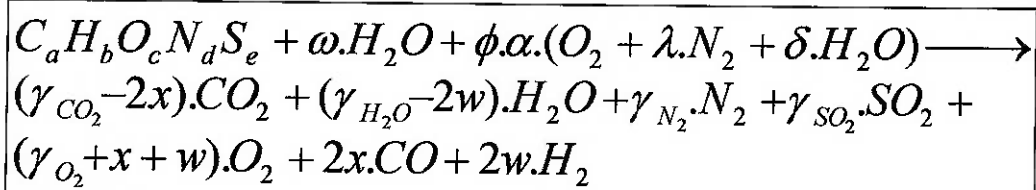
5. NOVA EQUAÇÃO GERAL DA COMBUSTÃO

A primeira equação de combustão considerava apenas os principais produtos da combustão não levando-se em conta as reações de dissociação.

A partir do momento em que esses equilíbrios são considerados a equação geral da combustão terá seus coeficientes dos produtos de combustão alterados e além disto dois novos gases serão incorporados a equação.

Entretanto, para alguns casos a quantidade desses novo gases CO e H₂ são tão pequenas que não serão considerados como pertencentes aos produtos de combustão.

Portanto a equação geral final da combustão que será adotada é:



Nota-se que nesta equação os coeficientes de alguns gases presentes nos produtos de combustão já estão representados na forma como são equacionados.

6. TEMPERATURA ADIABÁTICA DE CHAMA

Uma das principais propriedades da combustão é a temperatura da chama. Diversos processos químicos e metalúrgicos precisam de uma temperatura extremamente alta para que possam ser realizados como é o caso das fábricas de cimento e de vidro. Entretanto, em outros processos o importante é se limitar esta temperatura para que não se danifiquem os equipamentos utilizados.

Portanto é muito importante saber qual é a temperatura da chama e também saber maneiras de se controlar esta temperatura.

Atualmente existem sensores para a avaliação de alguns aspectos da chama, mas utilizados na maior parte em laboratórios.

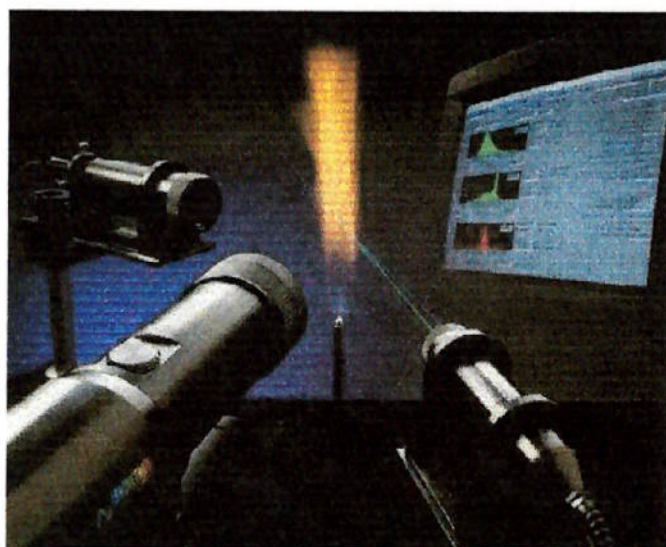


Figura 3 - Sensores para a avaliação da chama

A temperatura real da chama nas áreas industriais é mais difícil de ser determinada, entretanto é possível se obter uma estimativa do seu valor.

Algumas hipóteses foram feitas afim de que se pudesse fazer o cálculo desta temperatura.

A primeira hipótese feita é de que o trabalho realizado no processo de combustão fosse nulo e que as variações de energia potencial e cinética

fossem desprezíveis em comparação com as energias envolvidas na combustão.

A segunda hipótese é a de que não há troca de calor com o meio externo, ou seja um processo adiabático.

Desta forma, pode-se calcular a temperatura máxima que pode ser atingida pelos produtos de combustão. Esta temperatura é denominada temperatura adiabática de chama.

Esta temperatura é realmente a máxima quando se utiliza quantidades estequiométricas, quando não existe combustão incompleta e quando não há reações de dissociação envolvidas.

Entretanto, sabe-se que estas considerações fogem um pouco da realidade. Portanto, neste trabalho levamos em consideração os excessos de oxidante e as duas reações de dissociação mencionadas no capítulo 4.

Assim, optou-se por calcular duas temperaturas adiabáticas de chama. A primeira levando-se em consideração as dissociações que mais se aproxima da realidade e a segunda sem considerar as dissociações.

Desta forma, existe uma faixa de temperatura que pode ser atingida pelos produtos de combustão.

Antes de se explicar como é feito o cálculo desta temperatura alguns outros procedimentos de cálculos de outras propriedades serão explicados.

6.1 Entalpia dos Reagentes

O primeiro passo para se determinar a temperatura adiabática de chama é de se calcular a entalpia dos reagentes.

A entalpia dos reagentes é dada da seguinte forma em base molar:

$$\bar{h}_R = \sum_R n_e (\bar{h}_f^0 + \Delta \bar{h})_e \quad (6.1)$$

onde :

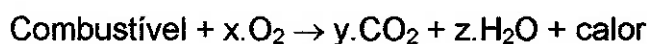
- $\bar{h}_f^0$ é a entalpia de formação para um estado padrão de 25°C e pressão de 101.325 kPa.

- $\Delta \bar{h}$ é a variação da entalpia do estado inicial até o estado final.
- n_e é o número de moles de cada reagente.

6.1.1 Cálculo da Entalpia de Formação

O cálculo da entalpia de formação dos combustíveis foi feito a partir dos valores dos seus poderes caloríficos.

Assim, para a combustão de qualquer tipo de combustível temos a reação:



Onde todos os elementos estão a uma temperatura de 25°C.

O calor liberado na combustão é denominado de poder calorífico. Se a água presente nos produtos estiver na forma líquida ele é denominado de poder calorífico superior e se a água estiver em forma de vapor ele então será denominado poder calorífico inferior.

Desta forma temos que:

$$-(PC) = y.(\bar{h}_f^0)_{CO_2} + z.(\bar{h}_f^0)_{H_2O} - (\bar{h}_f^0)_{Combustível} - x.(\bar{h}_f^0)_{O_2} \quad (6.2)$$

Como o valor do poder calorífico (PC) é dado como entrada do programa, os valores de y e z podem ser calculados a partir da composição do combustível e os valores da entalpia de formação do dióxido de carbono, do gás oxigênio e da água podem ser retirados de tabelas.

Deste modo, pode-se determinar a entalpia de formação do combustível pois ela se torna a única incógnita da equação.

Os valores utilizados para as entalpias de formação são :

- $(\bar{h}_f^0)_{CO_2} = -393522 \frac{kJ}{kmol}$;

- $(\bar{h}_f^0)_{H_2O} = \begin{cases} -241826 \frac{kJ}{kmol}, (vapor) \\ -285830 \frac{kJ}{kmol}, (liquido) \end{cases};$
- $(\bar{h}_f^0)_{O_2} = 0 \frac{kJ}{kmol}$; pois é um gás no seu estado mais estável

A equação (6.2) pode ser reescrita então como:

$$(\bar{h}_f^0)_{combustivel} = (PC)_{superior}^{inferior} - 393522 \cdot y + z \cdot \begin{pmatrix} 241826(vapor) \\ 285830(líquido) \end{pmatrix} \quad (6.3)$$

6.1.2 Cálculo da Entalpia Sensível

A variação de entalpia $\Delta \bar{h}$ dita anteriormente pode também ser chamada de entalpia sensível quando não está envolvida nenhuma transformação de fase.

Existem diversas formas de se calcular a variação de entalpia de um estado (T^o, p^o) até um estado final (T^f, p^f).

No nosso caso utilizaremos um função que descreve o comportamento do calor específico e a integraremos de uma temperatura T^i até a temperatura final T^f .

Isto será feito baseado no fato de que os gases serão considerados como gases perfeitos dentro da faixa delimitada entre o estado inicial e o estado final. Desta forma, a entalpia fica sendo função apenas da temperatura.

A segunda hipótese feita é de que o calor específico é praticamente constante para os combustíveis sólido e líquidos portanto não é preciso de uma função específica para estes calores específicos.

Assim, pode-se utilizar os valores do calor específico destes combustíveis diretamente do banco de dados.

O calor específico das cinzas também é considerado como constante e o valor adotado foi de 0,24 kJ/kg°C.

A entalpia sensível é dada pela fórmula:

$$\Delta \bar{h} = \int_{T=25^{\circ}\text{C}}^{T^f} \bar{c}_{p0}(T) dT \quad (6.4)$$

Para o caso dos combustíveis a temperatura T^f é fornecida pelo usuário que diz a que temperatura o combustível entra na câmara de combustão.

Para o caso do oxidante o usuário também deve fornecer a temperatura de entrada deste na câmara de combustão. Além disto, ele deve fornecer a porcentagem do oxidante que está sofrendo este pré-aquecimento, pois somente esta parte sofrerá uma variação da entalpia sensível.

A porcentagem de oxidante pré-aquecido será adotado como padrão 100% e as duas outras temperaturas serão adotadas como padrão 25°C .

As funções que descrevem o comportamento do calor específico a pressão constante em função da temperatura estão descritas no Anexo A.

Para uma maior simplicidade do programa, estas funções serão incorporadas ao programa já na sua forma integrada.

6.2 Cálculo da Temperatura Adiabática de Chama

Para o cálculo da temperatura adiabática de chama primeiramente traça-se um volume de controle em volta da câmara de combustão.

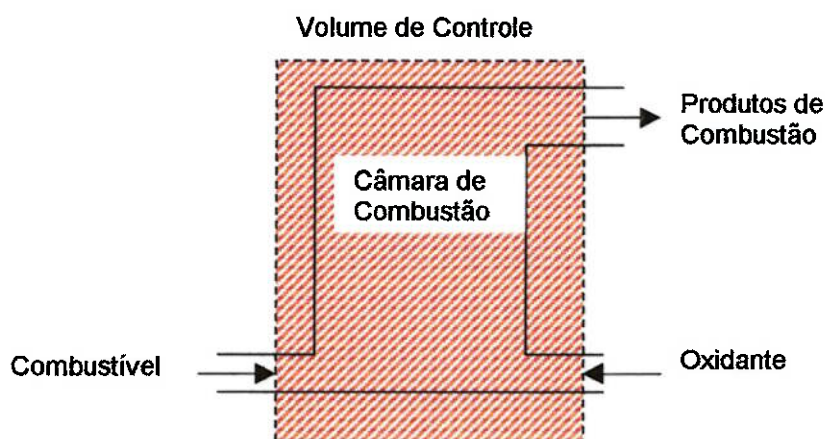


Figura 4 - Câmara de Combustão

Em seguida aplica-se a primeira Lei da Termodinâmica para este volume de controle para um processo em regime permanente.

$$Q_{V.C.} + H_R = W_{V.C.} + H_P \quad (6.6)$$

Supondo a câmara de combustão adiabática e sem realização de trabalho tem-se:

$$H_R = H_P, \text{ ou em termos molares}$$

$$\sum_R n_e \bar{h}_e = \sum_P n_s \bar{h}_s \quad (6.7)$$

Decompondo-se a entalpia em dois termos: o primeiro em entalpia de formação e o segundo em entalpia sensível :

$$\sum_R n_e (\bar{h}_f^0 + \Delta \bar{h})_e = \sum_P n_s (\bar{h}_f^0 + \Delta \bar{h})_s \quad (6.8)$$

Substituindo-se agora o termo de entalpia sensível :

$$\sum_R n_e \left(\bar{h}_f^0 + \int_{25}^{T_{\text{entrada}}} \bar{c}_{po} \cdot dT \right)_e = \sum_P n_s \left(\bar{h}_f^0 + \int_{25}^{TA} \bar{c}_{po} \cdot dT \right)_s \quad (6.9)$$

Onde TA é a temperatura adiabática de chama e T.entrada é a temperatura de entrada do combustível e do oxidante.

Esta equação (6.9) deve ser resolvida simultaneamente com as duas equações de equilíbrio (4.6) e (4.7).

Sendo assim, restam três incógnitas e três equações :

- TA – Temperatura adiabática de chama ou temperatura de equilíbrio;
- w – quantidade molar de H₂;
- x – quantidade molar de CO;

Devida a não linearidade deste sistema de equações ele será resolvido pelo método numérico chamado Newton Raphson.

7. MÉTODOS NUMÉRICOS

Durante o desenvolvimento do programa foram utilizados alguns métodos numéricos para a resolução das equações encontradas.

O método de Newton Rhapson foi utilizado na resolução do sistema não-linear de três equações onde as incógnitas eram: a temperatura adiabática de chama e o número de moles de H_2 e de CO .

O outro método numérico utilizado foi o Método da Dicotomia. Este método foi utilizado para a determinação do coeficiente de ar em função da quantidade volumétrica dos produtos. Este assunto será melhor detalhado no Cap.8.5.

Este segundo método foi escolhido para a solução deste problema principalmente pela facilidade de construção das rotinas e também para que não se alterasse a estrutura do programa.

A demonstração matemática dos métodos estão descritas nos dois próximos capítulos.

7.1 Método de Newton Rhapson

Este método baseia-se na construção de uma função $\phi(x)$ num intervalo onde exista pelo menos uma raiz e tal que $|\phi'(x)| < 1$.

Para a construção desta função algumas imposições devem ser feitas. A primeira delas é que $\phi'(x_{raiz}) = 0$, ou seja, que x_{raiz} seja a raiz da função a ser utilizada e também a de sua derivada.

Desta forma é possível se provar que se $\phi'(x)$ for uma função contínua, então existe um intervalo próximo a x_{raiz} onde $\max |\phi'(x)| < 1$.

Utilizando-se como fórmula mais geral da função $\phi(x)=x$ equivalente $f(x)=0$.

$$\phi(x) = A(x).f(x) + x$$

Onde $A(x)$ é uma função qualquer, tal que $A(x_{raiz}) \neq 0$. Assim temos :

$$\phi'(x) = A'(x).f(x) + A(x).f'(x) + 1$$

Determinado-se a função no ponto (x_{raiz}) e ressaltando que $f(x) = 0$ obtemos

$$\phi'(x_{raiz}) = A(x_{raiz}).f'(x_{raiz}) + 1$$

Como uma das hipóteses era de que $\phi'(x_{raiz}) = 0$, então:

$$A(x_{raiz}) = -\frac{1}{f'(x_{raiz})} \text{ que será a mesma equação de } A(x)$$

Desta forma a equação de aproximação da função utilizada será:

$$\phi(x_{n+1}) = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

Generalizando este método para a solução de um sistema de três equações obtemos:

$$\phi_1(x_1, x_2, x_3) = x_1 - \frac{f(x_1, x_2, x_3)}{f'_1(x_1, x_2, x_3)}$$

$$\phi_2(x_1, x_2, x_3) = x_2 - \frac{f(x_1, x_2, x_3)}{f'_2(x_1, x_2, x_3)}$$

$$\phi_3(x_1, x_2, x_3) = x_3 - \frac{f(x_1, x_2, x_3)}{f'_3(x_1, x_2, x_3)}$$

7.2 Método da Dicotomia

Este método foi utilizado principalmente pela facilidade de sua implementação. O processo de determinação da raiz da função baseia-se no seguinte Teorema de Bolzano:

“Se uma função f contínua num intervalo $[a,b]$ trocar de sinal nos extremos deste intervalo, então existe pelo menos uma raiz real de f no intervalo $[a,b]$ ”.[4]

Este teorema pode ser melhor entendido analisando-se a figura abaixo.

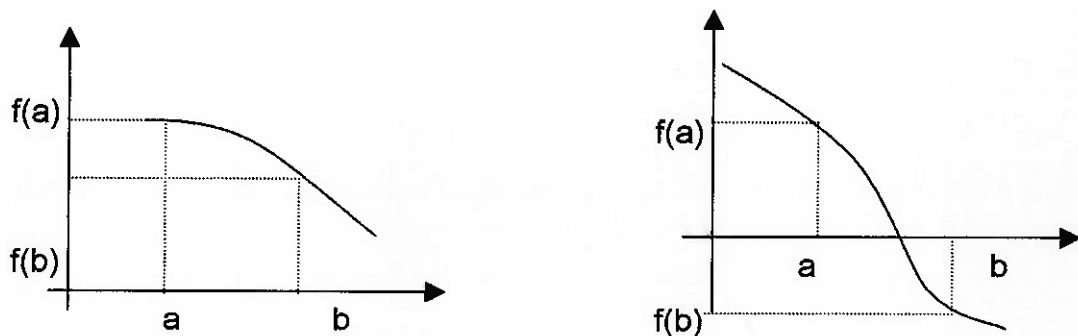


Figura 5 - Visualização do Teorema de Bolzano

Admitindo-se como certa a existência de uma raiz real no intervalo $[a,b]$ o método prossegue dividindo-se o intervalo na metade e verificando-se em qual subintervalo encontra-se a raiz da função.

Para se verificar a existência de uma raiz real num dos subintervalos de $[a,b]$ faz-se a seguinte operação.

- $f(a)*f(b)>0$, a raiz não se encontra neste subintervalo;
- $f(a)*f(b)<0$, a raiz encontra-se neste subintervalo;

Onde a extremidade b é normalmente substituída por $(a+b)/2$.

Este é um processo iterativo e o intervalo é subdividido continuamente até que o intervalo $[a,b]$ seja menor que um determinado valor “ δ ” pré-determinado.

A raiz da função é admitida como sendo a metade deste último subintervalo , $(a+b)/2$.

8. DADOS DE ENTRADA

Existe uma quantidade relativa de informações que devem ser fornecidas pelo usuário afim de que se possa caracterizar corretamente o processo de combustão.

Assim o usuário deve preencher corretamente os campos da janela de entrada de dados , Figura 6, antes que os cálculos sejam executados.

Programa de Combustão ProComb - [Estequiometria 1.cgl]

Projeto Editar Banco de Dados Gráficos Janela Unidades ?

Entradas

Banco de Dados: sólido

Combustível: Carvão vegetal

Composição do Combustível (base massa úmida)

%C = 88.20
 %H = 1.96
 %O = 2.94
 %N = 0.20

PCS (kJ/kg) = 33048.5
 PCI (kJ/kg) = 32571.8

% Cinzas (BU) 4.70
 % Umidade (BU) 2.00

Pressão 101.325 kPa

Temperaturas: Oxidante 298.15 K Combustível 298.15 K

Oxidante Pré-Aquecido 100.0 %

Tropas Térmicas 0.0 %

Umidade Absoluta do Ar Atmosférico 0.011 massa v.p./massa ar seco

Oxidante: ☒ ar atmosférico ☐ oxidante genérico

Fator de Enriquecimento: ☒ mH₂O/mCO₂ 3.78

Excesso de Oxidante: ☒ a/ excesso ☒ Coeficiente de ar 1.00

☐ %O₂ seco (molar)
☐ %O₂ úmido (molar)
☐ %CO₂ seco (molar)
☐ %CO₂ úmido (molar)

Gases de Outros Processos: 0.00 mCO₂/mcb
 0.00 nH₂O/mcb

Resultados

Temperatura de medição/saída (K) 298.15

Resultados da combustão Outras propriedades

Vazões

Volume do oxidante: 8.44 Nm³/kg de comb
 Massa do oxidante: 10.79 kg/kg de comb
 Volume dos produtos: 8.59 Nm³/kg de comb
 Volume dos produtos: 9.38 m³/kg de comb
 Massa total produtos: 11.79 kg/kg de comb
 Massa de gases: 11.74 kg/kg de comb

Análise dos Produtos (molar)

	gases secos	gases úmidos
%CO ₂	20.06	19.16
%H ₂ O	-	4.53
%N ₂	79.94	76.32

Coeficiente de ar: 1.00

Temperaturas

Temperatura adiabática de chama
 com dissociação: 2344.8 K
 sem dissociação: 2504.6 K

Temperatura dos produtos
 com dissociação: 2344.8 K
 sem dissociação: 2504.6 K

Temperatura de orvalho: 304.5 K

Executar Visualizar Equação

Figura 6 - Janela Principal

Esta grande quantidade de dados de entrada é uma tentativa de tornar o programa o mais abrangente possível. Essa sempre foi uma das idéias básicas durante o desenvolvimento do programa ProComb. Isto implica também numa maior versatilidade do programa.

Para uma melhor explicação sobre os dados de entrada estes estão divididos nos capítulos subsequentes.

8.1 Combustível

A primeira definição que deve ser feita pelo usuário é a escolha do tipo de combustível. Ela é feita selecionando-se uma das 5 opções de tipo de combustível.

Assim que for feita a escolha, o programa carrega as informações do banco de dados sobre o tipo de combustível e mostra o nome dos combustíveis e a sua respectiva composição e o valor do seu poder calorífico superior e inferior, como mostra a Figura 7.

Entradas

Banco de Dados
sólido

Composição do Combustível
(base mássica úmida)

%C = 88.20
%H = 1.96
%O = 2.94
%N = 0.20
PCS (kJ/kg) = 33048.5
PCI (kJ/kg) = 32571.8

% Cinzas (BU) 4.70
% Umidade (BU) 2.00

Combustível
Carvão vegetal
Carvão mineral (mina Tubarão)
Carvão mineral (África do Sul)
Carvão mineral (americano-oeste)
Carvão mineral (americano-leste)
Carvão coque
Eucalipto
Bagaço de cana

☒ nN2/nO2 (molar) 3.78
☐ mO2/matm (mássico)
☐ QO2/Qatm (volumétrico)

Excesso de Oxidante

Figura 7 - Seleção do combustível.

8.2 Propriedades do Oxidante e do Combustível

Após escolhido o combustível deve-se definir algumas propriedades deste e também do oxidante, são elas:

1. Pressão;
2. Temperatura do Oxidante;
3. Temperatura do Combustível;
4. % do Oxidante Pré-Aquecido;
5. Umidade Absoluta do Oxidante;

O valor da pressão ambiente default utilizado é de 101,325 kPa.

A valor da temperatura do oxidante que o usuário deve informar é aquele com que o oxidante entra na câmara de combustão.

Esta informação é importante porque às vezes utiliza-se os próprios gases dos produtos de combustão para se aquecer o oxidante e por isso deve-se informar a temperatura correta do mesmo.

Existem casos em que há uma mistura de oxidantes, parte dele é aquecido e parte não. Assim, nestes casos deve-se informar também qual a porcentagem do oxidante que está sendo pré aquecido.

O valor default para a quantidade de oxidante pré-aquecido é de 100% pois estes são os casos mais comuns.

Este tipo de artifício é feito, por exemplo, para se atingir temperaturas de chama maiores.

Outra propriedade importante do oxidante é a sua umidade absoluta. O valor default é de 0,011 massa vapor / massa de ar seco. Este valor corresponde a aproximadamente uma umidade relativa de 50% para o caso do oxidante ser o ar atmosférico a uma temperatura de 25°C e pressão de 101,325kPa.

A única informação necessária sobre o combustível é sua temperatura de entrada na câmara de combustão pelos mesmo motivos referidos ao oxidante.

O aumento desta temperatura faz com que se aumente a energia dos reagentes devida a essa parcela de entalpia sensível e portanto aumenta-se também a temperatura da chama.

Entretanto, no caso dos combustíveis este pré-aquecimento também têm outras finalidades. Existem certos combustíveis líquidos que possuem uma grande viscosidade e isto dificulta muito o seu transporte. Como a viscosidade varia muito com a temperatura aquecendo-se um pouco o combustível consegue-se uma grande diminuição da viscosidade que acaba facilitando deveras o seu fluxo reduzindo a perda de carga do mesmo.

Pressão	
101.325	kPa
Temperaturas:	
Oxidante	Combustível
298.15 K	298.15 K
Oxidante Pré-Aquecido	
100.0	%
Trocas Térmicas	
0.0	%
Umidade Absoluta do Ar Atmosférico	
0.011	massa vap./massa ar seco

Figura 8 - Alguns dados de entrada

8.3 Trocas Térmicas

Uma das maiores dificuldades no projeto de fornos é se determinar as trocas de calor. Estas trocas de calor acontecem principalmente por radiação e parte acontece também por convecção. O que se procura fazer para minimizar este problema é estimar as perdas de calor em função de alguns parâmetros.

Entretanto, neste programa também não se preocupou em calcular essas perdas, mas como sabemos que não são desprezíveis e ao contrário são de grande importância procurou-se introduzi-las nos cálculos da temperatura final dos produtos.

Assim, o valor fornecido pelo usuário no campo de trocas térmicas, é considerado como a quantidade de energia perdida durante o processo de combustão. Desta forma, a temperatura final dos produtos irá ser determinada pelo restante da entalpia dos reagentes.

Fazendo-se o processo inverso também é possível se estimar a perda de calor que está ocorrendo no processo de combustão. Se o usuário souber a temperatura da chama dentro do forno, ele pode variar o valor das trocas térmicas até a temperatura dos produtos se igualar com a real.

O campo de edição das trocas térmicas está mostrado na Figura 8.

8.4 Tipos de Oxidante

Existem dois tipos de oxidantes que estão sendo considerados:

- Ar Atmosférico;
- Oxidante Genérico;

O oxidante genérico é um caso mais geral do ar atmosférico onde a sua composição não é de 20,9% O_2 e de 79,1% N_2 .

Caso seja escolhida a opção de oxidante genérico o usuário deve fornecer a nova relação entre N_2 e O_2 .

Ou então ele pode definir qual é o fator de enriquecimento que está sendo utilizado. Este fator pode ser descrito como a razão mássica ou volumétrica de O_2 e de combustível como já foi descrito nos Cap. 3.4.2, 3.4.3 e 3.4.4.

A Figura 9 mostra como o usuário deve fornecer esses valores.

The image shows a software window titled "Oxidante". Inside, there are two radio buttons: "ar atmosférico" (unselected) and "oxidante genérico" (selected). Below these, there is a section titled "Fator de Enriquecimento" with three radio buttons and corresponding input fields: "nN2/nO2 (molar)" (selected) with a value of "2" in its field; "mO2/matm (mássico)" (unselected) with an empty field; and "QO2/Qalm (volumétrico)" (unselected) with an empty field.

Figura 9 - Enriquecimento do oxidante

8.5 Excesso de Oxidante

O usuário possui cinco opções para definir o excesso de oxidante:

- Coeficiente de Ar;
- Porcentagem molar de O_2 nos produtos em base seca;

- Porcentagem molar de O_2 nos produtos em base úmida;
- Porcentagem molar de CO_2 nos produtos em base seca;
- Porcentagem molar de CO_2 nos produtos em base úmida;

A primeira opção, coeficiente de ar, fornece diretamente qual é o excesso de ar que está sendo utilizado. Para o valor de coeficiente de ar igual a um corresponde a um excesso de ar de 100%, ou seja, a quantidade estequiométrica.

As outras quatro opções são formas indiretas de se definir o excesso de ar. Após definido um dos valores de O_2 , ou CO_2 nos produtos, o programa calcula qual deve ser o excesso de ar para que se obtenha este resultado.

Este assunto está melhor explicado no Cap.3.5.

A figura abaixo mostra onde o usuário define o excesso de ar do processo de combustão.

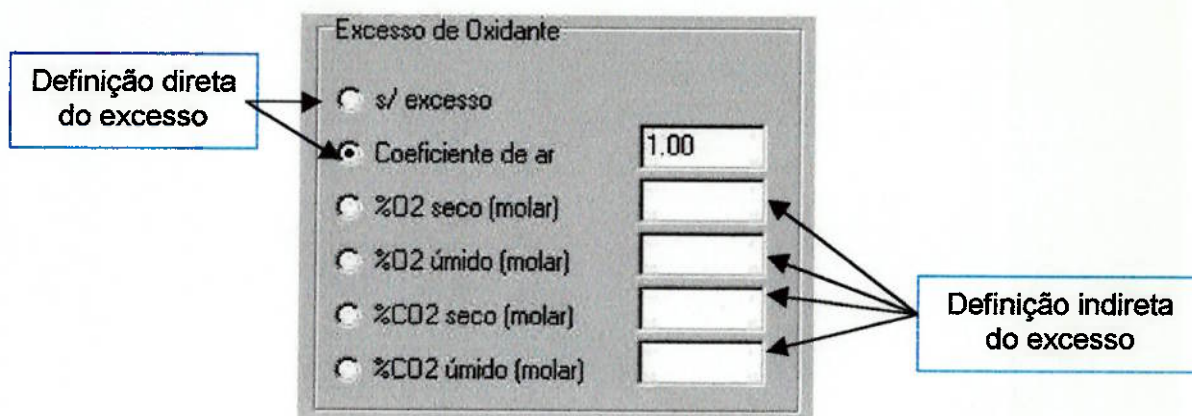


Figura 10 - Definição do excesso de oxidante.

8.6 Gases de Outros Processos

Os gases de outros processos são incorporados aos produtos após o processo de combustão. Como estes gases não participam da reação de combustão eles não influenciam no cálculo da temperatura adiabática de chama.

Mesmo assim, eles são utilizados para o cálculo de todas as outras demais propriedades.

Um exemplo da utilização desses gases são os secadores.

No processo de secagem de carvão, por exemplo, os produtos de combustão são utilizados para retirar umidade do carvão. Esta umidade que sai do carvão é então incorporada aos produtos de combustão.

Para se colocar este dado de entrada é necessário saber a razão entre a decomposição mássica destes gases e a vazão de combustível.

9. RESULTADOS

Os resultados apresentados pelo programa ProComb foram sendo definidos ao longo do seu desenvolvimento. De fato, existiram alguns tipos de resultados que eram calculados anteriormente mas que depois foram retirados ou substituídos por outros que acreditou-se serem mais importantes.

Assim é necessário ressaltar que as propriedades calculadas pelo programa ProComb são de grande importância para os profissionais que atuam na área de combustão e que por isso será dada uma explicação e uma possível aplicação de cada tipo de resultado nos capítulos posteriores.

Outra observação importante é que cada tela de apresentação dos resultados não está completamente preenchida, pois acreditamos que uma grande virtude deste programa é a sua flexibilidade. Assim, caso seja necessário calcular alguma outra nova propriedade que seja importante para um novo projeto é possível ser adicionada à tela de apresentação de resultados, simplesmente incluindo-a e alterando-se o programa fonte.

Devido a grande diversidade de resultados estes foram divididos em alguns grupos.

1. Equação de Combustão
2. Vazões
3. Análise dos Produtos
4. Temperaturas
5. Outras Propriedades

9.1 Equação de Combustão

O primeiro resultado apresentado é a equação geral da combustão. A partir dela é que são calculados todos os demais resultados.

Para se determinar os coeficientes da equação geral da combustão foi feito o balanço elementar por espécie química considerando-se inclusive

as dissociações já explicados nos Cap.4. A equação da reação de combustão é apresentada clicando-se no botão Visualizar Equação, como mostra a figura abaixo.

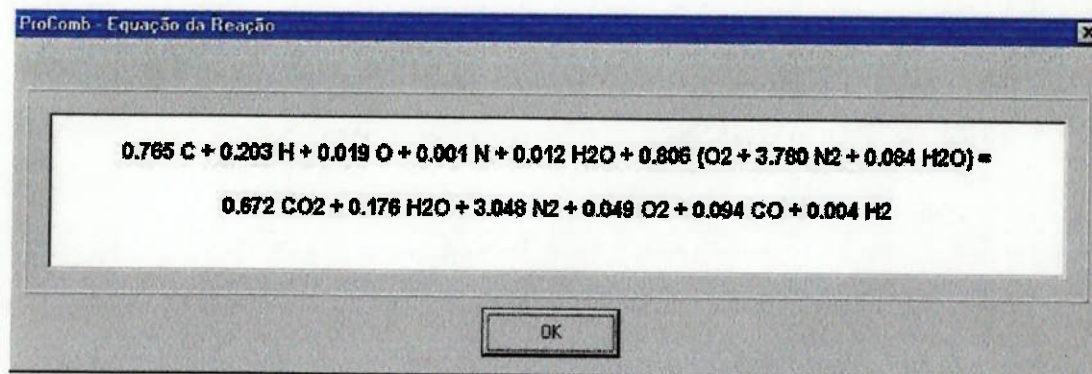


Figura 11 - Equação da Combustão

A equação apresentada considera apenas os elementos que participam da reação de combustão, e por isso as cinzas não estão presentes.

A segunda observação importante diz respeito à utilização da janela de Gases de Outros Processos. Os gases CO₂ e H₂O são admitidos como inseridos após a combustão e portanto não participam da reação. Desta forma, eles não estarão presentes na equação da combustão mas serão utilizados para o cálculo das demais propriedades.

9.2 Vazões

Para uma melhor apresentação dos resultados as vazões foram divididas em dois tipos:

- Vazão do oxidante;
- Vazão dos produtos;

Além disto, é fornecido os valores de vazões mássicas e volumétricas tanto do oxidante como dos produtos. Isto foi feito porque existem tanto

aparelhos que medem vazões mássicas como volumétricas, esta última sendo a mais comum. Assim, o usuário não precisa se preocupar em transformar o resultado.

Para combustíveis do tipo: sólido, líquido e mistura genérica, as vazões são fornecidas em função da vazão mássica do combustível. Já para combustíveis do tipo gasoso ou mistura gasosa as vazões são fornecidas em função da vazão volumétrica do combustível.

As vazões volumétricas são apresentadas em Nm^3 (normal metro cúbico).

Esta unidade foi utilizada para que os valores possam ser comparados mais facilmente porque sabe-se que este gás está na CNTP (Condição Normal de Temperatura e Pressão). Entretanto, a CNTP do Sistema Internacional difere do Sistema Inglês, mas isto será melhor abordado no Cap.12 - Unidades.

Para o cálculo do volume dos gases caso a unidade não seja Nm^3 utiliza-se a temperatura de medição/saída.

Assim os resultados apresentados são:

1. Vazão Volumétrica do Oxidante;
2. Vazão Mássica do Oxidante;
3. Vazão Volumétrica dos Produtos;
4. Vazão Mássica dos Produtos;
5. Vazão Mássica dos Gases;

O quinto resultado é calculado apenas para combustíveis sólidos, líquidos e misturas genéricas, pois ele desconsidera as cinzas presentes nos produtos de combustão.

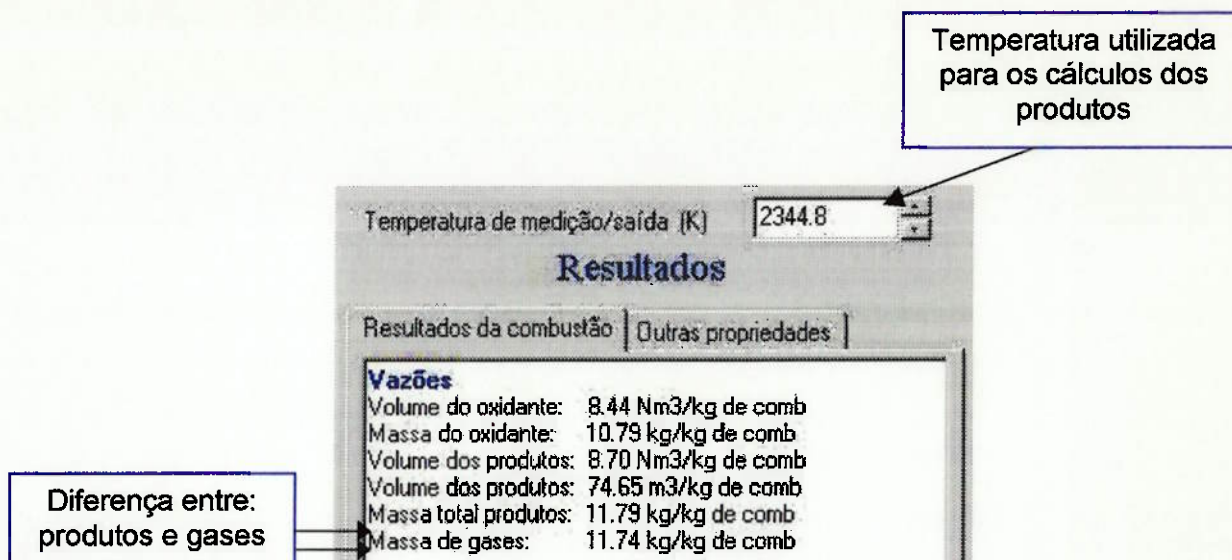


Figura 12 - Resultado das vazões dos produtos de um combustível sólido

9.2.1 Cálculo das Vazões

Da Química Geral sabe-se que as frações molares são equivalentes às frações volumétricas e às pressões parciais.

Assim, pode-se calcular a vazão volumétrica a partir dos coeficientes estequiométricos do oxidante e dos produtos

$$\phi.\alpha.(O_2 + \lambda.N_2 + \delta.H_2O)$$

- *Formulação do Oxidante*

$$\gamma_{CO_2}.CO_2 + \gamma_{H_2O}.H_2O + \gamma_{N_2}.N_2 + \gamma_{SO_2}.SO_2 + \gamma_{O_2}.O_2 + \gamma_{CO}.CO + \gamma_{H_2}.H_2$$

- *Formulação dos Produtos*

Primeiro calcula-se a massa molar do combustível e em seguida calcula-se as vazões.

Como os coeficientes estão na razão de um mol de combustível basta se dividir o volume de gases pela massa molar do combustível para se obter a vazão volumétrica por kg de combustível.

$$massa_molar_comb = \frac{(a * mC + b * mH + c * mO + d * mN + e * mS + f * mH_2O)}{(1 - cz)}$$

$$VazãoVol = \frac{(1+t+u) * s * 22.41 * vol}{massa_molar_comb}$$

O termo vol da equação acima representa a correção para o Sistema Inglês de unidade.

A vazão mássica é calculada multiplicando-se o número de moles de cada gás pela sua massa molar.

$$VazãoMass = \frac{(u * s * MH_2O + t * s * MN_2 + s * O_2)}{massa_molar_comb}$$

O mesmo é feito para a vazão dos produtos, exceto para a vazão de gases que não considera a massa das cinzas.

Para os combustíveis gasosos o volume é dividido por 22,41 pois como dito anteriormente os coeficientes dos elementos estão em função de 1 mol de combustível. Como 1 mol de gás na CNTP ocupa um volume de 22,41l, basta fazer o seguinte cálculo:

$$VazãoVolGás = \frac{(u * s * MH_2O + t * s * MN_2 + s * O_2)}{22.41 * vol}$$

Para se obter a vazão mássica procede-se da mesma maneira dos cálculos anteriores.

De posse dos valores das vazões de oxidante e de produtos é possível se projetar dutos, tubos, ventiladores e exaustores em função de uma determinada vazão de combustível, oxidante e produtos. Esta vazão é geralmente dada em kg/h ou m³/s e a partir daí pode-se começar a projetar outras partes de um forno por exemplo.

9.3 Análise dos Produtos

A análise dos produtos consiste simplesmente na decomposição dos produtos de combustão em frações percentuais do volume de cada gás presentes nos produtos.

Através deste análise é possível se obter uma idéia rápida da quantidade de gases presentes nos produtos de combustão, principalmente os tóxicos: CO_2 , CO e SO_2 que estão sendo gerados no processo de combustão.

Análise dos Produtos (molar)		
	gases secos	gases úmidos
%CO	2.42	2.31
%CO ₂	17.37	16.61
%H ₂	0.11	0.11
%H ₂ O	-	4.36
%O ₂	1.26	1.21
%N ₂	78.84	75.39
Coeficiente de ar: 1.00		

Figura 13 - Resultado da Análise dos Produtos

Como se pode notar na figura acima existem dois tipos de resultados :

- Gases úmidos;
- Gases secos;

Estes dois resultados são mostrados no programa pois existem análises em laboratórios que fornecem o resultado tanto para gases úmidos quanto para gases secos e assim o usuário pode comparar mais facilmente os valores do ensaio com os obtidos através do programa.

Os gases secos são assim chamados pois é retirada toda a umidade presente nele antes de ser feita a análise de sua composição.

Para o cálculo da porcentagem de cada gás presente nos produtos utilizou-se os coeficientes estequiométricos obtidos da equação de combustão.

9.4 TEMPERATURAS

A segunda janela de apresentação dos resultados diz respeito às temperaturas que são calculadas pelo programa.

Estas temperaturas são de grande importância no projeto dos fornos e do controle da chama.

9.4.1 Temperatura Adiabática de Chama

A temperatura adiabática de chama é um dos resultados fundamentais do programa ProComb. Ela já foi explicada em capítulos anteriores e por isso não será dada maior ênfase sobre este assunto.

O seu cálculo também já foi demonstrado no Cap.6 e por isso também não será demonstrado novamente.

9.4.2 Temperatura dos Produtos

A temperatura dos produtos é uma tentativa de se determinar a temperatura real da chama.

Esta temperatura é calculada em função da temperatura adiabática de chama. A partir dela estima-se uma perda de calor que pode acontecer por radiação ou convecção dentro do forno e que vai servir de base para se estimar a temperatura real da chama.

Devido a dificuldade em se determinar a perda de calor dentro das câmaras de combustão esta é aproximada através de um valor percentual. Existe uma caixa de edição na parte de entrada de dados em que o usuário coloca este valor percentual de perda de calor. O valor default é zero e isto significa que não existe perda de calor e que a temperatura dos produtos é igual a temperatura adiabática de chama. Caso todo o calor seja perdido a temperatura final dos produtos foi imposta como sendo a temperatura ambiente estimada em 25°C.

Assim foi feita uma linearização da entalpia dos produtos para que seja determinada a temperatura dos produtos considerando os seguintes valores:

- 0% de perda de calor $\rightarrow$ temperatura adiabática de chama.
- 100% de perda de calor $\rightarrow$ 25°C.

Após determinada esta temperatura ela passa a ser admitida como sendo a maior temperatura que os produtos de combustão podem atingir. Ela também é calculada considerando-se ou não a dissociação como é mostrado na figura abaixo.

Temperaturas	
Temperatura adiabática de chama	
com dissociação:	2344.8 K
sem dissociação:	2504.6 K
Temperatura dos produtos	
com dissociação:	2344.8 K
sem dissociação:	2504.6 K
Temperatura de orvalho:	304.5 K

Figura 14 - Resultado das Temperaturas

9.4.3 Temperatura de Orvalho

A temperatura de orvalho é a aquela em que o vapor de água contido nos produtos de combustão começa a se condensar num processo de resfriamento à pressão constante.

Observando-se a Figura o processo 1-2 é um exemplo processo de resfriamento isobárico e o ponto 2 é chamado de ponto de orvalho.

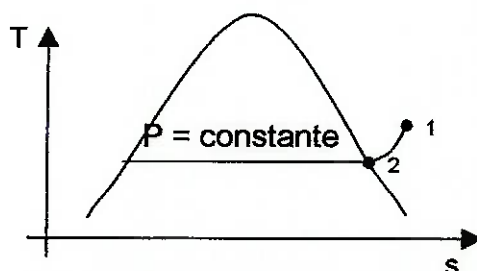


Figura 15 – Exemplo de um processo de resfriamento isobárico no diagrama T-s.

O cálculo desta temperatura é feito determinado-se primeiramente a pressão parcial do vapor de água na mistura. Em seguida utiliza-se uma rotina termodinâmica que calcula o ponto de orvalho em função da pressão parcial e da temperatura do vapor de água.

9.5 OUTRAS PROPRIEDADES

A janela de Outros Resultados fornece mais algumas propriedades dos produtos de combustão como por exemplo: massa molar dos produtos, calor específico, entalpia total dos produtos dentre outras.

A temperatura de medição/saída será adotada como a temperatura atual dos produtos de combustão sempre que necessário.

9.5.1 Massa Molar

A massa molar dos produtos é calculada simplesmente somando-se a composição mássica de cada um dos gases presente nos produtos de combustão e dividindo se pelo número total de moles.

$$Massa_Molar_Prod: \frac{vMCO_2 + wMH_2O + xMN_2 + yMSO_2 + zMO_2 + v_2MCO + w_2MH_2}{(v + w + x + y + z + v_2 + w_2)}$$

Para combustíveis gasosos calcula-se também a massa molar do combustíveis da mesma forma demonstrada anteriormente.

9.5.2 Densidade dos Produtos

A densidade é uma propriedade muito utilizado nos cálculos termodinâmicos e por isso foi introduzida ao programa. Através da densidade dos produtos também é possível se transformar facilmente a vazão mássica em volumétrica ou vice-versa.

Entretanto o seu cálculo foi feito utilizando-se a fórmula de Clapeyron da Teoria de Gases Perfeitos. Os termos da equação são:

$$\rho = \frac{P.M}{R.T}$$

- $\rho \rightarrow$ densidade;
- $P \rightarrow$ pressão atmosférica ;
- $M \rightarrow$ massa molar dos produtos;
- $R \rightarrow$ constante universal dos gases perfeitos;
- $T \rightarrow$ temperatura de medição/saída;

9.5.3 Perdas por Escape

A perda por escape é um resultado que mostra qual a porcentagem de energia dos produtos na temperatura adiabática de chama está presente nos mesmos na temperatura de medição saída.

Sendo assim, este valor representa qual é a fração de energia não está sendo utilizada. Se a temperatura final dos produtos for de 25°C significa que toda a energia sensível foi utilizada. Caso a temperatura seja a adiabática de chama então 100% da energia sensível ainda pode ser utilizado.

Desta forma, utiliza-se a razão das entalpias sensíveis para se determinar o valor da perda por escape.

$$Perda_por_Escape : \frac{h_produtos(Temp._medicao/saida)}{h_produtos(Temp._adiabatica_de_chama)}$$

9.5.4 Calor Específico

O programa fornece como resultados o calor específico tanto do combustível como dos produtos de combustão.

O calor específico calculado é o calor específico a pressão constante c_{p0} .

O calor específico dos combustíveis sólidos e líquidos é considerado como sendo constante durante toda a faixa de temperatura utilizada.

Entretanto, para combustíveis gasosos foram utilizadas funções que descrevem o comportamento do calor específico em função da temperatura (Apêndice A).

Assim, o calor específico total do combustível ou dos produtos é calculado somando-se o calor específico molar de cada um dos gases presentes para uma determinada temperatura.

O calor específico médio é o calor específico que se for considerado como um valor constante fornecerá o mesmo resultado do que se for utilizada a curva do mesmo, dentro da faixa T1 a T2. A definição de calor específico médio pode ser demonstrada como sendo:

$$c_{p0} \text{ médio} = \frac{1}{\Delta T} \int_{T_1}^{T_2} c_{p0}(T) dT$$

No caso particular deste programa a temperatura T1 foi admitida como sendo a temperatura padrão de 25°C e T2 a temperatura de medição/saída. O valor de c_{p0} médio dos produtos é portanto calculado somando-se o calor específico molar de cada um dos gases presentes nos produtos de combustão.

9.5.5 Entalpia dos Produtos de Combustão

A entalpia dos produtos de combustão é calculada de forma semelhante à dos reagentes.

A entalpia molar total dos produtos é dividida em entalpia de formação e a entalpia sensível.

$$\bar{h}_p = \sum_P n_s (\bar{h}_f^0 + \Delta \bar{h})_s$$

A entalpia molar de formação dos gases é utilizada como sendo um dado já conhecido e portanto não é calculado. Ele pode ser obtido facilmente da literatura. O único cálculo feito é somar corretamente as entalpias molares de cada gás.

A entalpia sensível é calculada da mesma forma como os reagentes demonstrada no Cap.6.1, onde a fórmula utilizada é :

$$\Delta \bar{h} = \int_{T=25^{\circ}C}^{T^f} \bar{c}_{p0}(T) dT$$

Onde o valor de T^f é a temperatura de medição/saída e c_{p0} é o calor específico a pressão constante.

Então, a entalpia final dos produtos de combustão é determinada somando-se as duas entalpias: formação e sensível. Para uma melhor facilidade a entalpia total é mostrada em unidade mássica e volumétrica como mostra a Figura 16.

Resultados da combustão		Outras propriedades
Propriedades		
Massa molar do comb.:	44.09 kg/kmol	
Cp do combustível:	1.670 kJ/kg K	
Densidade do comb.:	1.967 kg/Nm ³	
Massa molar dos produtos:	28.16 kg/kmol	
Cp dos produtos:	1.095 kJ/kg K	
Cp médio dos produtos:	1.095 kJ/kg K	
Densidade dos produtos:	1.151 kg/m ³	
Perdas por escape:	0.00 %	
H formação prod. (ref. 25°C):	-1954.2 kJ/kg	
H sensível dos produtos:	0.0 kJ/kg	
H total dos produtos:	-1954.2 kJ/kg	
H total dos produtos:	-2455.0 kJ/Nm ³	

Figura 16 - Resultado das Outras Propriedades

10. BANCO DE DADOS

No banco de dados estão armazenados todas as informações necessárias sobre os combustíveis: a sua composição, calor específico e ainda algumas outras propriedades.

Para tornar o programa mais versátil e mais profissional as informações do banco de dados estão armazenadas em arquivos dentro do diretório chamado Banco de Dados.

Assim, cada vez que é necessário salvar ou ler as informações do banco de dados o programa modifica estes arquivos.

Numa primeira etapa estes arquivos eram criados como arquivos texto. Entretanto, tentando-se evitar uma fácil manipulação destes arquivos e para não comprometer a execução do programa estes foram transformados em arquivos binários..

Dentre os combustíveis presentes no Banco de Dados existem alguns que não podem ser alterados pelo usuário pois são considerados "default".

Existe um menu chamado Banco de Dados o qual possui três opções:

- ⇒ Visualizar/Editar;
- ⇒ Adicionar/Remover;
- ⇒ Salvar Banco de Dados;

Cada uma delas permite fazer certas alterações no Banco de Dados.

Através da janela "Visualizar/Editar" o usuário pode apenas editar valores dos combustíveis "não default" e modificar os seus nomes e suas propriedades.

A janela "Adicionar/Remover" possibilita que o usuário adicione e remova novos combustíveis. Esta janela permite também que o usuário adicione e remova propriedades do banco de dados. As novas propriedades ,entretanto, terão suas unidades definidas pelo usuário e não serão transformadas para outros sistemas de unidades quando este for alterado pelo usuário.

ProComb - Banco de Dados

Classe do combustível: gás
(Composição do combustível em base molar úmida)

	%CH ₄	%C ₂ H ₂	%C ₂ H ₆	%C ₃ H ₆	%C ₃ H ₈	%C ₄ H ₁₀	%C ₅ H ₁₂	%H ₂	%CO	%CO ₂
Hidrogênio	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	100.00	0.00	0.00
Monóxido de Carbono	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	100.00	0.00
Metano	100.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Acetileno	0.00	100.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Propano	0.00	0.00	0.00	0.00	100.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Butano	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	100.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Gás de Nafta	32.80	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	43.20	2.50	20.90
Gás de Coqueria	28.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	54.00	7.40	2.00
Gás de Alto Forno	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.00	27.00	11.00
Gás Pobre de Madeira	2.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	18.00	20.00	12.00
Gás Pobre de Carvão Vegetal	0.50	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	12.20	28.00	5.50
GLP	0.00	0.00	0.00	0.00	56.90	43.10	0.00	0.00	0.00	0.00
Total	100.30	0.00	0.00	0.00	0.70	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00

OK Cancel Adicionar combustível Adicionar propriedade Remover combustível Remover propriedade

Figura 17 - Janela do Banco de Dados

O menu "Salvar Banco de Dados" salva o banco de dados atual. Caso o banco de dados seja alterado e ainda não foi salvo o programa se encarrega de perguntar ao usuário se ele deseja salvá-lo antes que outro banco de dados seja carregado ou antes que o usuário finalize o programa.

No campo de calor específico é importante ressaltar que este valor é apresentado como sendo calculado a 25°C.

Para os combustíveis sólidos, líquidos e misturas genéricas o usuário deve fornecer o valor do poder calorífico inferior, mas para combustíveis gasosos o usuário deve fornecer o poder calorífico superior.

Devida a algumas diferenças entre o banco de dados dos sólidos, líquidos e gases e o das misturas gasosas e genéricas, será dada uma explicação mais detalhada destes dois últimos nos capítulos que se seguem.

10.1 Mistura Gasosa

As misturas gasosas diferem apenas um pouco dos gases. Quando está se adicionando um mistura gasosa é necessária completar apenas a composição volumétrica dos gases.

Diferentemente dos gases onde o usuário deve fornecer o valor do poder calorífico e do calor específico, estes dois campos são calculado pelo programa para as misturas gasosas.

Caso o usuário não concorde com os valores apresentados pelo programa ele pode modificá-los sem problema algum. Entretanto, o calor específico dos gases é utilizado como uma função e o número apresentado na tabela é apenas um valor calculado a 25°C.

	%CH4	%C2H2	%C2H6	%C3H6	%C3H8	%C4H10	%C5H12	%H2
Mistura 1	40	0.00	0.00	0.00	0.00	20	0.00	0.00

Figura 18 - Janela para se adicionar uma mistura gasosa.

10.2 Mistura Genérica

A mistura genérica é um combustível especial dentre os utilizados pelo programa pois ele pode ser feito a partir do banco de dados dos combustíveis sólidos, líquidos e gasosos.

Quando o usuário clicar no botão adicionar combustível aparecerá uma nova janela.

No lado direito desta janela encontra-se uma mini tabela onde estão presentes todos os combustíveis sólidos, líquidos e gasosos. No lado esquerdo existe uma lista com dois campos, uma caixa de edição e mais uma parte para opção, como mostra a Figura 19.

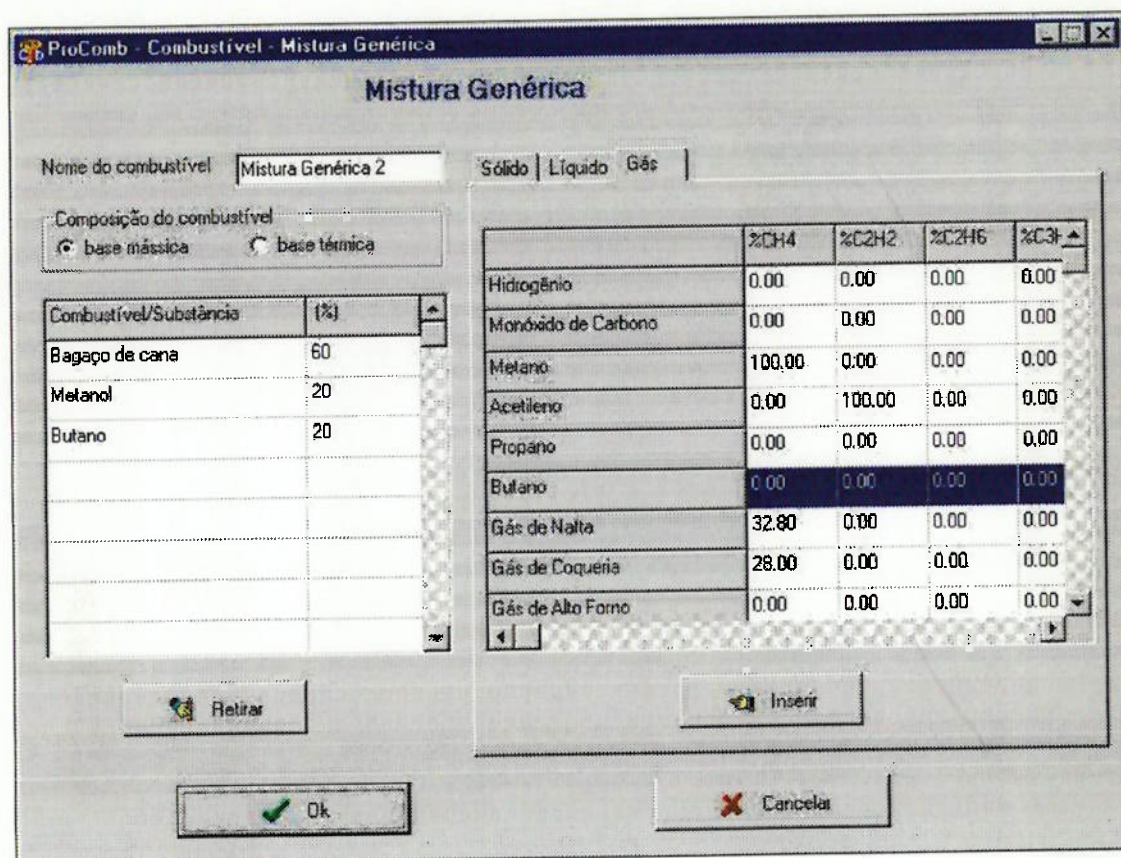


Figura 19 - Janela para se adicionar uma mistura genérica

A lista no lado esquerdo da tabela é o lugar onde estão escritos os combustíveis que fazem parte da mistura genérica. Ao lado é necessário que o usuário coloque qual a porcentagem mássica ou térmica deste combustível.

A porcentagem em base térmica é definida como sendo a contribuição do poder calorífico do combustível no poder calorífico total da mistura genérica.

Caso a porcentagem dos combustíveis seja dada em base mássica o programa transforma os valores de porcentagem volumétrica dos gases para base mássica e depois continua o desenvolvimento igualmente para os três tipos de combustível.

Para a criação do combustível genérico o usuário deve escrever os nomes dos combustíveis que irão constituir-lo na lista. Ou então selecioná-lo na tabela de combustíveis e depois clicar no botão inserir.

Quando o usuário clicar no botão inserir, o nome do combustível selecionado deverá aparecer na lista.

Caso usuário deseja remover o combustível ele deve apagar o seu nome ou selecioná-lo e clicar no botão remover.

Não há problema caso o usuário deixe linhas em branco entre os combustíveis. Se houver algum erro no nome do combustível o programa irá informar o usuário. O número máximo de combustíveis que podem compor uma mistura genérica é 10.

Após criada a mistura esta é apresentada como se fosse um combustível sólido com as porcentagens dos elementos químicos, mas os valores da composição dos seus gases são armazenados para serem utilizados depois em determinados cálculos.

11. GRÁFICOS

Os resultados apresentados até agora fornecem o valor de uma propriedade para uma condição de operação determinada.

Entretanto, na elaboração de projetos é importante se analisar outras condições de operação dos dispositivos que não são desejáveis, mas que podem vir a acontecer.

Além disto, é muito importante saber como variam algumas propriedades em função de outras. Assim, pode-se fazer melhores estimativas e também entender melhor como alguns parâmetros de projeto estão relacionados com os demais.

Tentando-se fazer um método para auxiliar na solução nestes tipos de questões foi feita uma janela de gráficos para alguns resultados do programa.

Esta janela de gráficos busca principalmente mostrar ao usuário o comportamento de determinados parâmetros em função de outros.

Neste caso específico, preocupou-se em observar o comportamento de alguns resultados variando-se o excesso de oxidante.

Esta análise é de grande importância porque costuma-se utilizar muito a variação do excesso de oxidante para se controlar a temperatura da chama, ou então para se garantir a queima total do combustível.

Sendo assim, a janela de gráficos foi feita de forma a permitir a construção de cinco tipos diferentes de gráficos em função da variação do coeficiente de ar. As propriedades analisadas são:

- Composição Molar do Produtos;
- Temperatura Adiabática de Chama;
- Temperatura dos Produtos;
- Vazão do Oxidante;
- Vazão dos Produtos

A seguir serão mostrados os resultados de cada um dos tipos de gráfico.

11.1 Exemplo 1 – Análise dos Produtos

Este tipo de gráfico permite uma rápida visualização dos produtos de combustão em função do coeficiente de ar.

Além disto, existem também duas possibilidades de se construir o gráfico. A primeira considerando-se os gases em base seca e a segunda considerando-os em base úmida. Isto deve ser definido pelo usuário no campo "Tipo de Gráfico". Neste gráfico pode-se observar principalmente a variação da quantidade de O_2 e CO_2 durante o aumento do excesso de oxidante.

Os demais gases permanecem com sua composição praticamente constante durante toda a faixa analisada como mostra o gráfico da Figura 20.

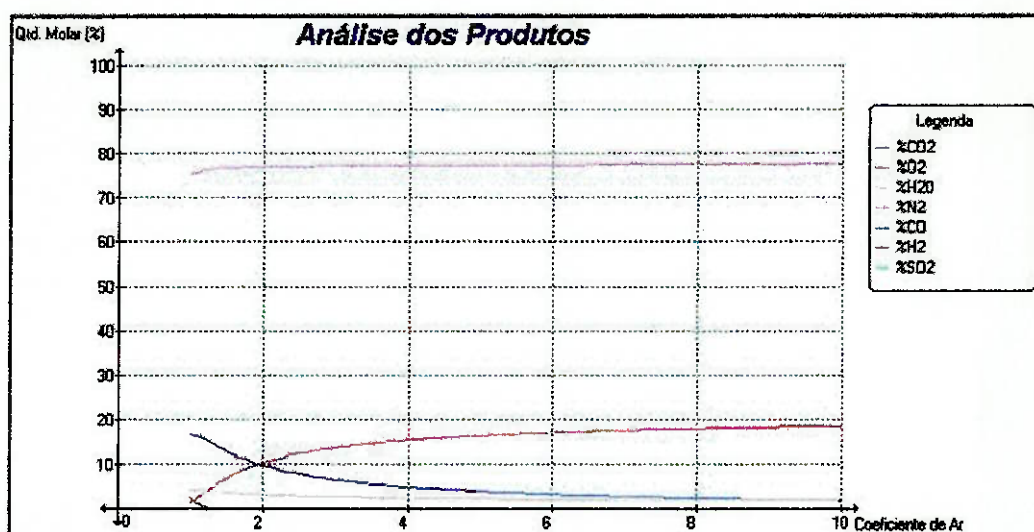


Figura 20 - Gráfico de Análise dos Produtos

Entretanto, para altas temperaturas o comportamento da composição dos gases nos produtos de combustão pode se tornar um pouco diferente.

O gráfico da Figura 21 mostra a análise dos produtos de uma queima de carvão vegetal com oxigênio puro. Neste processo de combustão a temperatura adiabática de chama atinge valores superiores a 3500°C.

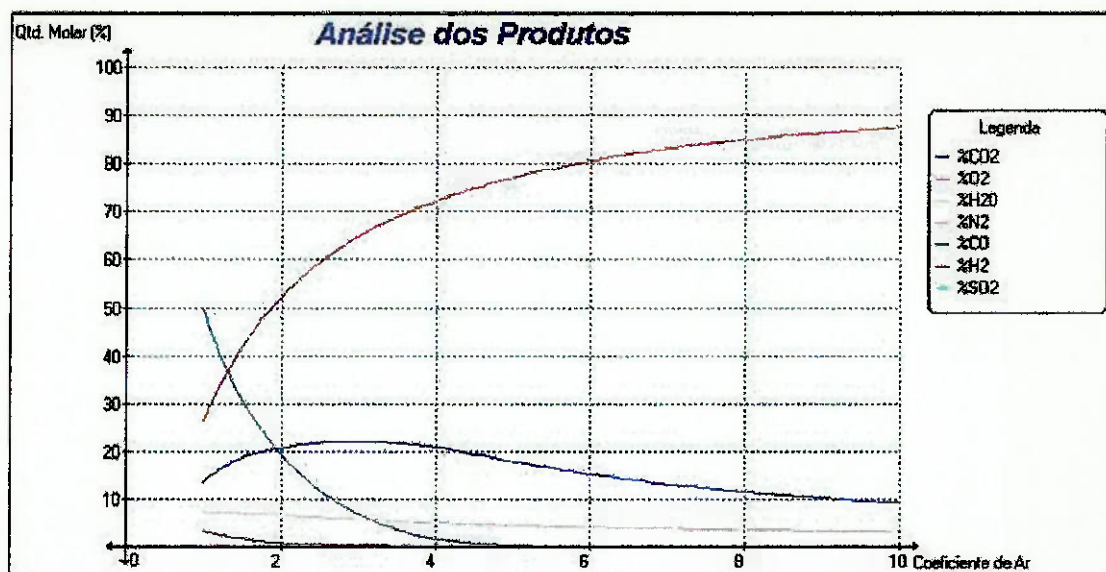


Figura 21 - Resultado da combustão do carvão vegetal com O₂ puro.

Assim, neste gráfico é possível se verificar a presença dos gases CO e H₂ para valores de coeficiente de ar próximos a um. Também pode se notar como sua concentração cai rapidamente com o aumento do excesso de ar que é inversamente proporcional à temperatura adiabática de chama.

11.2 Exemplo 2 – Temperatura Adiabática de Chama / Temperatura dos Produtos

Através deste tipo de gráfico pode se obter uma idéia de como a temperatura da chama varia em função do excesso de ar para um determinado combustível.

A Figura 22 mostra a variação da temperatura adiabática de chama para o gás hidrogênio em função da variação do coeficiente de ar.

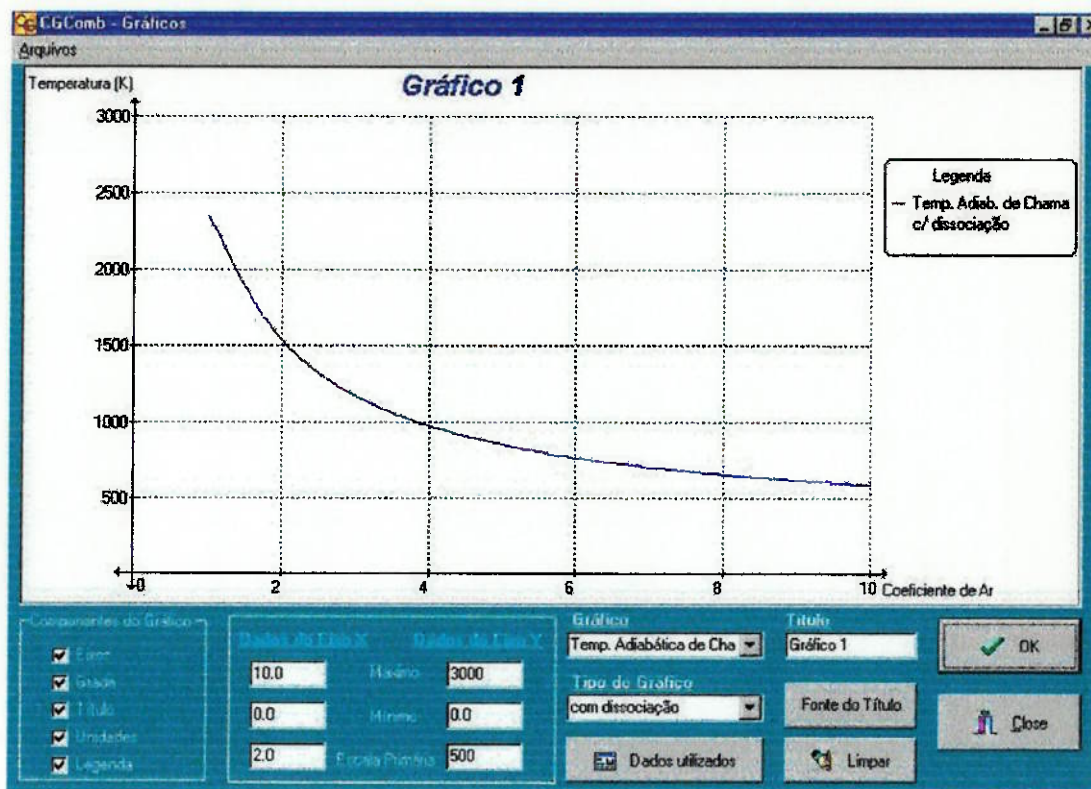


Figura 22 - Gráfico da temperatura adiabática de chama da combustão do H₂.

Como o programa calcula a temperatura adiabática de chama tanto considerando-se a dissociação dos gases como sem considerá-la, permitiu-se ao usuário a construção do gráfico com qualquer uma das temperaturas.

A escolha é feita através do campo Tipo de Gráfico como pode ser visto também na Figura 22. Selecionando-se a opção ambas as curvas o programa constrói o gráfico com a temperatura da chama considerando-se a dissociação e outra curva sem considerar a dissociação. Através deste gráfico pode-se notar a grande importância do processo de dissociação que utiliza grande parte da energia o que evita que a temperatura cresça demais.

Um exemplo deste caso está representado no gráfico da Figura 23. Neste gráfico pode-se observar o grande erro que estar-se-ia cometendo se a dissociação não fosse considerada.

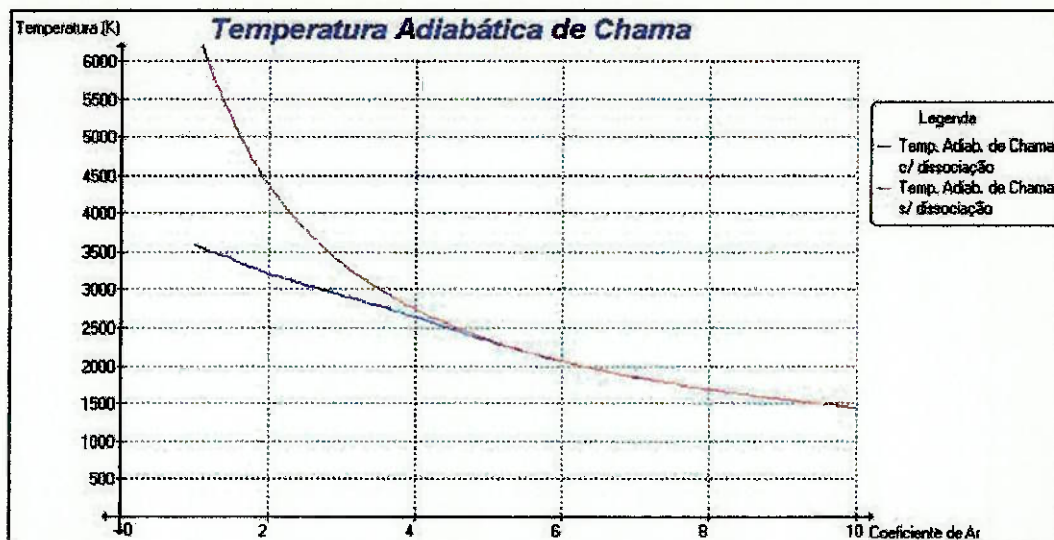


Figura 23 - Gráfico da temperatura adiabática de chama calculada com e sem dissociação

Existe também a possibilidade de se construir os gráficos da temperatura adiabática de chama e da temperatura dos produtos juntos. O gráfico da Figura 24 mostra este caso. A temperatura dos produtos foi calculada para um valor de trocas térmicas de 30%.

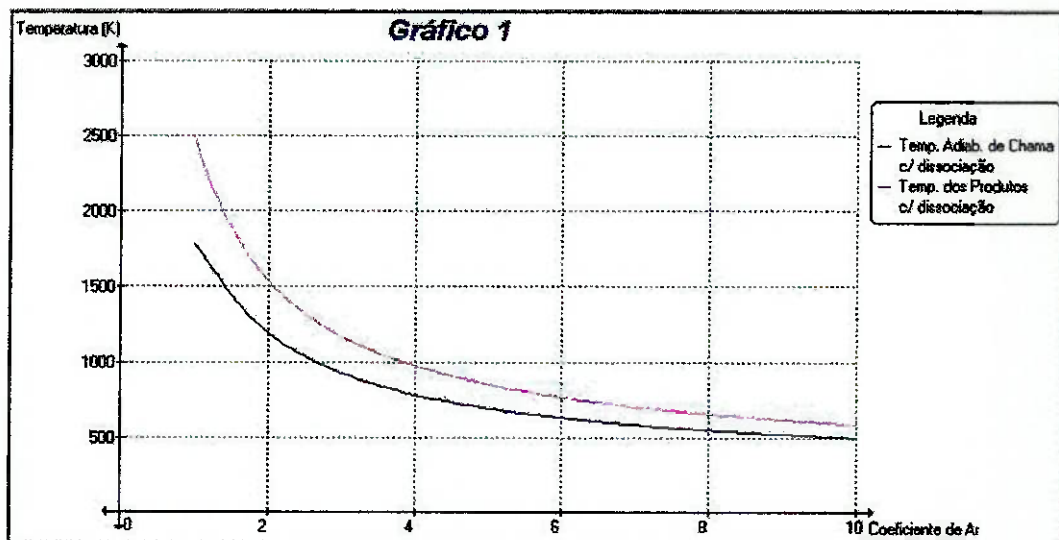


Figura 24 - Gráfico da temperatura adiabática de chama e temperatura dos produtos.

11.3 Exemplo 3 – Vazão do Oxidante / Vazão dos Produtos

Este último exemplo mostra como variam as vazões de oxidante e dos produtos em função do aumento de oxidante.

Este gráfico busca simplesmente ajudar o usuário a ter uma boa estimativa de como irão ficar as vazões caso se altere o coeficiente de ar.

Quando for selecionado este gráfico o usuário poderá optar pela utilização da vazão mássica ou volumétrica para a construção dos gráficos.

A Figura 25 mostra como varia a vazão mássica dos produtos de combustão em do Querosene em função do coeficiente de ar.

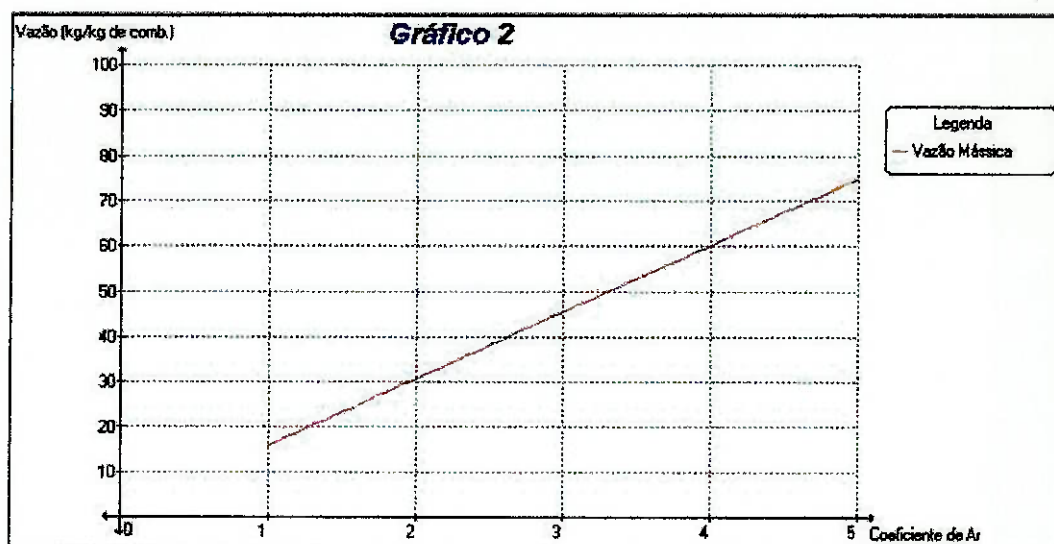


Figura 25 - Gráfico de vazão mássica

12. UNIDADES

O programa ProComb foi desenvolvido de modo a trabalhar em três sistemas de unidades padrão e mais um sistema variável:

- Sistema Internacional;
- Sistema Técnico;
- Sistema Inglês;
- Usuário;

Quando se modifica o sistema de unidades todos os valores presentes na tela atual são transformados para a nova unidade.

O quadro abaixo mostra quais são as unidades adotadas para cada uma das propriedades em cada um dos sistemas de unidades.

Tabela 1 – Unidades.

	<u>Propriedades</u>					
	Temperatura	Pressão	Volume Específico	Entalpia Específica	PCS ou PCI	Calor Específico
Sistema Internacional	K	kPa	m ³ /kg	kJ/kg	kJ/kg	kJ/kgK
Sistema Técnico	°C	kgf/cm ²	m ³ /kg	kcal/kg	kcal/kg	kcal/kg°C
Sistema Inglês	°F	psia	ft ³ /lbm	Btu/lbm	Btu/lbm	Btu/lbm°F

O sistema de unidades chamado de usuário, permite que o usuário defina quais as unidades que serão adotadas na apresentação dos resultados. A escolha das unidades é feita através da janela Unidades – Usuário exposta na Figura 26.

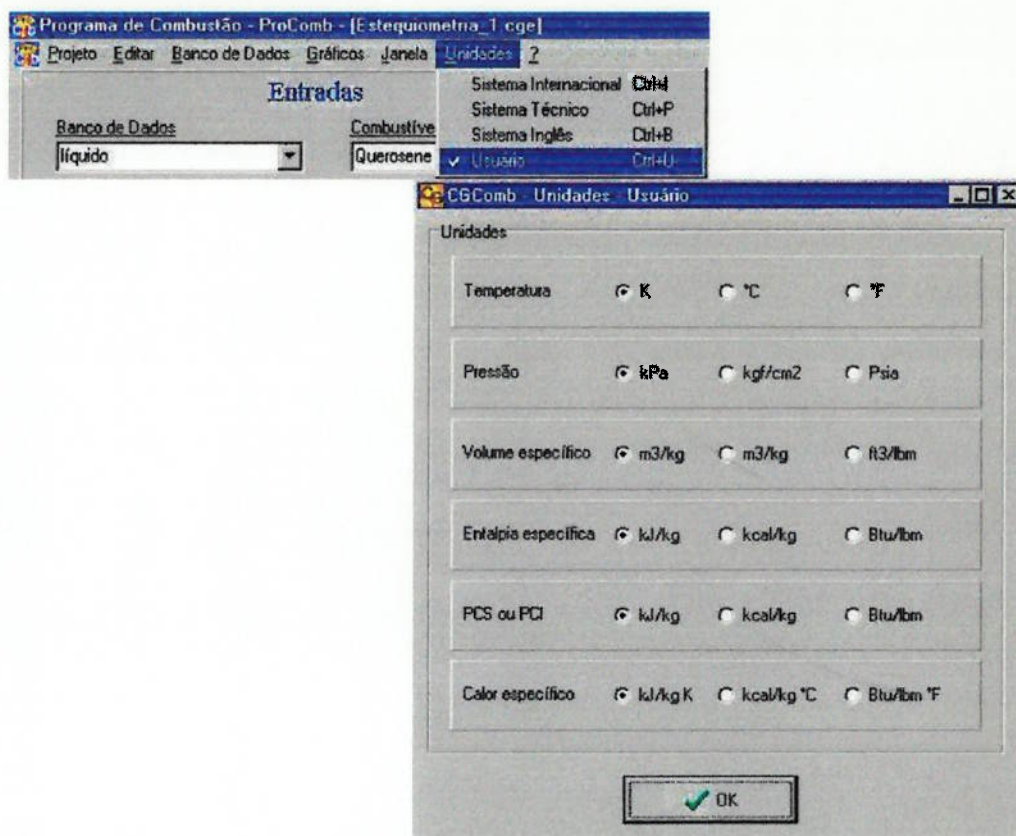


Figura 26 - Sistema de unidades – usuário

Desta forma ele poderá mesclar as unidades expostas na tabela 41 acima para configurar um sistema melhor para realizar o seu trabalho.

Entretanto existem algumas unidades que são utilizadas no programa que não aparecem nesta tabela mas que estão ligadas à ela por alguma outra propriedade muito semelhante, são elas:

- ⇒ Nm^3/kg de comb, ou qualquer outro tipo de vazão está relacionado com a unidade do volume específico;
- ⇒ Densidade está relacionada com a unidade de volume específico;
- ⇒ Massa molar também está relacionada com a unidade do volume específico;
- ⇒ kJ/Nm^3 , neste caso específico as duas unidades são utilizadas independentemente uma da outra. O valor em kJ está relacionado com a entalpia específica. Já o valor em Nm^3 está relacionado com o volume específico.

Os valores adotados com Condição Normal de Temperatura e Pressão (Cntp) para gases são diferentes entre os Sistemas Internacional e Inglês.

No Sistema Internacional a Cntp considera os seguintes valores:

- Temperatura = 25°C;
- Pressão = 1atm = 101.325 kPa;
- Nm³ = Normal Metro Cúbico;

Já o Sistema Inglês considera como valores padrões da Cntp:

- Temperatura = 0°C;
- Pressão = 14,696 psia = 101.325 kPa;
- scf =Square Cubic Feet;

Desta forma, os valores de volume Nm³ e scf nunca devem ser comparados pois consideram os gases em condições diferentes de temperatura.

13. MANIPULAÇÃO DE ARQUIVOS

O programa ProComb foi desenvolvido de modo a permitir ao usuário também a manipulação dos projetos realizados.

O usuário pode fazer todas as operações que são normalmente feitas com arquivos.

Assim sendo, os projetos executados pelo programa podem ser gravados para uma posterior visualização dos resultados.

Além disto, também existe a possibilidade de se imprimir o projeto.

No caso da impressão do projeto o usuário pode optar pela impressão do projeto em forma compacta, completa ou ainda a impressão do banco de dados.

Estas três impressões estão presentes nos Apêndices C,D e E respectivamente.

Nos arquivos de impressão compacta estão presentes todos os dados de entrada , ou seja, de como é realizado o processo de combustão, a equação de combustão e mais os resultados: Vazões, Análise dos Produtos e Temperaturas. A impressão compacta foi criada principalmente para permitir ao usuário que os resultados de um projeto possam ser transportados de forma simples pois ela ocupa apenas uma página.

Na impressão completa estão presentes todos os dados da impressão compacta mais todos os resultados da janela Outras Propriedades.

14. AJUDA

Como o programa ProComb foi desenvolvido para vários tipos de usuários foi feita uma parte de ajuda.

Existe um menu de ajuda na parte superior da tela. Dentro da parte de ajuda ao usuário existe uma descrição resumida dos componentes mais importantes.

Assim caso o usuário tenha alguma dúvida sobre algum dado de entrada, ou sobre algum resultado ele pode consultar o menu de ajuda.

15. ESTRUTURA DO PROGRAMA

O programa ProComb é constituído de vinte Units e mais uma funcionando como projeto que reúne todas as outras.

Ele foi desenvolvido utilizando-se um sistema de formulários chamado MDI (Multiple Document Interface). Este sistema permite que vários formulários sejam utilizados dentro de um principal.

Desta forma, o usuário pode trabalhar com diversos projetos ao mesmo tempo sem que o funcionamento de um interfira no outro. Os formulários podem ser rearranjados lado a lado ou em cascata como mostram as Figuras 27 e 28.

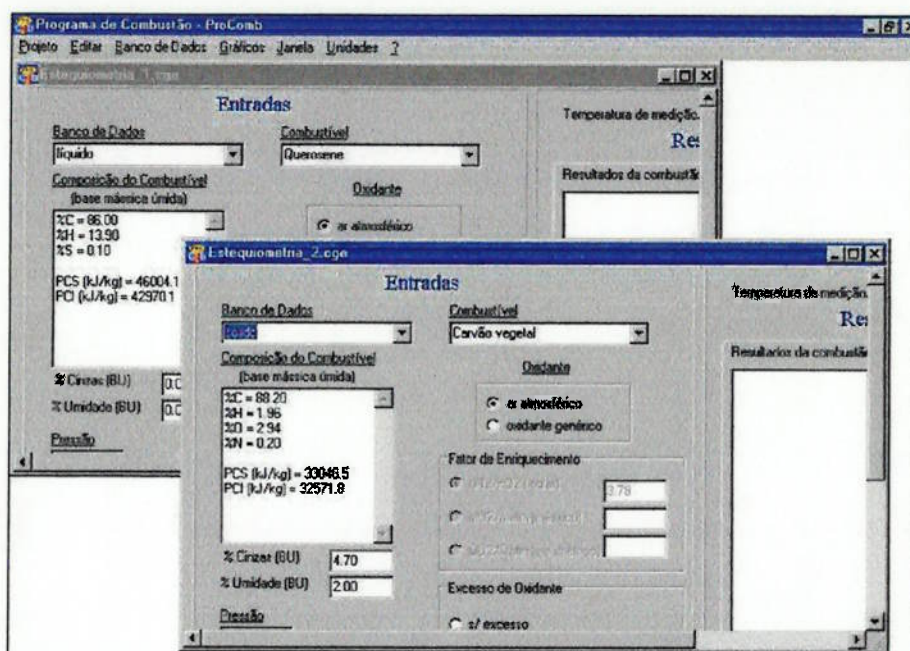


Figura 27 - Projetos dispostos em cascata.

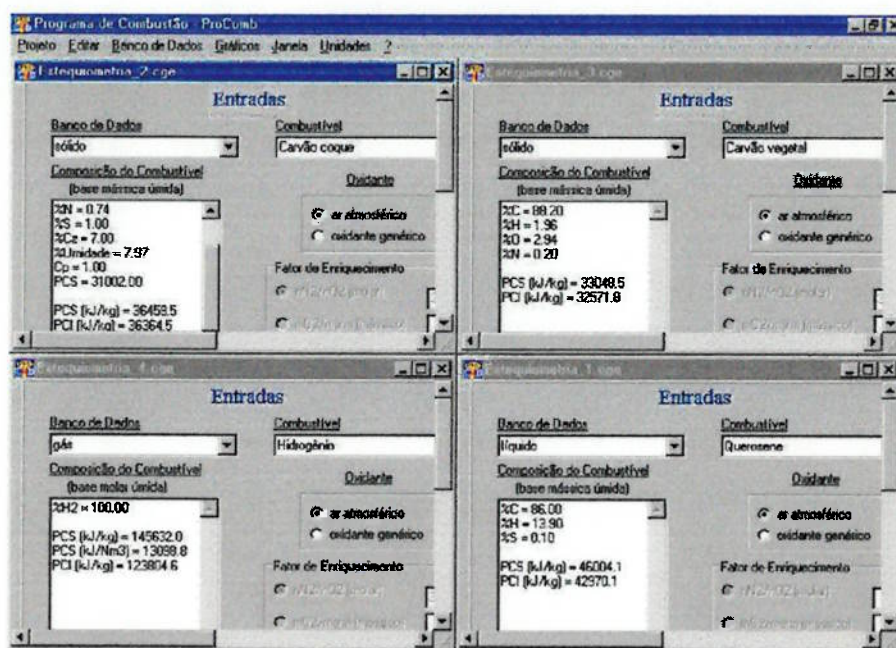
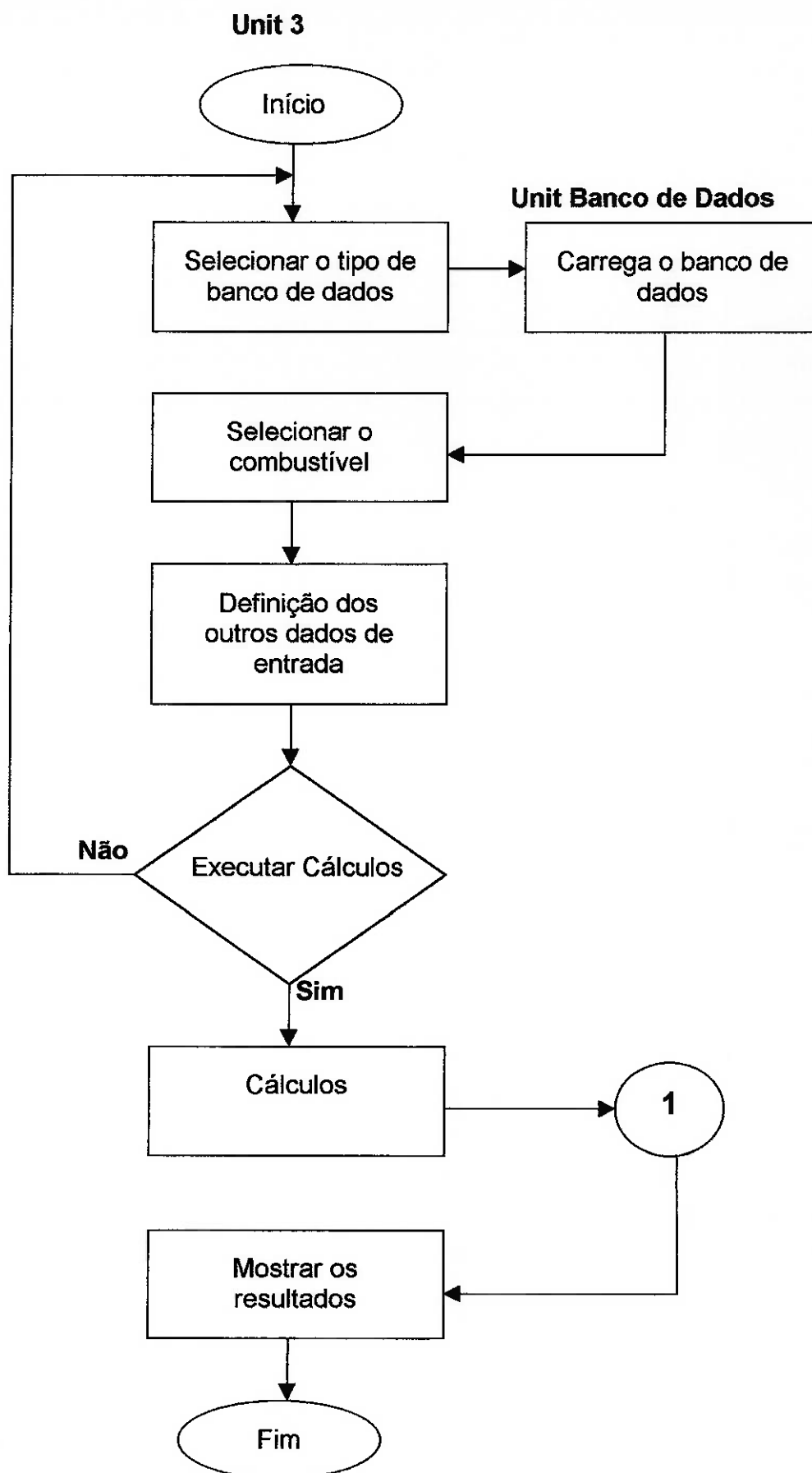
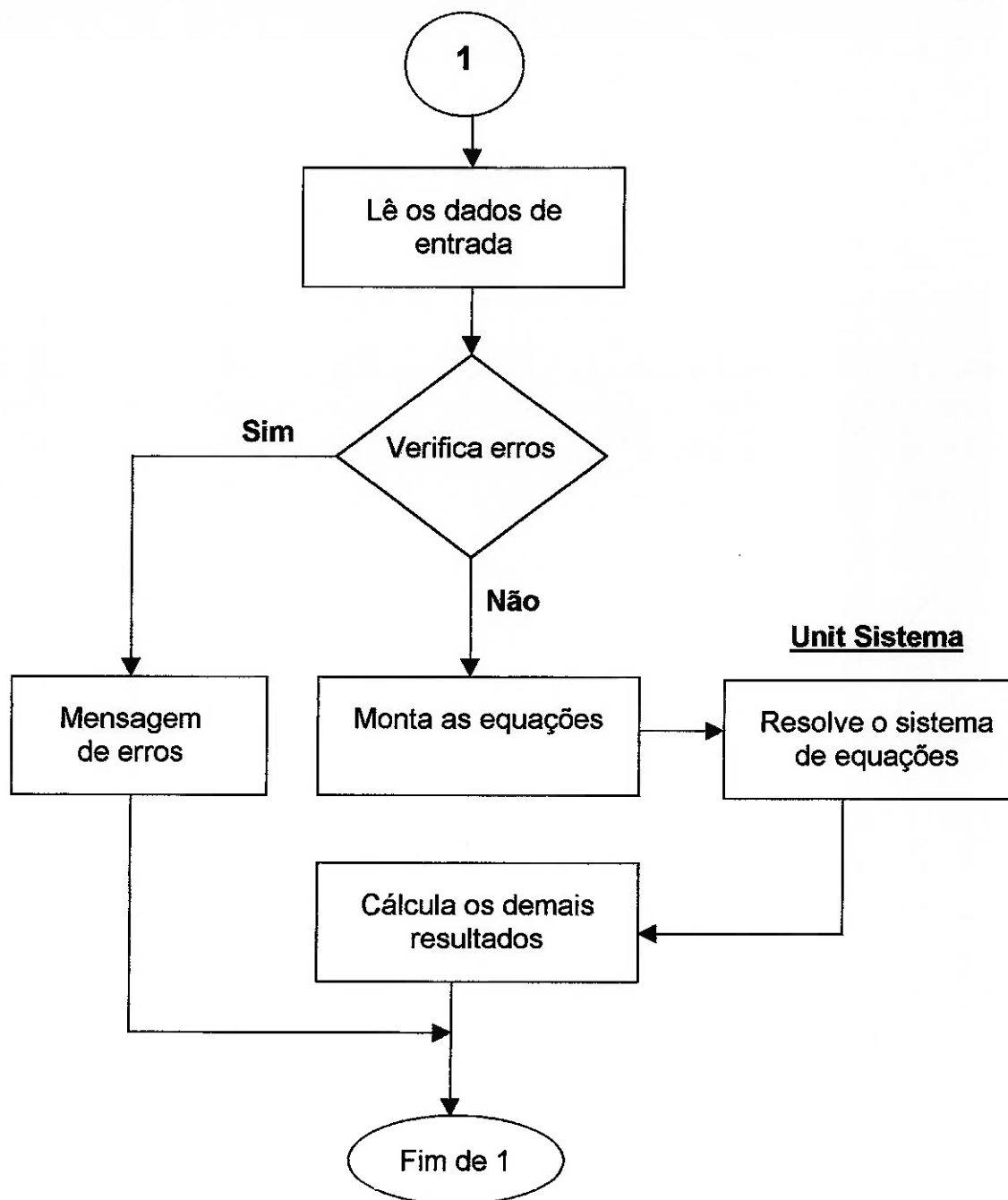


Figura 28 - Projetos dispostos lado a lado

Os esquemas a seguir mostram um pouco sobre o funcionamento do programa.





16. EXEMPLOS

A seguir serão realizados dois exemplos de como procedem-se alguns cálculos relativos ao programa.

16.1 Exemplo 1 – Combustível sólido – Carvão Mineral (Mina de Tubarão)

Composição:

%C = 46,	46 * 12 / total	a = 0.515
%H = 3,	3 * 1 / total	b = 0.403
%N = 1,	1 * 14 / total	d = 0.010
%S = 3,	3 * 32 / total	e = 0.013
%Umi 8,	8 * 18 / total	f = 0.059

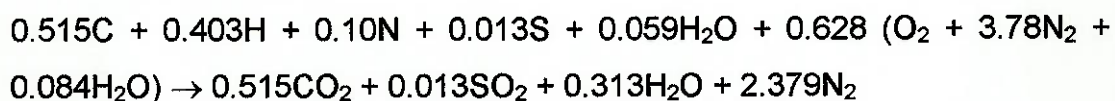
total 7.435

%Cz = 39

A partir dos coeficientes do combustível calcula-se o coeficiente estequiométrico de ar α .

$$\alpha = a + e + b/4 - c/2 = 0.628$$

Equação final:



Elementos	Reagentes	Produtos
C	0.515	0.515
O	0.626	0.627
H	4.758	4.758
N	0.013	0.013
S	1.368	1.369

1. Vazão do oxidante

$$\text{Peso} := (0.515 \cdot m_C + 0.403 \cdot m_H + 0.01 \cdot m_N + 0.013 \cdot m_S + 0.059 \cdot m_{H_2O}) = 13.44;$$

$$\text{VazaoVol} := (1+t+u) \cdot s \cdot 22.41 / \text{peso} = 87.51 / 13.44 = 6.51 \text{ Nm}^3 / \text{kg de comb};$$

$$\text{VazaoMass} := 0.628 \cdot (0.084 \cdot m_{H_2O} + 3.78 \cdot m_{N_2} + m_{O_2}) / \text{peso} = 68.46 / 13.44 = 6.51 \text{ kg} / \text{kg de comb};$$

2. Vazão dos Produtos

$$\text{VazaoVol} := (0.515 + 0.013 + 0.313 + 2.379) \cdot 22.41 / \text{peso} = 72.16 / 13.44 =$$

$$5.37 \text{ Nm}^3 / \text{kg de comb};$$

$$\text{VazaoMass (total)} :=$$

$$(0.515 \cdot m_{CO_2} + 0.313 \cdot m_{H_2O} + 0.13 \cdot m_{SO_2} + 2.379 \cdot m_{N_2}) / \text{peso} + cz = 95.74 / 13.44$$

$$= 7.51 \text{ kg} / \text{kg de comb};$$

3. Temperatura Adiabática de Chama sem dissociação

$$\Delta t = PCI / ((\text{Vazao Mássica dos Gases}) \cdot c_{p\text{médio dos produtos}} + cz \cdot c_p \text{ das cinzas})$$

$$\Delta t = 16496.6 / (7.12 \cdot 1.247 + 0.39 \cdot 1.0) = 1779.6K + 298.15K = 2077.7K$$

16.2 Exemplo 2 – Combustível gasoso – Gás de Coqueria

Composição:

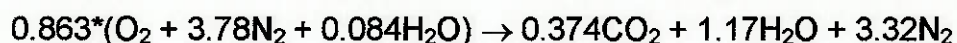
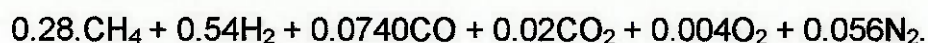
%CH₄ = 46, %H₂ = 54, %CO = 7.4, %CO₂ = 2.0, %O₂ = 0.4, %N₂ = 0.4,
%Umi 5.6,

$$a = 0.374, b = 2.2, c = 0.122, d = 0.112$$

A partir dos coeficientes do combustível calcula-se o coeficiente estequiométrico de ar α .

$$\alpha = a + e + b/4 - c/2 = 0.863$$

Equação final:



Elementos	Reagentes	Produtos
C	0.374	0.374
O	1.92	1.918
H	2.34	2.34
N	6.63	6.64

4. Vazão do oxidante

$$\text{VazaoVol} := (1+t+u)*\alpha = 4.2 \text{ Nm}^3 / \text{Nm}^3 \text{ de comb};$$

$$\begin{aligned}\text{VazaoMass} &:= 0.863*(0.084*m_{\text{H}_2\text{O}}+3.78*m_{\text{N}_2}+m_{\text{O}_2})/22.41 \\ &= 4.71 \text{ kg} / \text{Nm}^3 \text{ de comb};\end{aligned}$$

5. Vazão dos Produtos

$$\text{VazaoVol} := (0.374+1.17+3.32) = 4.86 \text{ Nm}^3 / \text{Nm}^3 \text{ de comb};$$

$$\begin{aligned}\text{VazaoMass (total)} &:= (0.374*m_{\text{CO}_2}+1.17*m_{\text{H}_2\text{O}}+3.32*m_{\text{N}_2})/22.41 = \\ &5.82 \text{ kg} / \text{Nm}^3 \text{ de comb};\end{aligned}$$

6. Temperatura Adiabática de Chama sem dissociação

$$\Delta t = PCI / ((\text{Vazao Mássica dos Gases})*c_{p\text{médio dos produtos}} + c_z*c_{p\text{ das cinzas}})$$

$$\Delta t = 16734.5 / (5.82/0.54*1.288) = 1205\text{K} + 298.15\text{K} = 1503\text{K}$$

17. REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

- [1] – J. C. Jerzy, ***Combustion: a Study in Theory, Fact and Application***, Gordon & Breach Science Publishers, Nova Iorque, 1990.
- [2] – G. Van Wylen, R. Sonntag e C. Borgnakke, ***Fundamentos da Termodinâmica Clássica***, Quarta Edição, Ed. Edgar Blücher Ltda., São Paulo, 1995
- [3] – C. Greco – Térmicas e Fluidos Consultoria Ltda.
- [4] – A. F. Humes, I. Melo, L. K. Yoshida e W. T. Martins, ***Noções de Cálculo Numérico***, , Ed. McGraw Hill Ltda., São Paulo, 1984

18. ANEXO A

Funções do calor específico a pressão constante

Gás	$C_{p0}(T)$ onde $T = T(\text{Kelvin}) / 100$	Intervalo $\Delta T(\text{Kelvin})$	
N ₂	$\bar{c}_{p0} = 39,060 - 512,79 \cdot T^{-1,5} + 1072,7 \cdot T^{-2} - 820,40 \cdot T^{-3}$	300-3500	[2]
O ₂	$\bar{c}_{p0} = 37,432 - 0,020102 \cdot T^{1,5} - 178,570 \cdot T^{-1,5} - 236,88 \cdot T^{-2}$	300-3500	[2]
H ₂	$\bar{c}_{p0} = 56,505 - 702,74 \cdot T^{-0,75} + 1165,0 \cdot T^{-1} - 560,70 \cdot T^{-1,5}$	300-3500	[2]
CO	$\bar{c}_{p0} = 69,145 - 0,70463 \cdot T^{0,75} - 200,77 \cdot T^{-0,5} - 176,76 \cdot T^{-0,75}$	300-3500	[2]
H ₂ O	$\bar{c}_{p0} = 143,05 - 183,54 \cdot T^{-0,25} + 82,751 \cdot T^{-0,5} - 3,6989 \cdot T$	300-3500	[2]
CO ₂	$\bar{c}_{p0} = -3,7357 + 30,529 \cdot T^{0,5} - 4,1034 \cdot T + 0,024198 \cdot T^2$	300-3500	[2]
SO ₂	$\bar{c}_{p0} = 0,11028 + 1,1893E-4 \cdot T + 8,6648E-8 \cdot T^2 - 1,8049E-10 \cdot T^3$ $+ 6,78729E-14 \cdot T^4$	253-1473	[3]
CH ₄	$\bar{c}_{p0} = -672,87 + 439,74 \cdot T^{0,25} - 24,875 \cdot T^{0,75} - 323,88 \cdot T^{-0,5}$	300-2000	[2]
C ₂ H ₂	$\bar{c}_{p0} = -0,0226 + 1,9657E-3 \cdot T - 2,8938E-6 \cdot T^2 + 2,0389E-9 \cdot T^3$ $- 5,2732E-13 \cdot T^4$	253-1473	[3]
C ₂ H ₄	$\bar{c}_{p0} = 6,895 + 17,26 \cdot T + 0,6402 \cdot T^2 + 0,000728 \cdot T^3$	300-2000	[2]
C ₃ H ₆	$\bar{c}_{p0} = 0,1450 + 6,1576E-4 \cdot T + 7,4078E-7 \cdot T^2 - 1,0507E-9 \cdot T^3$ $+ 3,4990E-13 \cdot T^4$	253-1473	[3]
C ₃ H ₈	$\bar{c}_{p0} = -4,042 + 30,46 \cdot T - 1,571 \cdot T^2 + 0,03171 \cdot T^3$	300-1500	[2]
C ₄ H ₁₀	$\bar{c}_{p0} = 3,954 + 37,12 \cdot T - 1,833 \cdot T^2 + 0,03498 \cdot T^3$	300-1500	[2]
C ₅ H ₁₂	$\bar{c}_{p0} = 0,0028 + 1,5847E-3 \cdot T - 8,3887E-7 \cdot T^2 + 1,9077E-10 \cdot T^3$ $- 1,035E-14 \cdot T^4$	253-1473	[3]
H ₂ S	$\bar{c}_{p0} = 0,2386 - 8,8065E-5 \cdot T + 3,399E-7 \cdot T^2 - 3,0361E-10 \cdot T^3$ $+ 7,6044E-14 \cdot T^4$	253-1473	[3]

- Fonte Bibliográfica.

19. ANEXO B

Constantes de equilibrio K [2]

	$K_{CO_2}(T)$	$K_{H_2O}(T)$
Temperatura (K)	Ln(K)	Ln(K)
298	-207.529	-184.420
500	-115.234	-105.385
1000	-47.052	-46.321
1200	-35.736	-36.363
1400	-27.679	-29.222
1600	-21.656	-23.849
1800	-16.987	-19.658
2000	-13.266	-16.299
2200	-10.232	-13.546
2400	-7.715	-11.249
2600	-5.594	-9.303
2800	-3.781	-7.633
3000	-2.217	-6.184
3200	-0.853	-4.916
3400	0.346	-3.795
3600	1.408	-2.799
3800	2.355	-1.906
4000	3.204	-1.101
4500	4.985	0.602
5000	6.397	1.972
5500	7.542	3.098
6000	8.488	4.040

Cálculo: **Estequiometria**

Projeto: **Estequiometria_1.cge**

Data : 17/12/99

Entradas

Banco de Dados: sólido

Combustível: Carvão vegetal

Composição do Combustível (base mássica úmida)

%C = 88,20

%H = 1,96

%O = 2,94

%N = 0,20

% Cinzas (BU) = 4,70

% Umidade (BU) = 2,00

PCS (kJ/kg) = 33048,5

PCI (kJ/kg) = 32571,8

Pressão: 101,325 kPa

Temperaturas:

Oxidante: 298,15 K

Combustível: 298,15 K

Oxidante Pré-Aquecido: 100,0 %

Trocas Térmicas: 0,0 %

Umidade Absoluta do Ar Atmosférico: 0,011 massa vap./massa ar seco

Gases de Outros Processos

0,00 mCO₂/mcb

0,00 mH₂O/mcb

Oxidante: ar atmosférico

Resultados

Dados na temperatura de medição/saída (298,15K)

Vazões

Volume do oxidante: 8,44 Nm³/kg de comb

Massa do oxidante: 10,79 kg/kg de comb

Volume dos produtos: 8,59 Nm³/kg de comb

Volume dos produtos: 9,38 m³/kg de comb

Massa total produtos: 11,79 kg/kg de comb

Massa de gases: 11,74 kg/kg de comb

Análise dos Produtos (molar)

	gases secos	gases úmidos
%CO ₂	20,06	19,16
%H ₂ O	-	4,53
%N ₂	79,94	76,32

Coeficiente de ar: 1,00

Temperatura adiabática de chama

com dissociação: 2344,8 K

sem dissociação: 2504,6 K

Temperatura dos produtos

com dissociação: 2344,8 K

sem dissociação: 2504,6 K

Temperatura de orvalho: 304,5 K

Equação da Reação

0,765 C + 0,203 H + 0,019 O + 0,001 N + 0,012 H₂O + 0,806 (O₂ + 3,780 N₂ + 0,084 H₂O) =

0,765 CO₂ + 0,181 H₂O + 3,048 N₂

Cálculo: Estequiometria

Projeto: Estequiometria_1.cge

Data : 17/12/99

Entradas

Banco de Dados: gás

Combustível: Gás de Nafta

Composição do Combustível (base molar úmida)

%CH₄ = 32,80

%H₂ = 43,20

%CO = 2,50

%CO₂ = 20,90

% Cinzas (BU) = 0

% Umidade (BU) (molar) = 0

PCS (kJ/kg) = 26878,0

PCS (kJ/Nm³) = 19340,0

PCI (kJ/kg) = 23891,5

Pressão: 101,325 kPa

Temperaturas:

Oxidante: 298,15 K

Combustível: 298,15 K

Oxidante Pré-Aquecido: 100,0 %

Trocas Térmicas: 0,0 %

Umidade Absoluta do Ar Atmosférico: 0,011 massa vap./massa ar seco

Gases de Outros Processos

0,00 mCO₂/mcb

0,00 mH₂O/mcb

Oxidante: ar atmosférico

Resultados

Dados na temperatura de medição/saída (298,15K)

Vazões

Volume do oxidante: 4,33 Nm³/Nm³ de comb

Massa do oxidante: 5,54 kg/Nm³ de comb

Volume dos produtos: 5,10 Nm³/Nm³ de comb

Volume dos produtos: 5,57 m³/Nm³ de comb

Massa total produtos: 6,26 kg/Nm³ de comb

Análise dos Produtos (molar)

	gases secos	gases úmidos
%CO ₂	14,39	11,09
%H ₂ O	-	22,94
%N ₂	85,61	65,97

Coeficiente de ar: 1,00

Temperatura adiabática de chama

com dissociação: 2203,0 K

sem dissociação: 2276,7 K

Temperatura dos produtos

com dissociação: 2203,0 K

sem dissociação: 2276,7 K

Temperatura de orvalho: 336,5 K

Propriedades

Massa molar do comb.: 16,13 kg/kmol

Cp do combustível: 2,041 kJ/kg K

Densidade do comb.: 0,720 kg/Nm³

Massa molar dos produtos: 27,49 kg/kmol
 Cp dos produtos: 1,130 kJ/kg K
 Cp médio dos produtos: 1,130 kJ/kg K
 Densidade dos produtos: 1,124 kg/m³
 Perdas por escape: 0,00 %
 H formação prod.(ref.25°C): -1286,9 kJ/kg
 H sensível dos produtos : 0,0 kJ/kg
 H total dos produtos : -1286,9 kJ/kg
 H total dos produtos : -1578,5 kJ/Nm³

Equação da Reação

$0,435 \text{ H}_2 + 0,210 \text{ CO}_2 + 0,025 \text{ CO} + 0,330 \text{ CH}_4 + 0,890 (\text{O}_2 + 3,780 \text{ N}_2 + 0,084 \text{ H}_2\text{O}) =$
 $0,565 \text{ CO}_2 + 1,169 \text{ H}_2\text{O} + 3,364 \text{ N}_2$

Classe do combustível: líquido
(Composição do combustível em base mássica úmida)

Data : 17/12/99

	%C	%H	%O	%N	%S	%Cz	%Umidade	Cp (kJ/kg K)	PCI (kJ/kg)
Querosene	86,00	13,90	0,00	0,00	0,10	0,00	0,00	1,000	42970,1
Metanol	37,50	12,50	50,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,000	19959,7
Etanol	52,10	13,10	34,80	0,00	0,00	0,00	0,00	1,000	26831,9
Óleo diesel	85,80	13,50	0,00	0,00	0,70	0,00	0,00	1,700	42387,7
Óleo combustível 1A	86,50	10,70	0,00	0,00	2,70	0,10	0,00	1,900	39784,0
Óleo combustível 7A	86,40	10,50	0,00	0,00	3,00	0,10	0,00	1,900	39484,4
Óleo combustível 1B	88,00	11,00	0,00	0,00	0,90	0,10	0,00	1,900	40622,7
Alcatrão	52,00	6,50	41,00	0,50	0,00	0,00	0,00	1,000	21604,2
Enxofre	0,00	0,00	0,00	0,00	100,00	0,00	0,00	0,989	9265,7