

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE PRODUÇÃO E MECÂNICA  
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**Janderson Honório Mazzine Afonso**  
**João Pedro Dutra Ferreira**  
**José Vitor Maia Monteiro**

**AVALIAÇÃO 1 DE FUNDAMENTOS DE COMBUSTÃO**  
**Simulação Numérica: Resultados, Discussões e Conclusões**  
**Propano e Butanol**

Juiz de Fora

2019/3

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Temperatura de chama adiabática em função da razão de equivalência, para o Propano ( $C_3H_8$ ) . . . . .	3
Figura 2 – Frações molares de $CO$ , para o Propano ( $C_3H_8$ ) . . . . .	4
Figura 3 – Frações molares de $CO_2$ , para o Propano ( $C_3H_8$ ) . . . . .	5
Figura 4 – Frações molares de $NO$ , para o Propano ( $C_3H_8$ ) . . . . .	6
Figura 5 – Frações molares de $NO_2$ , para o Propano ( $C_3H_8$ ) . . . . .	7
Figura 6 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 300 K, Propano ( $C_3H_8$ ) . . . . .	8
Figura 7 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 400 K, Propano ( $C_3H_8$ ) . . . . .	9
Figura 8 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 500 K, Propano ( $C_3H_8$ ) . . . . .	10
Figura 9 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 600 K, Propano ( $C_3H_8$ ) . . . . .	11
Figura 10 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 700 K, Propano ( $C_3H_8$ ) . . . . .	12
Figura 11 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 800 K, Propano ( $C_3H_8$ ) . . . . .	13
Figura 12 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 900 K, Propano ( $C_3H_8$ ) . . . . .	14
Figura 13 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 1000 K, Propano ( $C_3H_8$ ) . . . . .	15
Figura 14 – Temperatura de chama adiabática em função da razão de equivalência, para o Butanol ( $C_4H_9OH$ ) . . . . .	16
Figura 15 – Frações molares de $CO$ , para o Butanol ( $C_4H_9OH$ ) . . . . .	17
Figura 16 – Frações molares de $CO_2$ , para o Butanol ( $C_4H_9OH$ ) . . . . .	18
Figura 17 – Frações molares de $NO$ , para o Butanol ( $C_4H_9OH$ ) . . . . .	19
Figura 18 – Frações molares de $NO_2$ , para o Butanol ( $C_4H_9OH$ ) . . . . .	20
Figura 19 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 300 K, Butanol ( $C_4H_9OH$ ) . . . . .	21
Figura 20 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 400 K, Butanol ( $C_4H_9OH$ ) . . . . .	22
Figura 21 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 500 K, Butanol ( $C_4H_9OH$ ) . . . . .	23
Figura 22 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 600 K, Butanol ( $C_4H_9OH$ ) . . . . .	24
Figura 23 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 700 K, Butanol ( $C_4H_9OH$ ) . . . . .	25

Figura 24 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 800 K, Butanol ( $C_4H_9OH$ ) . . . . .	26
Figura 25 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 900 K, Butanol ( $C_4H_9OH$ ) . . . . .	27
Figura 26 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 1000 K, Butanol ( $C_4H_9OH$ ) . . . . .	28
Figura 27 – Frações molares de $CO_2$ , para o Propano a partir do mecanismo completo.	30

## 1 Resultados Propano

Ao simular o combustível Propano, inicialmente verificou-se que o mesmo encontrava-se no modelo padrão do Cantera, a "gri30". Em seguida, baixou-se o modelo de mistura multifásica "adiabatic.py" disponível no site do Cantera na página "Exemplos Python".

Após algumas alterações para plotar os gráficos necessários, os resultados obtidos foram os seguintes:

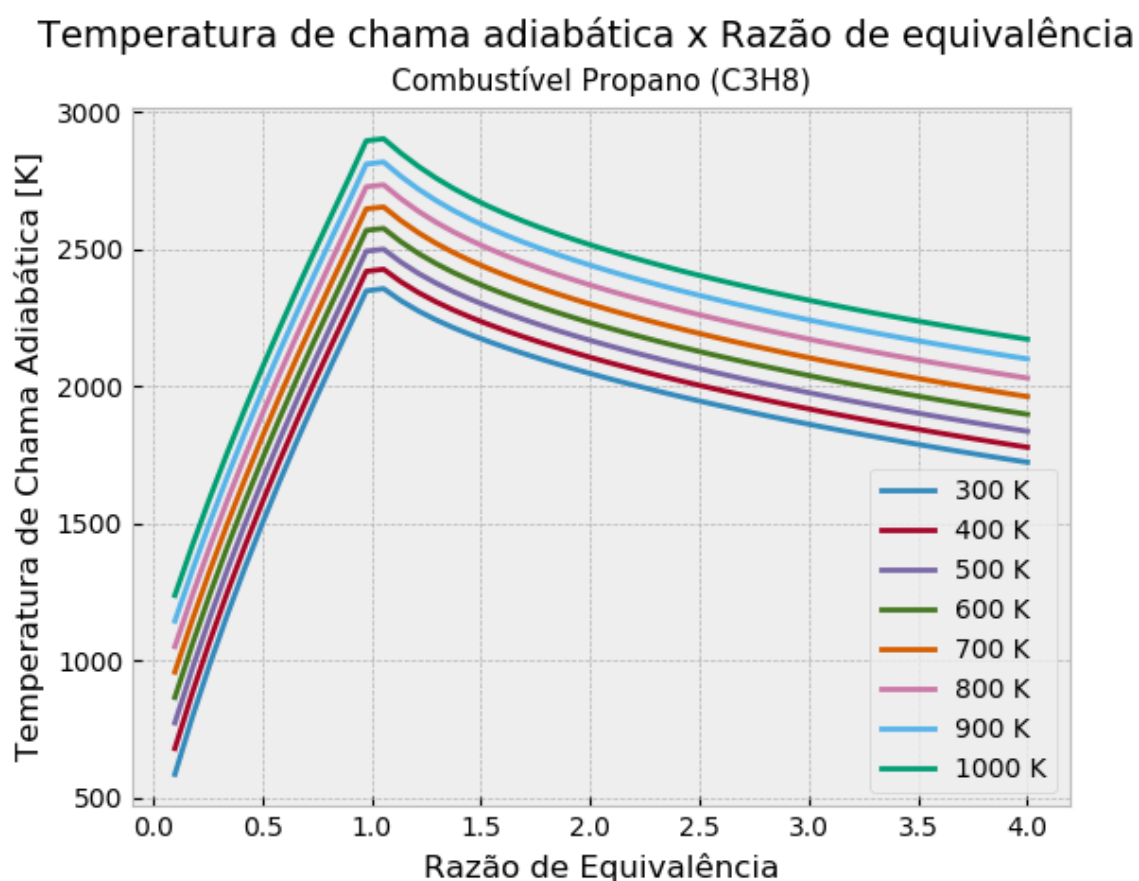


Figura 1 – Temperatura de chama adiabática em função da razão de equivalência, para o Propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>)

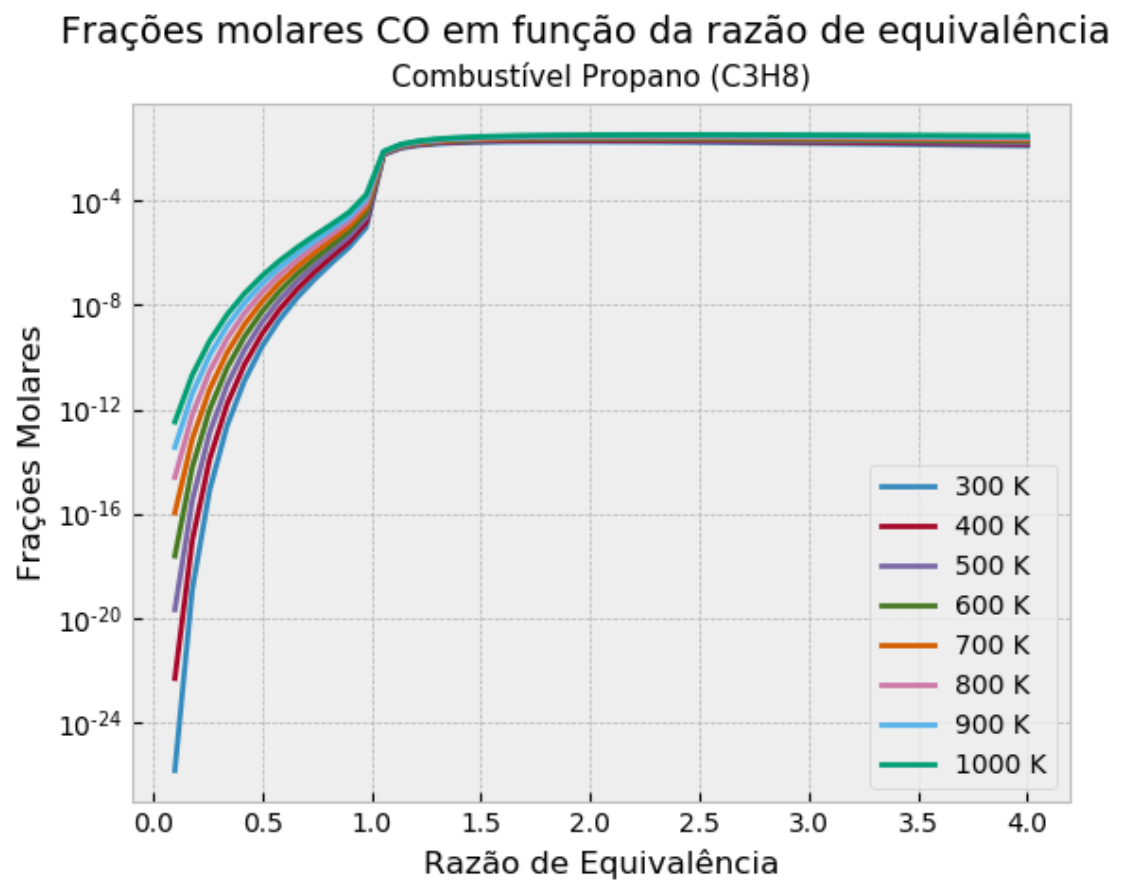


Figura 2 – Frações molares de  $CO$ , para o Propano ( $C_3H_8$ )

Frações molares  $CO_2$  em função da razão de equivalência  
Combustível Propano ( $C_3H_8$ )

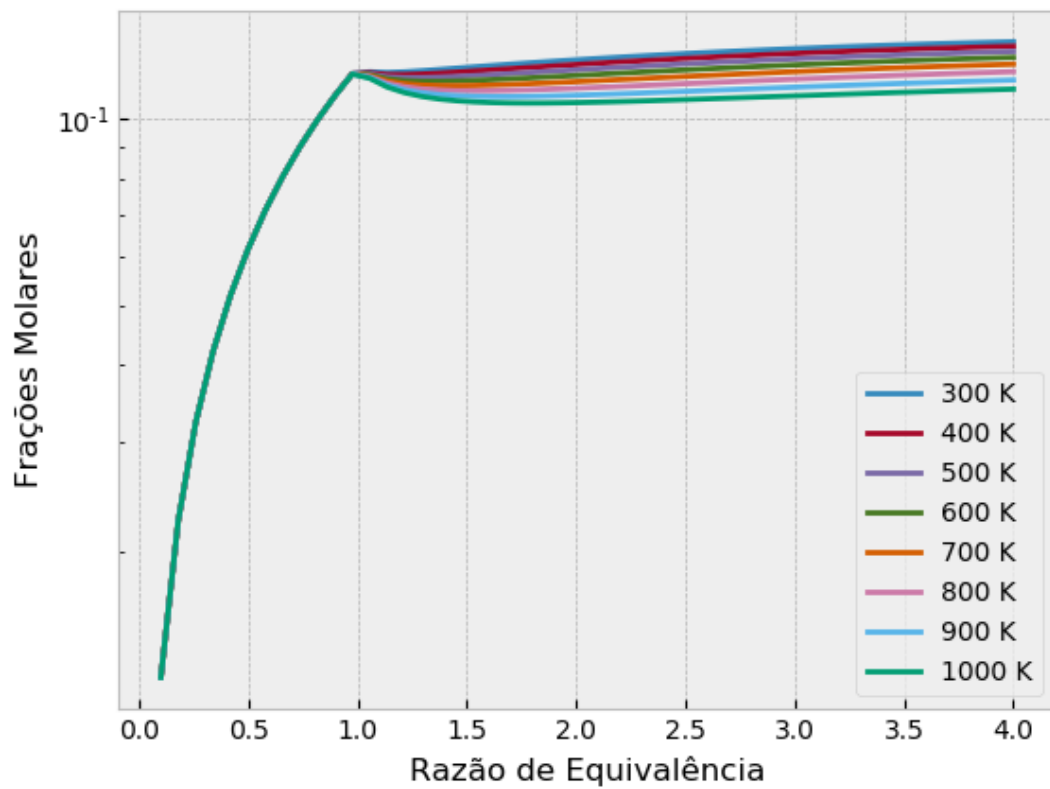


Figura 3 – Frações molares de  $CO_2$ , para o Propano ( $C_3H_8$ )

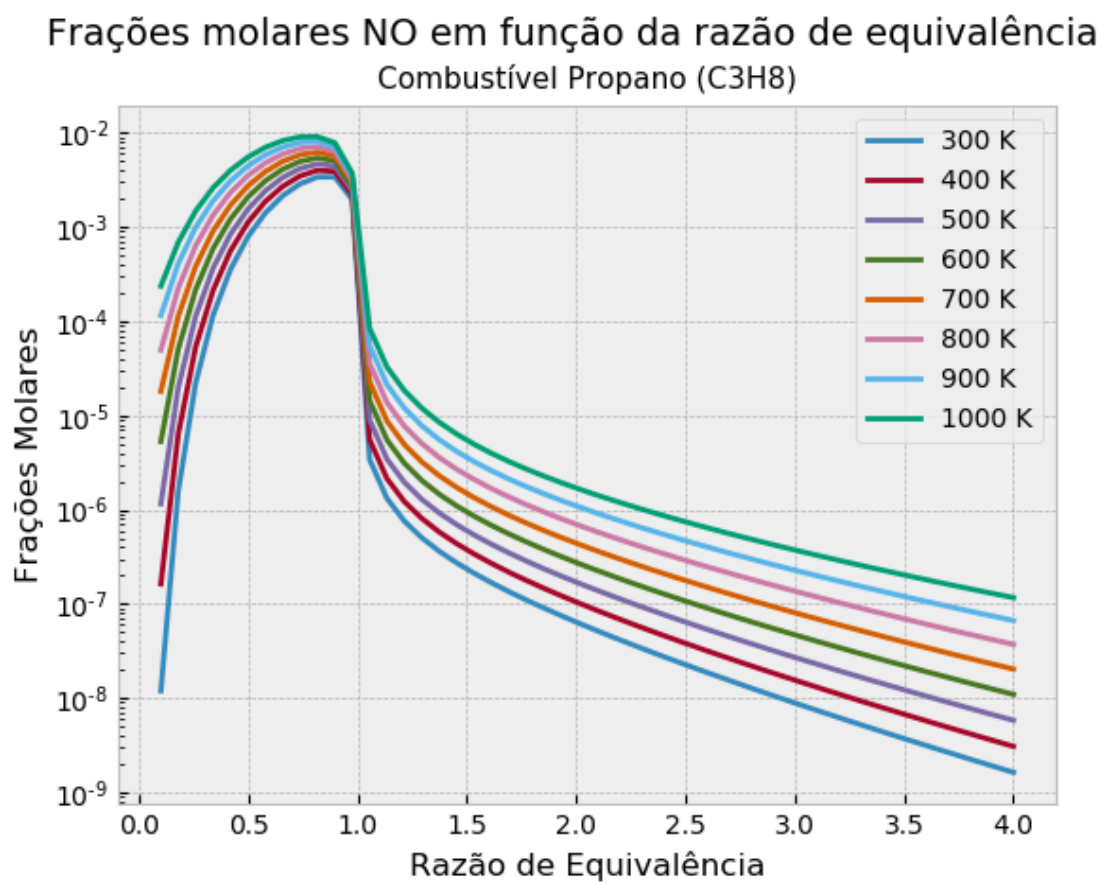


Figura 4 – Frações molares de  $NO$ , para o Propano ( $C_3H_8$ )

Frações molares  $\text{NO}_2$  em função da razão de equivalência  
Combustível Propano ( $\text{C}_3\text{H}_8$ )

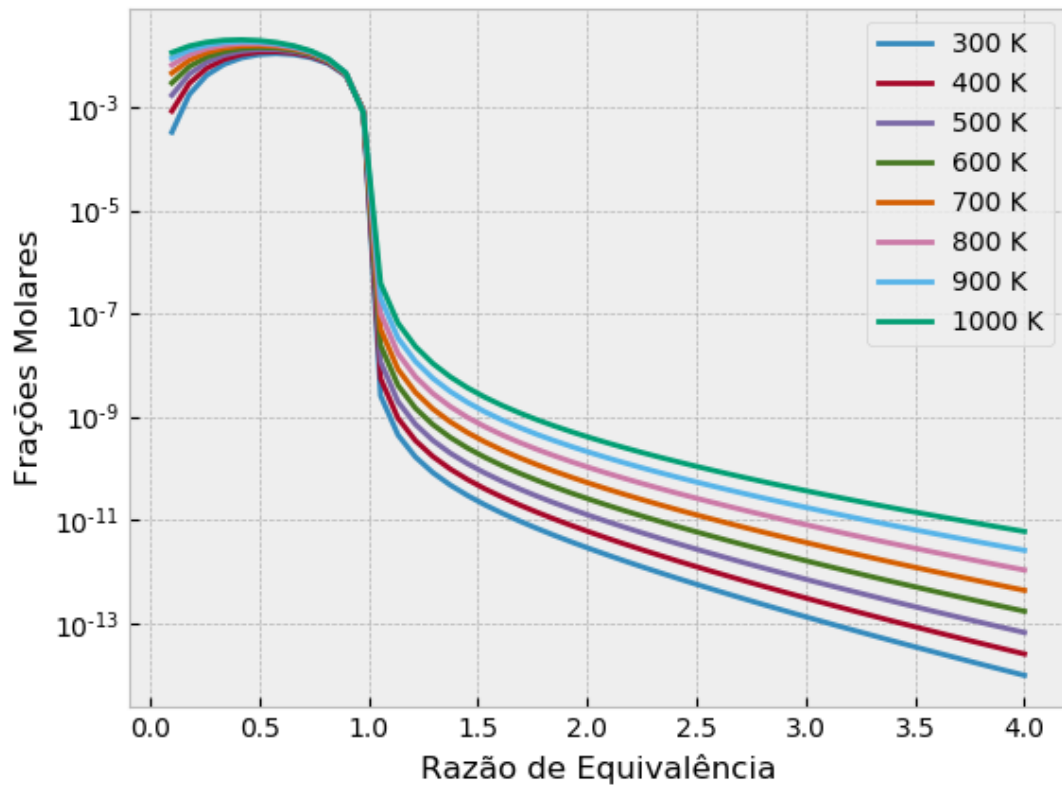


Figura 5 – Frações molares de  $\text{NO}_2$ , para o Propano ( $\text{C}_3\text{H}_8$ )



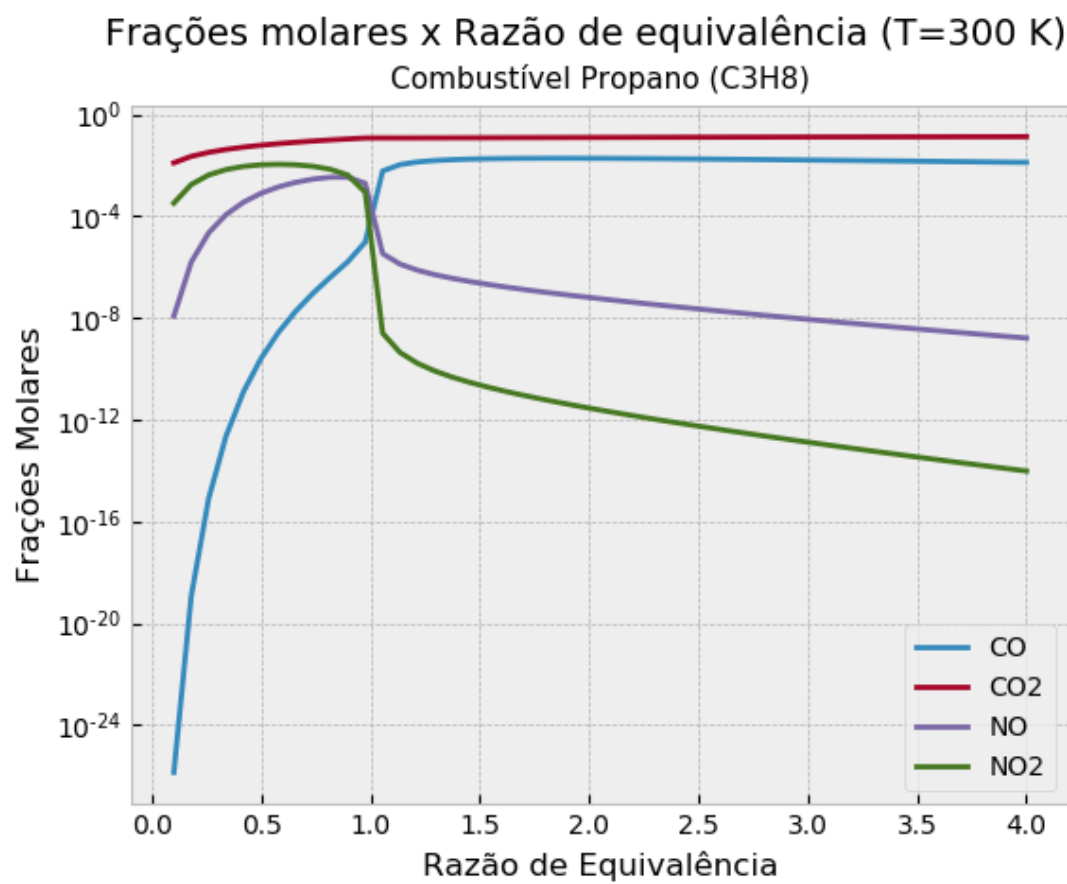


Figura 6 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 300 K, Propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>)

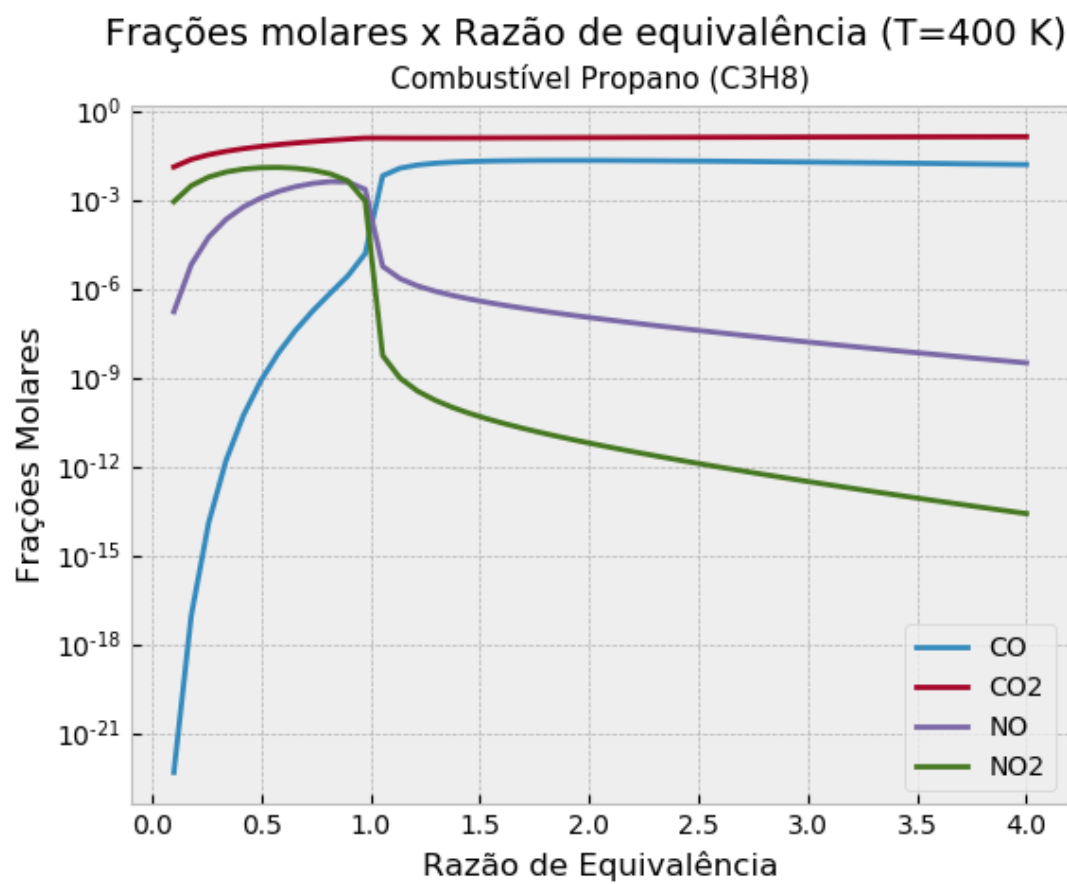


Figura 7 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 400 K, Propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>)

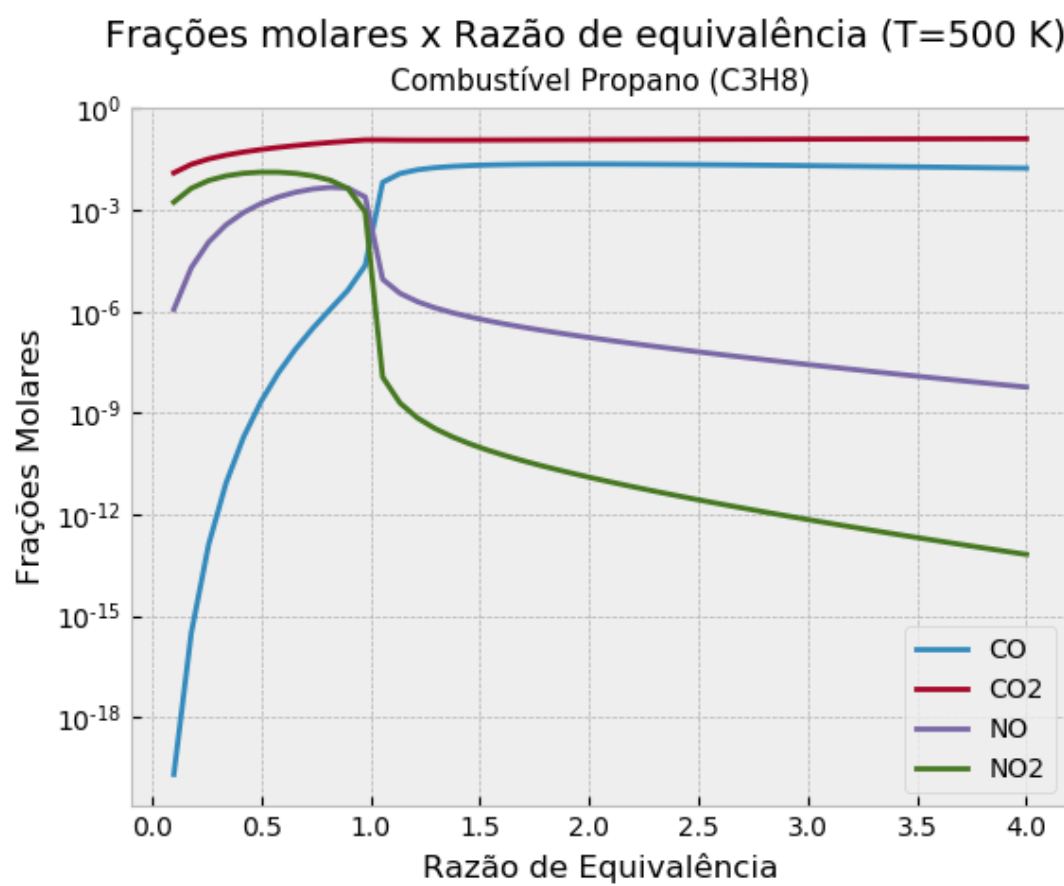


Figura 8 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 500 K, Propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>)

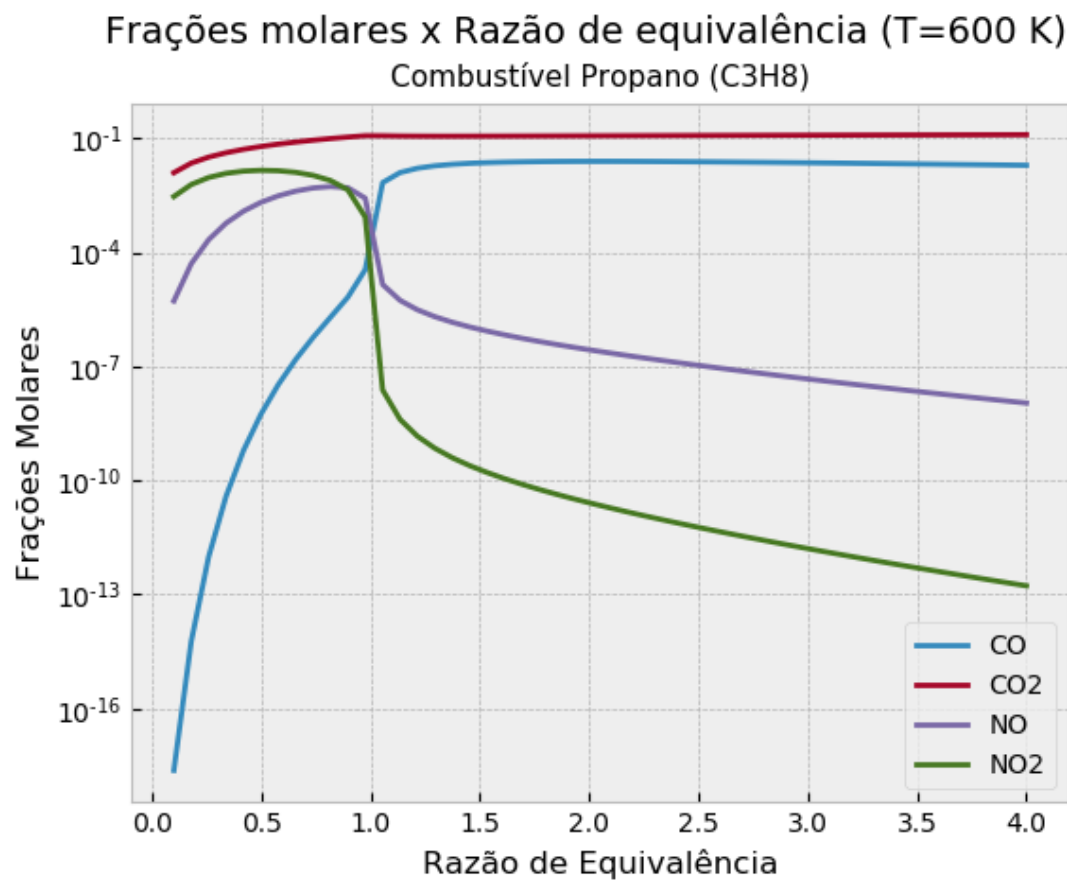


Figura 9 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 600 K, Propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>)

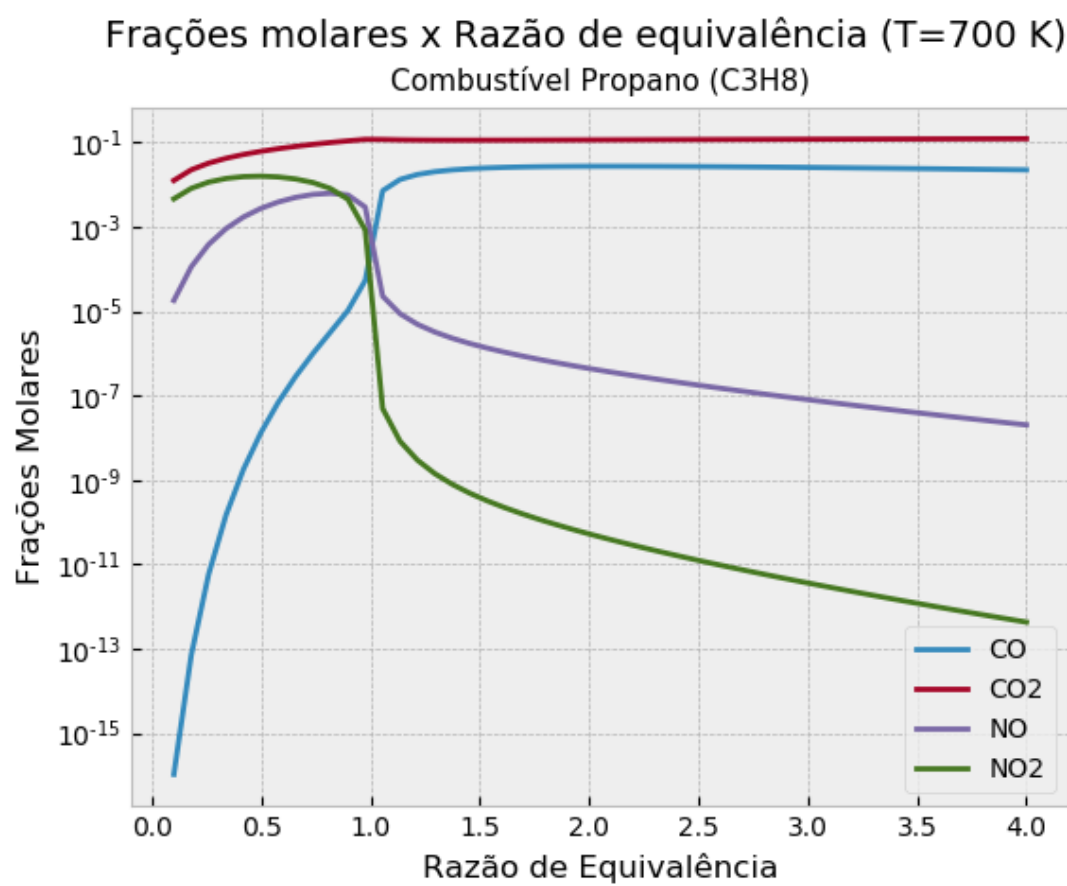


Figura 10 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 700 K, Propano ( $C_3H_8$ )

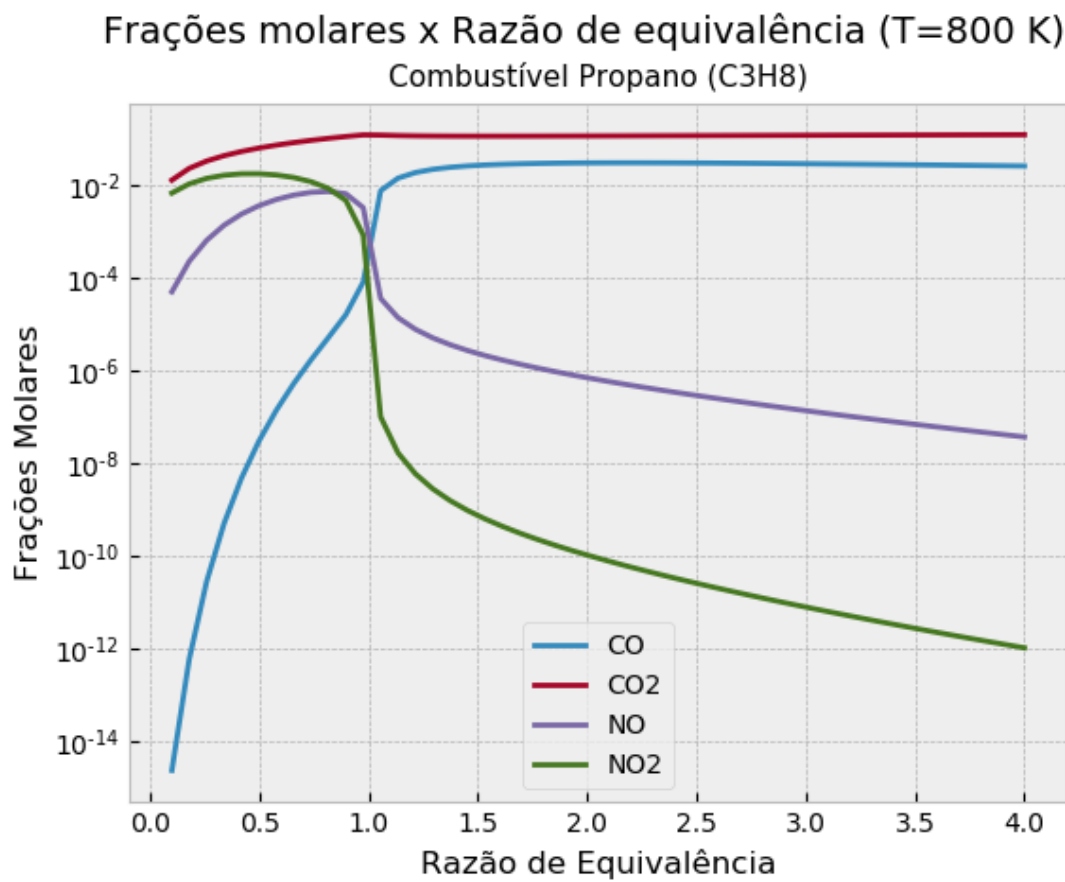


Figura 11 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 800 K, Propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>)

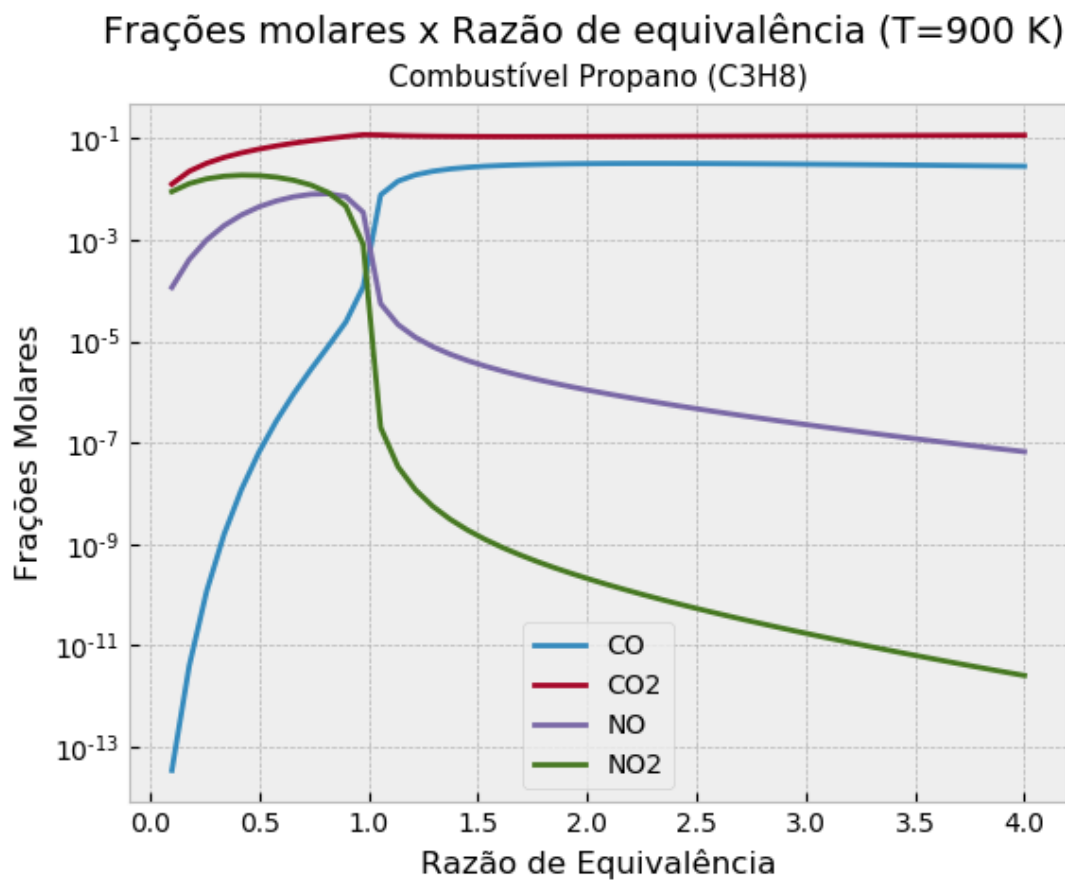


Figura 12 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 900 K, Propano ( $C_3H_8$ )

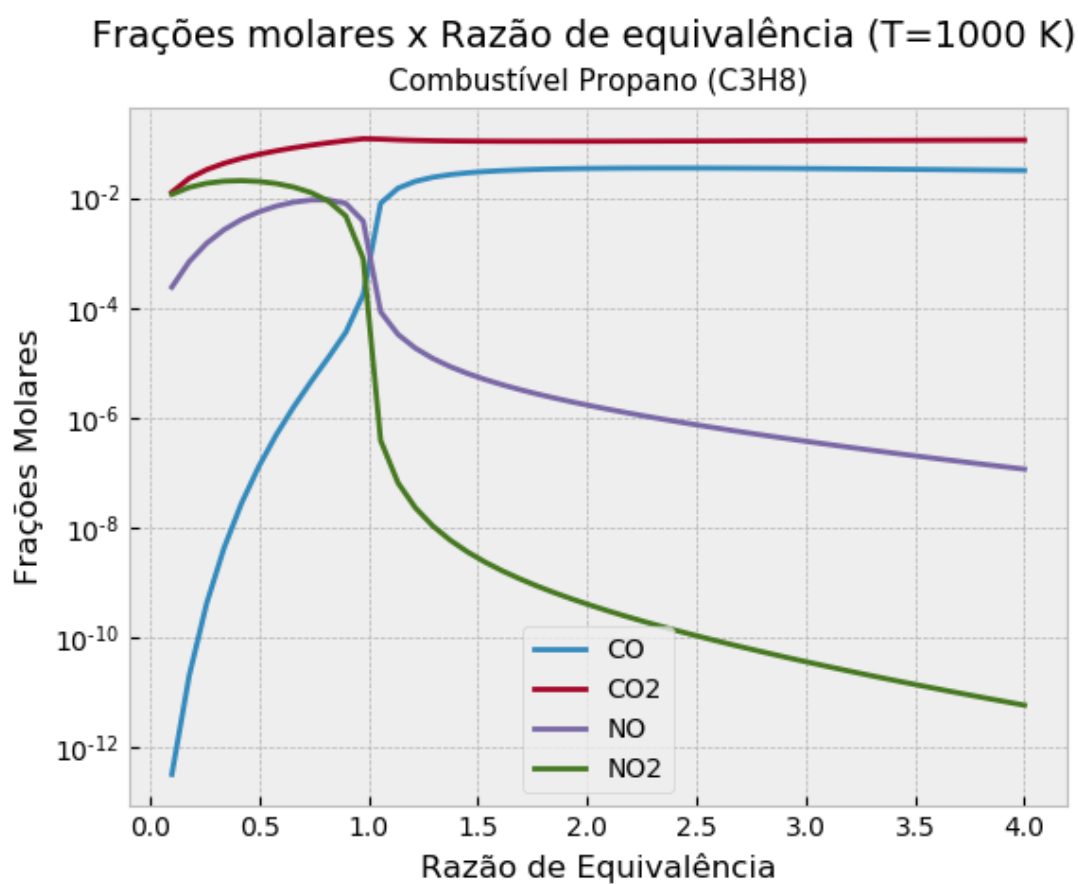


Figura 13 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 1000 K, Propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>)



## 2 Resultados Butanol

A fim de simular o combustível Butanol, foi necessário baixar e converter um arquivo de modelo do site Creck Modeling, pois o combustível em questão não está contemplado dentre os arquivos de modelo padrão do software Cantera. O modelo escolhido foi o modelo completo, que possui 484 espécies e 19341 reações. Neste modelo, existem variantes do Butanol, como o isobutanol, n-butanol e t-butanol. Escolheu-se então a utilização do isobutanol, pois as demais espécies se referem a aplicações específicas.

Durante as primeiras tentativas de compilação, o modelo não convergia, independente do numero de iterações indicadas no código. Consultando a documentação, optou-se por alterar o solver de "gibbs" para "auto". Nesse solver "auto", caso os valores não converjam ele automaticamente troca o solver utilizado. Após esta alteração o modelo convergiu e gerou os seguintes gráficos:

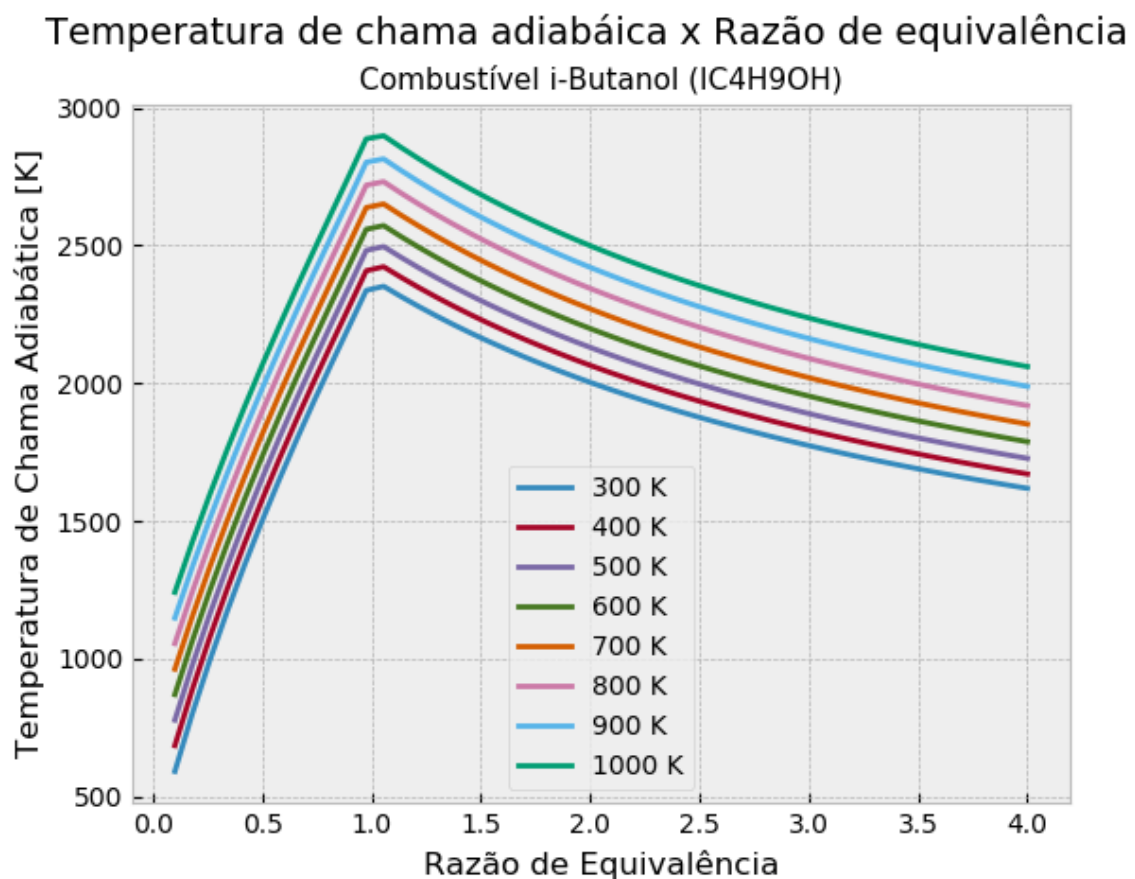


Figura 14 – Temperatura de chama adiabática em função da razão de equivalência, para o Butanol (C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>OH)

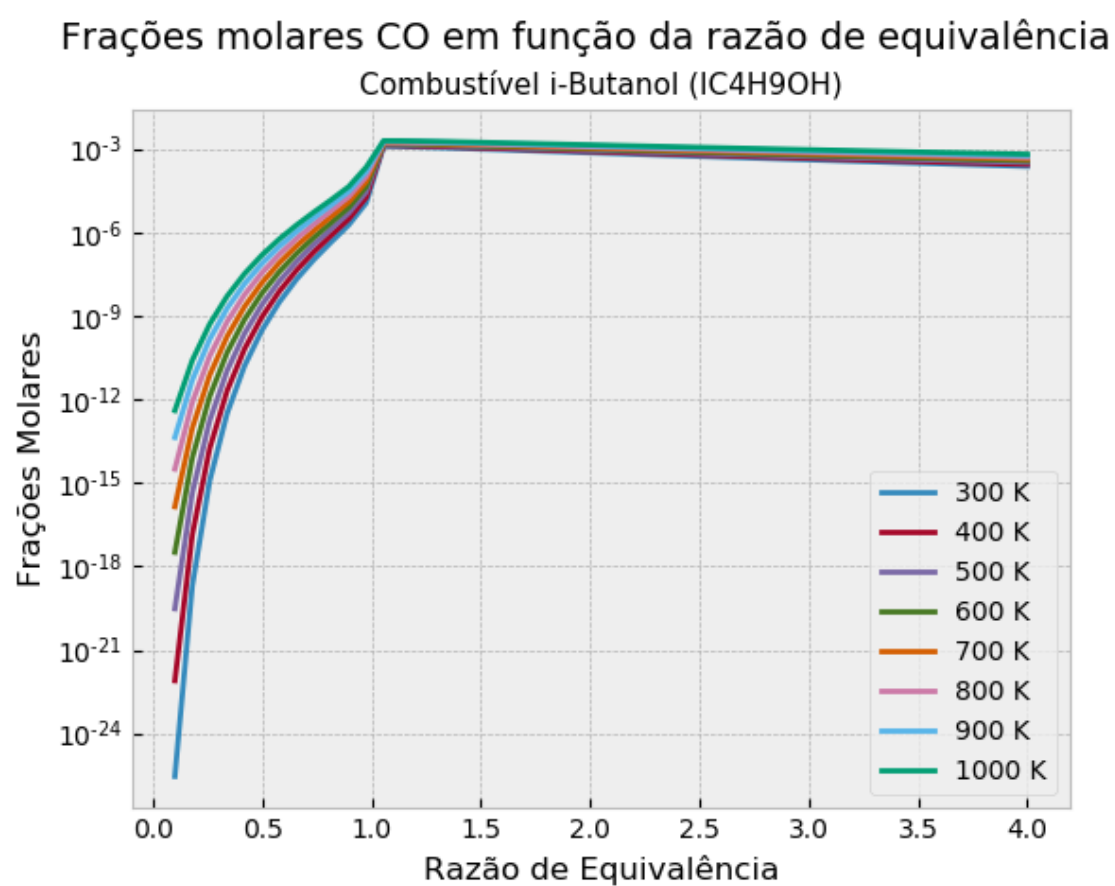


Figura 15 – Frações molares de  $\text{CO}$ , para o Butanol ( $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$ )

Frações molares  $\text{CO}_2$  em função da razão de equivalência  
Combustível i-Butanol ( $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$ )

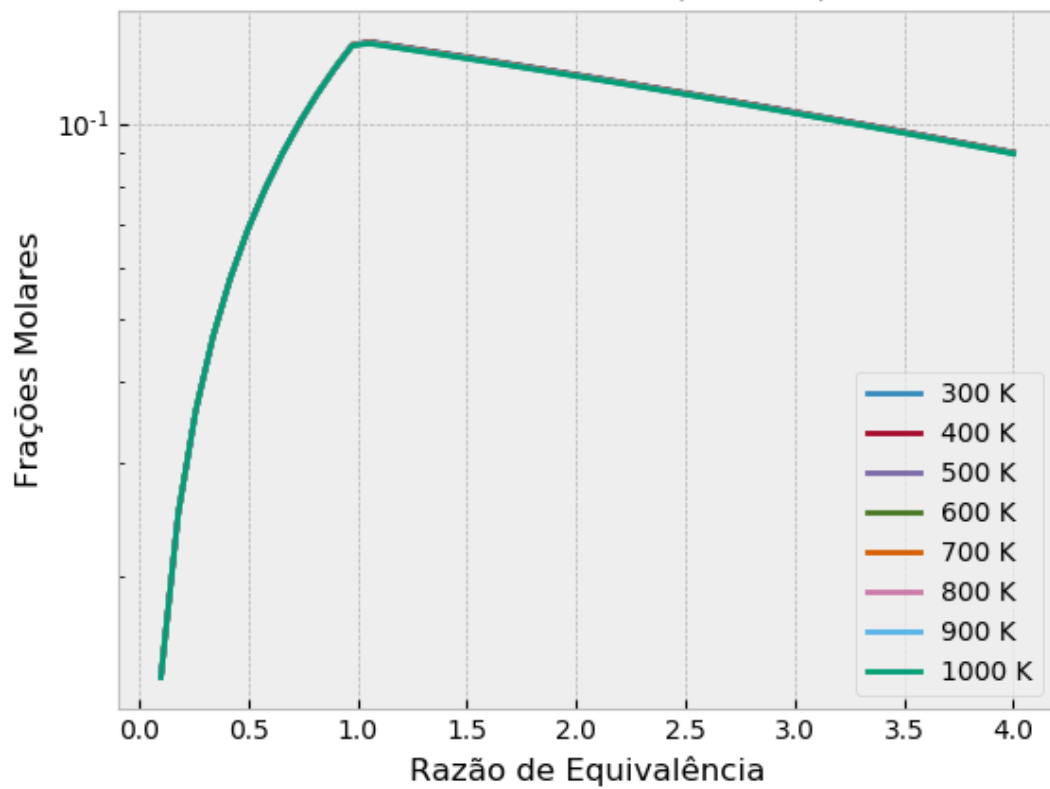


Figura 16 – Frações molares de  $\text{CO}_2$ , para o Butanol ( $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$ )

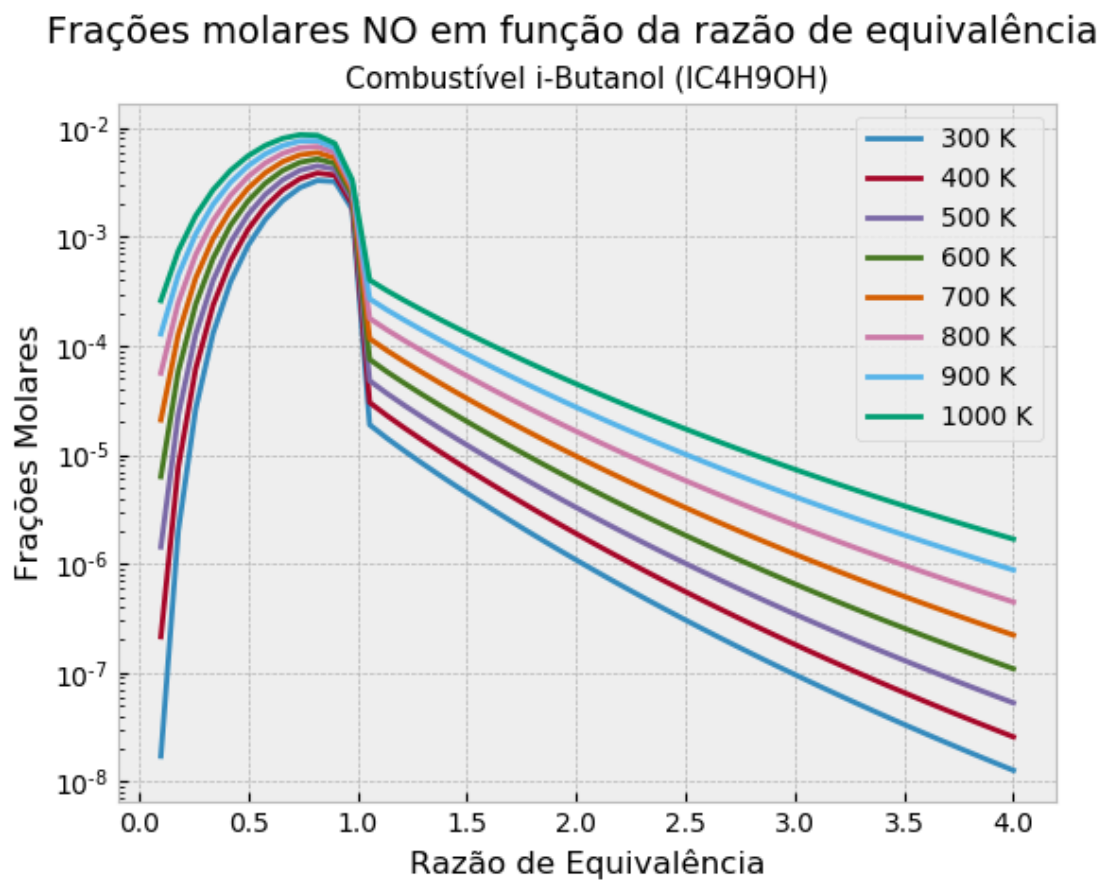


Figura 17 – Frações molares de  $\text{NO}$ , para o Butanol ( $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$ )

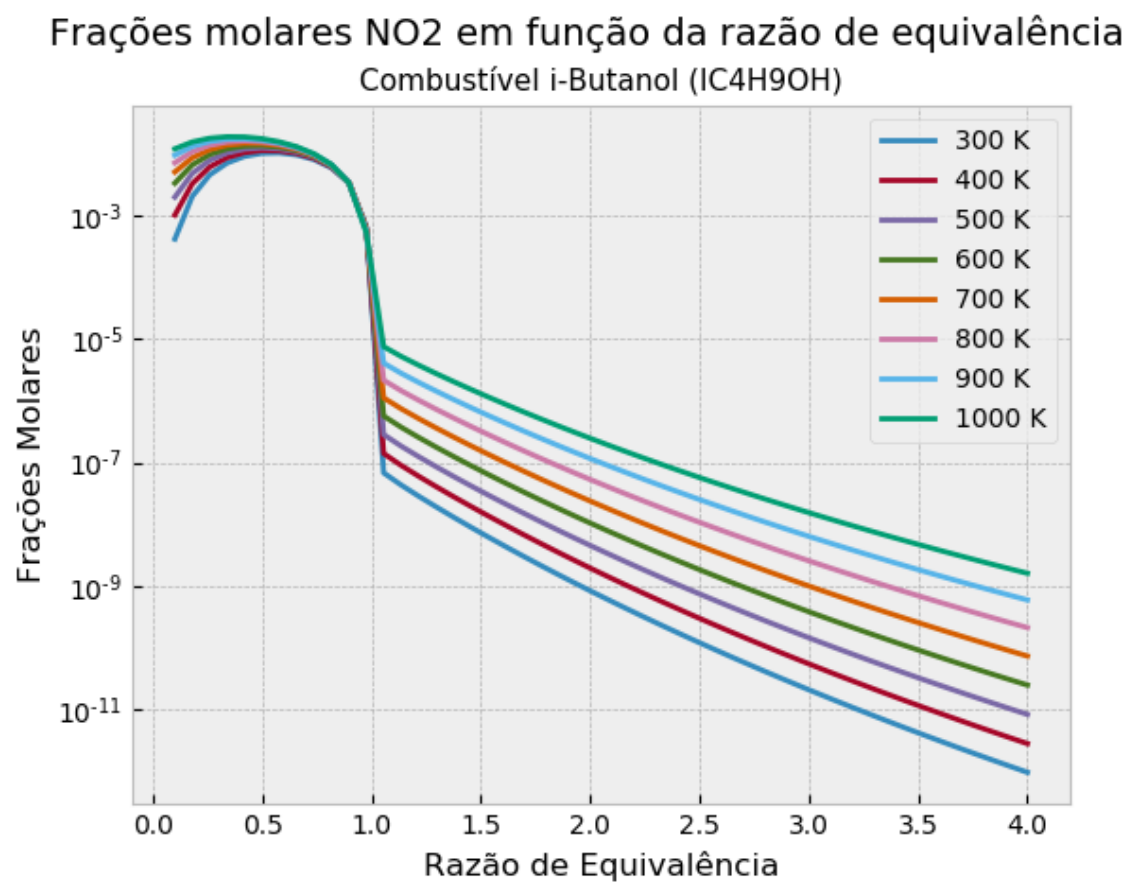


Figura 18 – Frações molares de  $\text{NO}_2$ , para o Butanol ( $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$ )

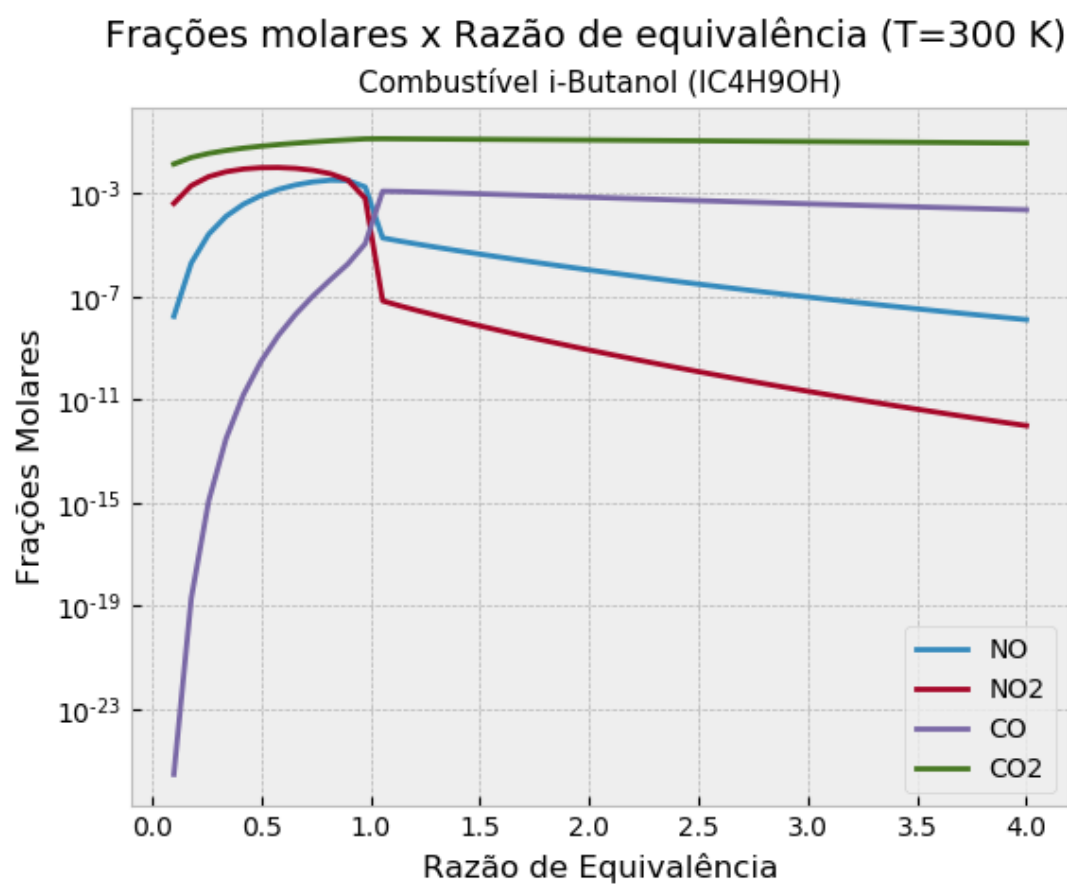


Figura 19 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 300 K, Butanol ( $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$ )

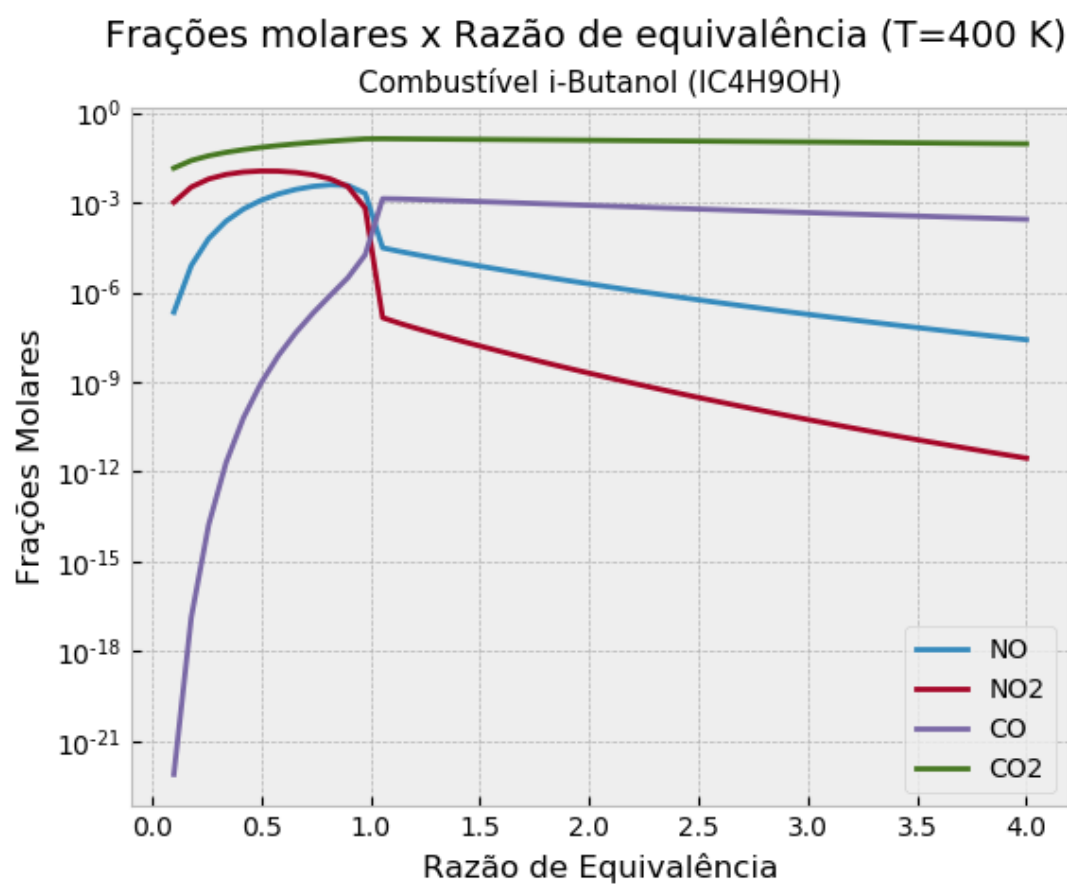


Figura 20 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 400 K, Butanol (C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>OH)

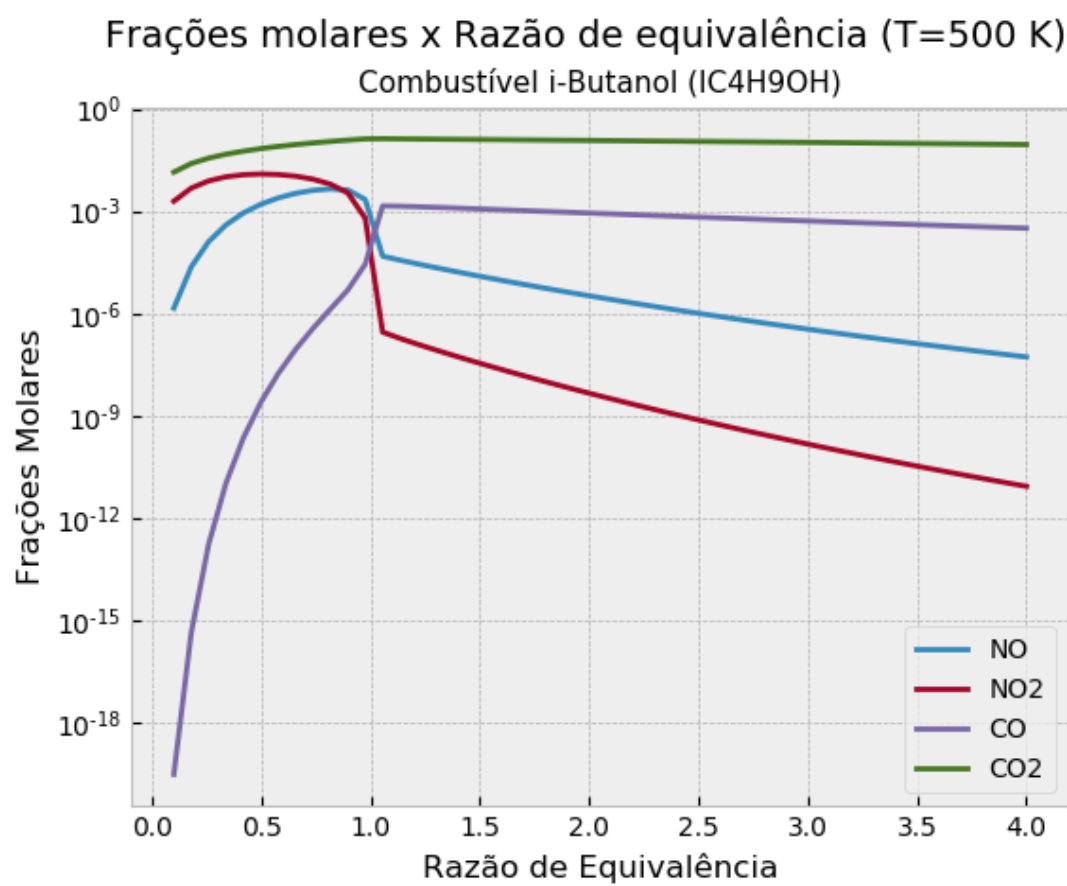


Figura 21 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 500 K, Butanol (C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>OH)



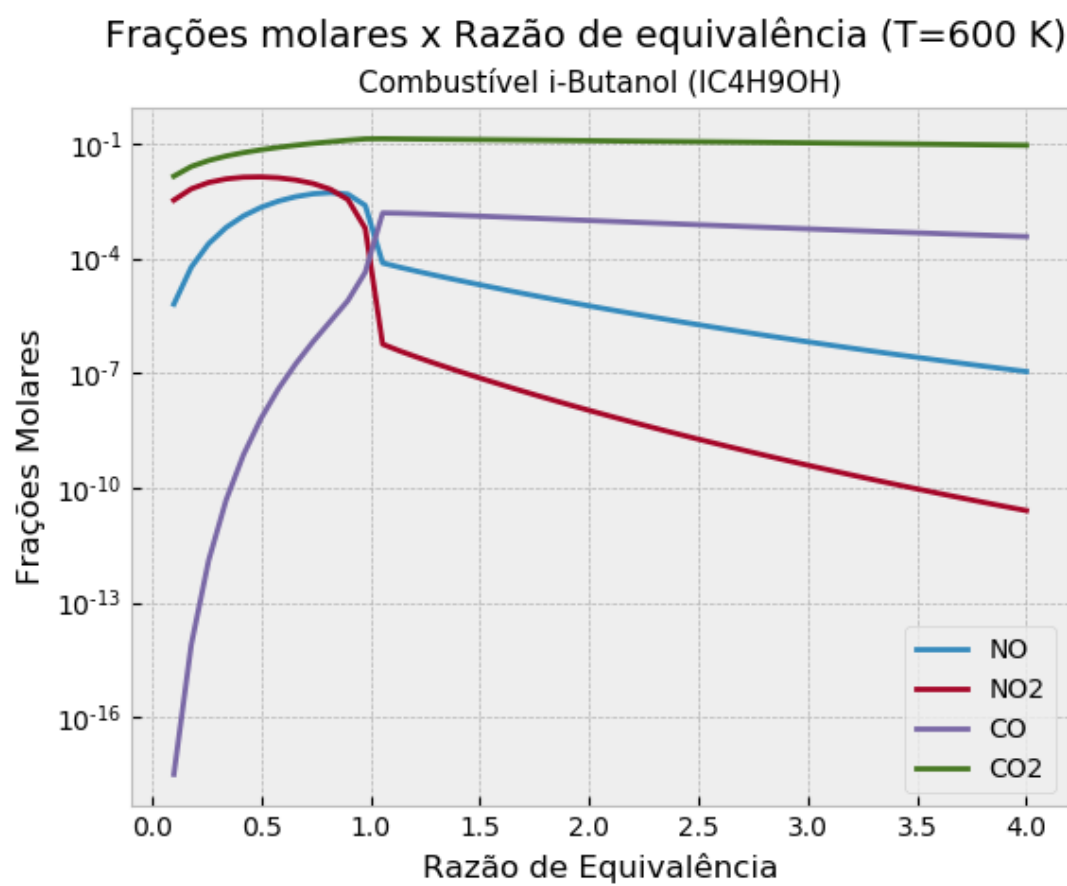


Figura 22 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 600 K, Butanol ( $C_4H_9OH$ )

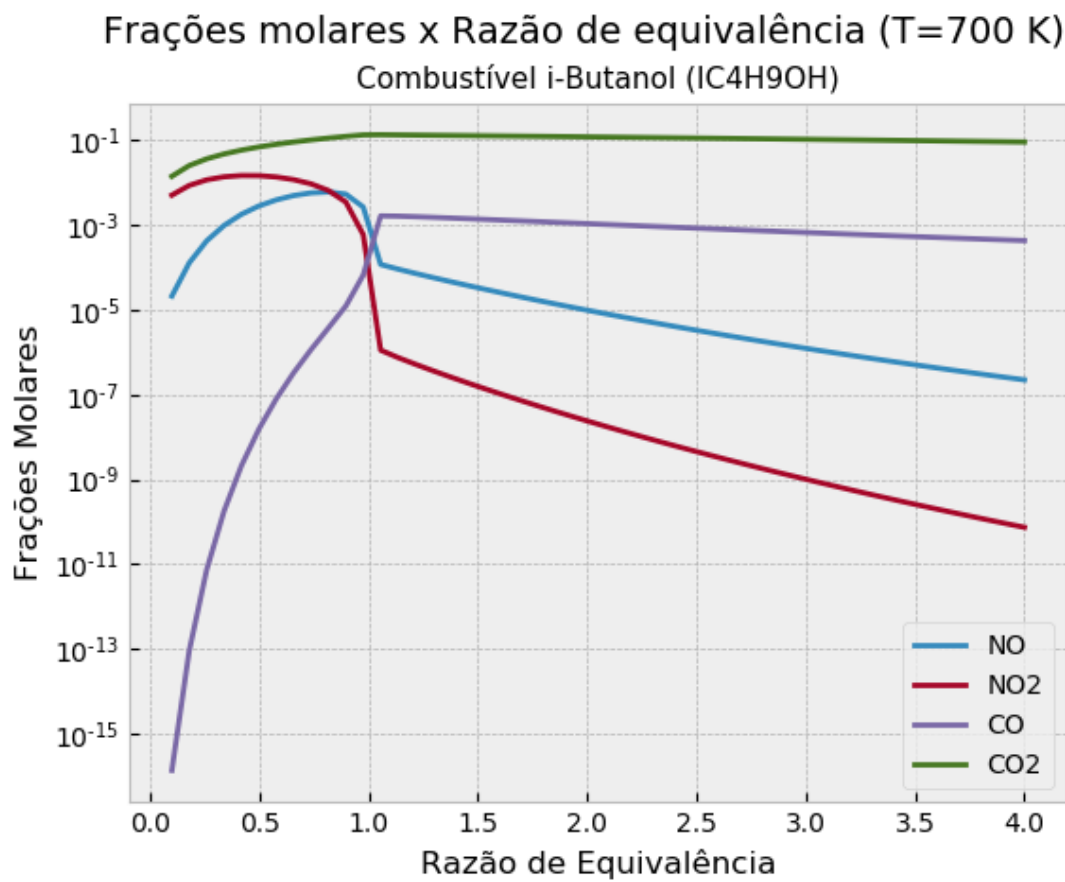


Figura 23 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 700 K, Butanol ( $C_4H_9OH$ )

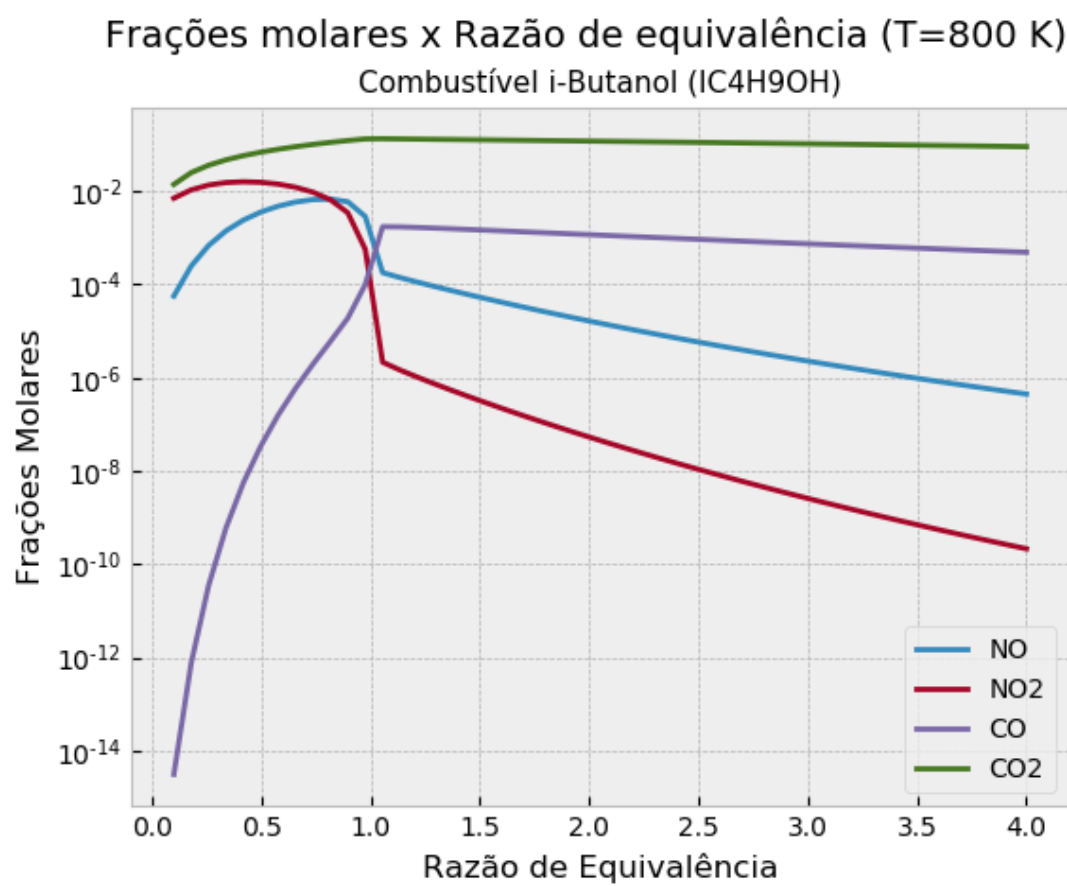


Figura 24 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 800 K, Butanol ( $C_4H_9OH$ )

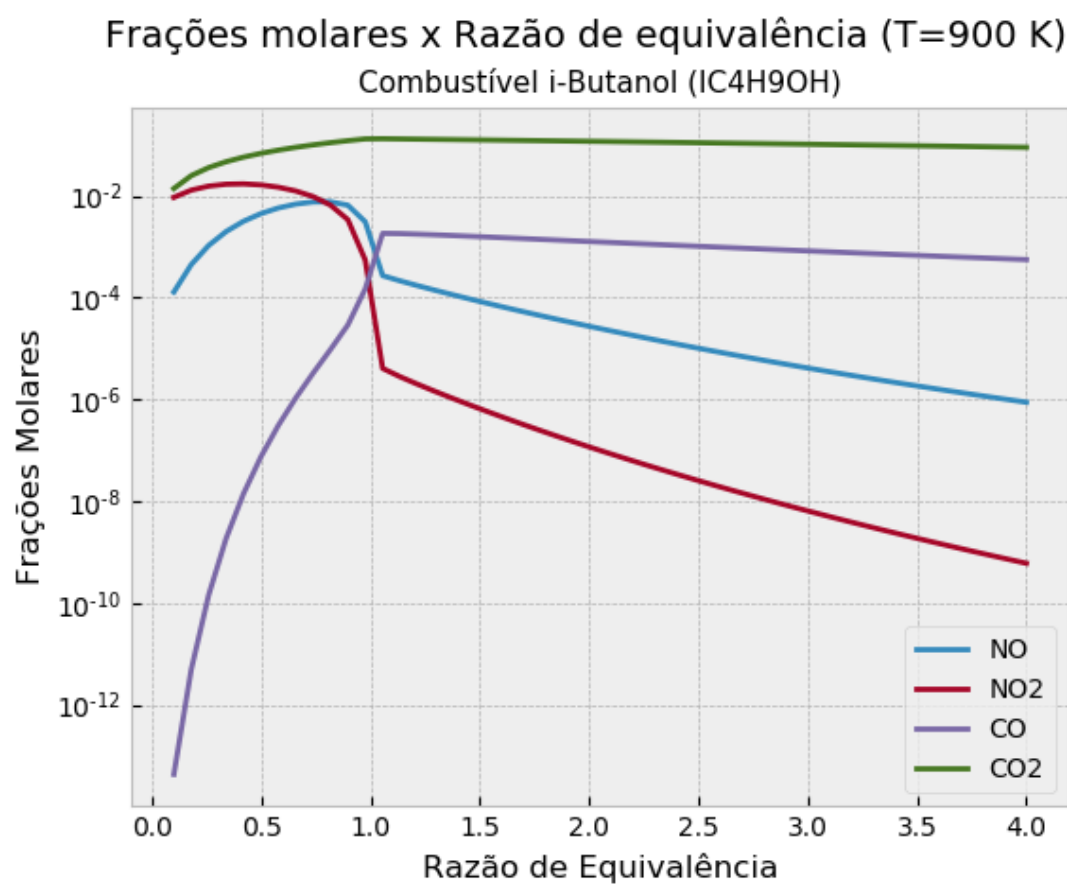


Figura 25 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 900 K, Butanol ( $C_4H_9OH$ )

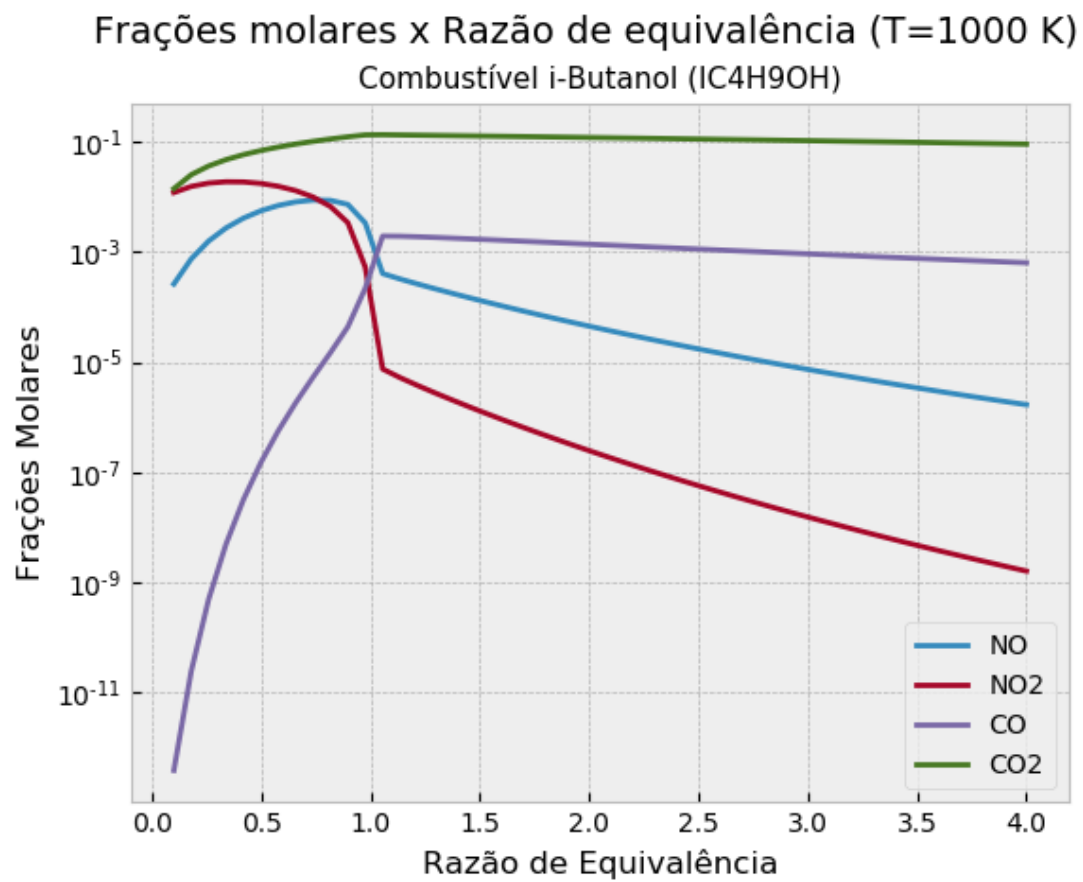


Figura 26 – Frações molares dos produtos da combustão para temperatura de entrada no combustor de 1000 K, Butanol ( $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$ )

### 3 DISCUSSÃO E CONCLUSÕES

Analisando os gráficos para a temperatura de chama adiabática, verifica-se que para ambos os combustíveis apresentam perfis de curvas similares, atingindo a temperatura máxima quanto maior fosse a temperatura de entrada no combustor. Também verifica-se que a temperatura de chama adiabática máxima ocorre ligeiramente após a razão de equivalência 1, que seria a razão na qual a relação combustível/ar no combustor é equivalente a relação necessária para a reação estequiométrica, indicando que a temperatura de chama adiabática máxima ocorre para uma mistura ligeiramente rica, isto é, com excesso de combustível.

A literatura de Motores a Combustão Interna por exemplo, cita que para alcançar a máxima potência do motor, um dos parâmetros a serem considerados é uma mistura levemente enriquecida, o que vai de encontro aos dados obtidos da simulação.

Também verifica-se dos gráficos de temperatura de chama adiabática que para um acréscimo da temperatura de entrada no combustor, para uma maior temperatura de chama adiabática deve-se também aumentar ligeiramente a razão de equivalência da mistura.

A partir do gráfico de fração molar de CO pode-se confirmar o comportamento esperado de acordo com a literatura: a quantidade de CO gerado para razões de equivalência menores que 1, isto é, mistura pobre, é pequena e cai vertiginosamente quanto mais pobre for a mistura. Pode-se verificar também que para uma dada razão de equivalência pobre, a fração molar de CO será maior quanto maior for a temperatura de entrada no combustor. Porém, ao alcançar-se a estequiometria (razão de equivalência igual a 1) o gráfico apresenta uma mudança de comportamento, na qual as curvas, antes espaçadas se sobrepõe, atingindo seu valor máximo para valores de razão de equivalência maiores que 1 (mistura rica). Seus valores então se mantêm constantes no máximo, com uma tendência a separação das curvas quanto maiores forem as razões de equivalência.

O fato de a fração molar de CO crescer exponencialmente para razões de equivalência mais elevadas é um indicativo do porque acrescentarmos CO na reação de equilíbrio para combustão de misturas ricas.

Analisando o gráfico gerado para  $CO_2$  obtido quando o combustível é o propano, verifica-se que para razões de equivalência menores que 1, as curvas de diferentes temperaturas se sobrepõe. A partir da razão de equivalência estequiométrica, isto é, quanto mais rica a mistura, verificamos que as curvas se distinguem. As curvas referentes a temperaturas de entrada no combustor quanto mais elevadas, indicam uma menor fração molar de  $CO_2$ . Isso se explica pelo fato do  $CO_2$  estar se dissociando para formar CO. A literatura da disciplina fala que quanto maior a temperatura na combustão, maior dissociação de  $CO_2$  em CO ocorrerá, logo, os dados não válidos.

Porém, ao analisar o gráfico gerado para a fração molar de  $CO_2$  do Butanol, verificou-se um comportamento de quase invariância do valor alcançado para diferentes temperaturas de entrada no combustor. Este comportamento é contrário ao esperado de acordo com a literatura.

Tendo em vista isto, a fim de testar o modelo, simulou-se o Propano a partir do modelo de mecanismo completo utilizado para a simulação do Butanol. O resultado apresentou o mesmo perfil que pode ser verificado na figura 27, que difere do perfil encontrado para o propano quando feita a simulação com o mecanismo padrão "gri30"(figura 3).

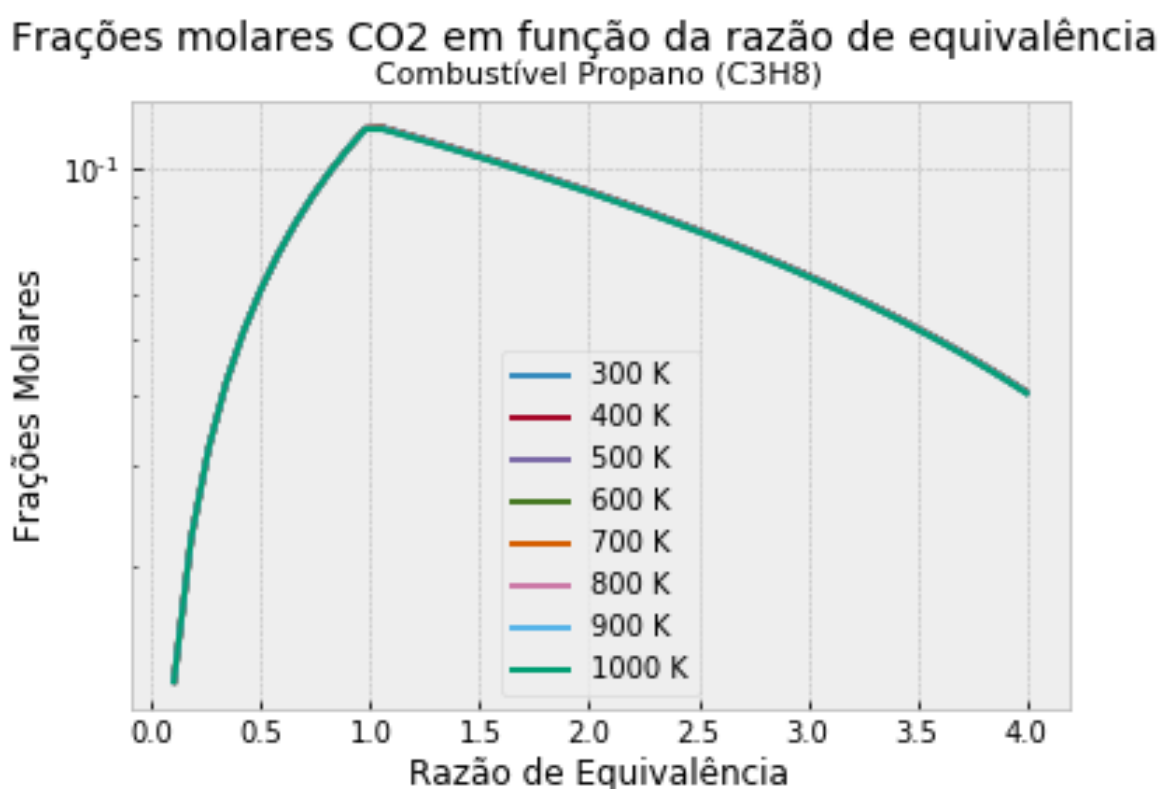


Figura 27 – Frações molares de  $CO_2$ , para o Propano a partir do mecanismo completo.

Devido a essa discrepância de comportamento entre os valores obtidos utilizando arquivos de mecanismos diferentes, durante uma simulação em um projeto de combustão real, deve-se atentar sempre a qual o modelo de mecanismo utilizado, consultar sua procedência e sua bibliografia a fim de determinar se seus resultados são confiáveis para o projeto em questão, pois se tratando de combustão, qualquer discrepância entre o real e o teórico, quando não mensurada pode resultar em falhas catastróficas que colocam em risco os usuários e transeuntes próximos ao combustor, seja ele um veículo automotor leve ou um veículo aero-espacial.

Analisando os gráficos de fração molar dos  $NO_x$  ( $NO$  e  $NO_2$ ), novamente observa-se o mesmo comportamento em ambos os combustíveis. O  $NO$  apresenta aumentos

exponenciais de fração molar conforme a mistura vai de pobre à estequiométrica, atingindo um valor máximo para uma mistura levemente empobrecida. Ao passar pela região de estequiometria, o valor da fração molar sofre uma queda brusca a até uma mistura levemente rica, e posteriormente uma queda suave tendendo a valores cada vez menores quanto maior a razão de equivalência. Verifica-se também que quanto maiores as temperaturas de entrada no combustor maiores as frações geradas.

Já a fração molar de  $NO_2$  apresenta leves aumentos exponenciais de fração molar conforme a mistura vai de pobre à estequiométrica, tendo uma queda brusca na região de estequiometria até que a mistura fique levemente rica. A partir daí, verifica-se uma queda suave tendendo a valores cada vez menores quanto maior a razão de equivalência. Verifica-se também que quanto maiores as temperaturas de entrada no combustor maiores as frações geradas, tal como o comportamento do NO.

Este comportamento dos NOx está condizente com a literatura, que indica que maiores temperaturas de combustão aumentam os valores de emissão de NOx. Também pode-se verificar que seus maiores valores estão relacionado a razão de equivalência referentes a misturas pobres (menores que 1). Isto pode ser explicado devido ao ar ser composto majoritariamente de nitrogênio e oxigênio, e a mistura pobre ocorrer a um excesso de ar, ficando assim valores consideráveis de N e O disponíveis para reagirem entre si formando os NOx.

Os gráfico das frações molares em função da razão de equivalência para as diferentes temperaturas nos mostram como se dá o aumento e diminuição das espécies estudadas. Pode-se destacar que o valor de fração molar de  $CO_2$  permanece praticamente invariado conforme se aumenta a relação de equivalência.



## 4 Bibliografia

BOHORQUEZ, W. O. I. *Fundamentos de Combustão: Aulas 1 a 11*. Disponível em: [http://www.ufjf.br/washington\\_irrazabal/teaching/mec052-fundamentals-of-combustion/](http://www.ufjf.br/washington_irrazabal/teaching/mec052-fundamentals-of-combustion/).

CANTERA. *Cantera Documentation*. Disponível em <https://cantera.org/documentation/index.html>.

MATPLOTLIB. *Style sheets reference*. Disponível em <[https://matplotlib.org/3.1.0/gallery/style\\_sheets/style\\_sheets\\_reference.html](https://matplotlib.org/3.1.0/gallery/style_sheets/style_sheets_reference.html)>.

CRECK MODELING. *Complete mechanism, Version 1412, December 2014*. Disponível em <http://creckmodeling.chem.polimi.it/menu-kinetics/menu-kinetics-detailed-mechanisms/menu-kinetics-complete-mechanism>.