

## CONEM2026-0183

# AVALIAÇÃO COMPARATIVA DA TEMPERATURA DE CHAMA ADIABÁTICA A PARTIR DE DIFERENTES FONTES DE DADOS TERMODINÂMICOS

Estêvão Faria Duarte Freitas, [estevao.freitas@ufv.br](mailto:estevao.freitas@ufv.br)<sup>1</sup>  
Júlio César Costa Campos, [julio.campos@ufv.br](mailto:julio.campos@ufv.br)<sup>1</sup>  
Álvaro M. Bigonha Tibiriçá, [alvaro.tibirica@ufv.br](mailto:alvaro.tibirica@ufv.br)<sup>1</sup>  
Pedro Ribeiro de Oliveira, [pedro.oliveira7@ufv.br](mailto:pedro.oliveira7@ufv.br)<sup>1</sup>  
Rogério Fernandes Brito, [rogerio6497@gmail.com](mailto:rogerio6497@gmail.com)<sup>2</sup>  
Antônio Marcos de Oliveira Siqueira, [antonio.siqueira@ufv.br](mailto:antonio.siqueira@ufv.br)<sup>1</sup>  
Washington Orlando Irrazabal Bohorquez, [washington.irrazabal@ufjf.br](mailto:washington.irrazabal@ufjf.br)<sup>3</sup>

Vinícius Gonçalves Pereira, [goncalvesvinicius402@gmail.com](mailto:goncalvesvinicius402@gmail.com)<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidade Federal de Viçosa - UFV

<sup>2</sup> Universidade Federal de Itajubá - UNIFEI

<sup>3</sup> Universidade Federal de Juiz de Fora - UFJF

**Resumo:** No contexto da engenharia térmica e da combustão, a chama adiabática constitui uma ferramenta fundamental para a avaliação do desempenho de combustíveis, o controle da emissão de poluentes e a otimização de componentes submetidos a altas temperaturas. A temperatura de chama adiabática é um dos principais parâmetros associados a esse fenômeno, pois representa o limite térmico teórico atingido pelo sistema na ausência de perdas de calor para o meio. Sua magnitude está diretamente relacionada à formação de poluentes, em especial os óxidos de nitrogênio (NOx), cuja taxa de formação aumenta significativamente em faixas mais elevadas de temperatura. Além disso, esse parâmetro exerce influência direta sobre a eficiência de ciclos térmicos, como aqueles empregados em turbinas a gás e motores de combustão interna, afetando o rendimento global e os limites operacionais impostos pelos materiais. A determinação da temperatura de chama adiabática depende, essencialmente, dos dados termodinâmicos dos reagentes e produtos envolvidos no processo de combustão, tais como entalpias de formação, capacidades caloríficas e funções de energia interna. Esses dados são obtidos a partir de diferentes bases termodinâmicas disponíveis na literatura, incluindo bancos fundamentados em polinômios da NASA e outras compilações experimentais. Contudo, é recorrente a existência de discrepâncias entre autores e bases de dados, o que pode resultar em diferenças nos valores calculados e impactar análises de desempenho e emissões. Diante desse cenário, o presente trabalho tem como objetivo calcular a temperatura de chama adiabática de um mesmo combustível utilizando diferentes bases de dados termodinâmicos, com a finalidade de avaliar a consistência, a confiabilidade e a sensibilidade dos resultados em função da fonte adotada. Para isso, são empregadas três ferramentas computacionais: o Engineering Equation Solver (EES), com biblioteca baseada nos polinômios da NASA; um código desenvolvido em Python utilizando a biblioteca Cantera; e o software HP Flame, alimentado com dados termodinâmicos reportados na literatura. A metodologia consiste em manter condições equivalentes de operação, variando apenas a base de dados empregada, e posteriormente comparar os resultados obtidos, estabelecendo um benchmark entre as abordagens. Os resultados indicam que as temperaturas calculadas apresentam valores próximos, com variações da ordem de dezenas de unidades de temperatura, atribuídas às diferenças nos parâmetros termodinâmicos utilizados. O estudo evidencia a influência direta da base de dados na previsão do comportamento do combustível e reforça a importância de sua escolha criteriosa em aplicações que demandam elevada precisão, controle de emissões e maximização da eficiência térmica.

**Palavras-chave:** Engenharia Térmica, Equilíbrio Químico, Polinômios da NASA, Dissociação, Confiabilidade Numérica

## 1. INTRODUÇÃO

No contexto da engenharia, a análise dos processos de combustão desempenha papel fundamental no desenvolvimento de projetos, influenciando diretamente a otimização e a avaliação de sistemas térmicos e energéticos. Motores de combustão interna, turbinas a gás, caldeiras e fornos industriais, por exemplo, dependem de modelos

confiáveis para prever o comportamento térmico dos combustíveis, visando maior eficiência energética, redução do consumo e diminuição da emissão de poluentes atmosféricos.

Nesse cenário, a temperatura de chama adiabática destaca-se como um dos principais parâmetros utilizados na análise da combustão. Esse parâmetro representa a máxima temperatura teórica alcançada pelos produtos quando se desprezam trocas de calor com o meio externo, sendo amplamente empregado como referência para avaliação de desempenho térmico, estimativa da formação de poluentes — especialmente óxidos de nitrogênio (NOx) — e validação de modelos numéricos. Assim, sua determinação precisa torna-se essencial.

O cálculo da temperatura de chama adiabática depende diretamente das propriedades termodinâmicas dos reagentes e produtos, como entalpia, calor específico e energia interna, obtidas a partir de bases de dados disponíveis na literatura. Entretanto, diferentes fontes, desenvolvidas com metodologias experimentais e ajustes matemáticos distintos, podem apresentar discrepâncias nesses valores. Como consequência, podem surgir divergências nos resultados para um mesmo combustível, mesmo quando são adotadas condições operacionais semelhantes.

Atualmente, diversas ferramentas computacionais utilizam bases de dados distintas, como os polinômios da NASA (National Aeronautics and Space Administration), amplamente empregados em modelagens computacionais, e tabelas termodinâmicas derivadas das JANAF (Joint Army-Navy-Air Force) Thermochemical Tables, frequentemente adotadas em livros-texto e softwares acadêmicos. Diferenças entre essas bases podem resultar em variações nos valores calculados, impactando a previsão do comportamento térmico do combustível.

Além da influência da base de dados, o método numérico empregado pelas ferramentas também pode afetar os resultados. Softwares como o Engineering Equation Solver (EES), a biblioteca Cantera — utilizando o mecanismo GRI-Mech 3.0 (gri30.yaml), baseado em polinômios da NASA — e o HPFLAME, que realiza o cálculo da temperatura de chama a partir do equilíbrio químico e do balanço de entalpia em condição adiabática, podem compartilhar fundamentos termodinâmicos semelhantes, mas adotar estratégias distintas de implementação e resolução numérica. Dessa forma, eventuais divergências podem estar associadas tanto às propriedades utilizadas quanto ao algoritmo empregado na solução do problema.

Diante desse contexto, este trabalho tem como objetivo realizar uma avaliação comparativa da temperatura de chama adiabática de um combustível a partir de diferentes bases de dados termodinâmicos e ferramentas computacionais. Parte-se da hipótese de que a base termodinâmica adotada influencia os valores calculados, sendo esperado observar diferenças mensuráveis nos resultados, mesmo sob condições operacionais equivalentes. O estudo busca, assim, avaliar a sensibilidade e a confiabilidade das previsões da temperatura de chama adiabática em análises de combustão.

## 2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

### 2.1. Formulação Termodinâmica da Temperatura de Chama Adiabática

A temperatura de chama adiabática pode ser determinada a partir da aplicação da Primeira Lei da Termodinâmica a um volume de controle no qual ocorre o processo de combustão. Para um sistema aberto operando em regime permanente, a forma geral da Primeira Lei é dada por:

$$0 = \sum_2 \dot{m}e - \sum_1 \dot{m}e + \dot{Q}_{vc} - \dot{W} \quad (1)$$

onde:  $\sum_2 \dot{m}e$  e  $\sum_1 \dot{m}e$  representam as somas dos produtos das vazões mássicas  $\dot{m}$  (kg/s) com as energias específicas  $e$  (kJ/kg) nas saídas e entradas do volume de controle;  $\dot{Q}_{vc}$  (kW) é a taxa de transferência de calor do volume de controle e  $\dot{W}$  (kW) a taxa de trabalho total.

Segundo Moran e Shapiro (2010), a energia específica é caracterizada por:

$$e = u + \frac{1}{2}V^2 + gz \quad (2)$$

em que:  $e$  é a energia interna específica (kJ/kg),  $V$  é a velocidade do escoamento (m/s),  $z$  é a coordenada vertical da corrente em relação a um plano de referência adotado (m), e  $g$  é a aceleração da gravidade (m/s<sup>2</sup>).

A taxa de trabalho total inclui a parcela associada ao escoamento (trabalho de fluxo) e o eventual trabalho realizado no volume de controle. Para múltiplas entradas e saídas, pode-se escrever:

$$\dot{W} = \sum_2 pAV - \sum_1 pAV + \dot{W}_{vc} \quad (3)$$

onde:  $\sum_1 pAV$  e  $\sum_2 pAV$  representam, respectivamente, os somatórios do trabalho de fluxo nas seções de entrada e de saída, obtidos pelo produto da pressão estática  $p$  (Pa), da área da seção transversal  $A$  (m<sup>2</sup>) e da velocidade média  $V$  (m/s) de cada corrente. O termo  $\dot{W}_{vc}$  corresponde à taxa de trabalho adicional realizada no interior do volume de controle (kW).

Observa-se que o produto da área pela velocidade corresponde a vazão volumétrica, a qual, multiplicada pela densidade do fluido, resulta na vazão mássica. Dessa forma, a expressão anterior pode ser reescrita em função da vazão mássica como:

$$\dot{W} = \sum_2 \dot{m} p v - \sum_1 \dot{m} p v + \dot{W}_{vc} \quad (4)$$

onde: corresponde ao volume específico do fluido (m<sup>3</sup>/kg).

Substituindo as Eqs. (2) e (3) na Eq. (1) e reorganizando os termos, obtém-se:

$$0 = \sum_1 \dot{m} (u + p v + \frac{1}{2} V^2 + g z) - \sum_2 \dot{m} (u + p v + \frac{1}{2} V^2 + g z) + \dot{Q}_{vc} - \dot{W}_{vc} \quad (5)$$

Utilizando a definição de entalpia específica adotada por Turns (2012):

$$h = u + p v \quad (6)$$

onde: h é a entalpia específica em kJ/kg

Substituindo a Equação(6) na Equação(5) obtemos:

$$0 = \sum_1 \dot{m} (h + \frac{1}{2} V^2 + g z) - \sum_2 \dot{m} (h + \frac{1}{2} V^2 + g z) + \dot{Q}_{vc} - \dot{W}_{vc} \quad (7)$$

Admitindo que o processo é adiabático, ausência de trabalho no volume de controle e variações desprezíveis de energia cinética e potencial, a expressão anterior se simplifica para um balanço de entalpia entre os fluxos dos estados 1 e 2:

$$0 = \sum_1 \dot{m} h - \sum_2 \dot{m} h \quad (8)$$

Por fim, escrevendo o balanço em base molar, adotando a pressão constante e distinguindo reagentes e produtos, obtém-se

$$\sum_1 n \bar{h}(T_0) = \sum_2 n \bar{h}(T) \quad (9)$$

Sendo:  $\sum_1 n \bar{h}(T_0)$  representa o somatório das entalpias molares das espécies nas correntes de entrada, obtido pelo produto da quantidade de matéria  $n$ (kmol) pela entalpia molar  $\bar{h}$ (kJ/kmol), avaliada na temperatura de referência  $T_0$ (K). De forma análoga,  $\sum_2 n \bar{h}(T)$  corresponde ao somatório das entalpias molares das espécies nas correntes de saída, calculadas a uma temperatura qualquer.

A Equação(9) pode ser aplicada ao processo de combustão, considerando as correntes de entrada como os reagentes e as correntes de saída como os produtos. Como foi admitido um processo adiabático, a temperatura  $T$  dos produtos corresponde à temperatura de chama adiabática  $T_{ad}$ . Assim, temos:

$$\sum_1 n \bar{h}(T_0) = \sum_2 n \bar{h}(T_{ad}) \quad (10)$$

Observa-se que a equação é implícita em relação a  $T_{ad}$ , uma vez que a entalpia dos produtos depende diretamente da temperatura final, cuja determinação exige procedimento iterativo ou solução numérica.

## 2.2. Determinação da Temperatura de Chama Adiabática

Para a determinação da temperatura de chama adiabática, a entalpia molar de cada espécie deve ser expressa em função da temperatura. Assim, a entalpia molar pode ser decomposta em duas parcelas: a entalpia padrão de formação e a variação de entalpia sensível em relação a uma temperatura de referência. Matematicamente, essa relação é escrita como:

$$\bar{h}(T) = \bar{h}_f^\circ + \int_{T_0}^{T_{ad}} c_p(T) dT \quad (11)$$

onde:  $\bar{h}_f^\circ$  é a entalpia padrão de formação da espécie (kJ/kmol),  $c_p(T)$  é o calor específico molar a pressão constante (kJ/kmol·K)

A primeira parcela representa o conteúdo energético associado à formação química da espécie, enquanto a segunda parcela quantifica a variação de entalpia decorrente da mudança de temperatura. Essa formulação permite incorporar simultaneamente os efeitos químicos e térmicos no balanço de energia do processo de combustão.

Ao substituir a Equação(11) na Equação(10) e reorganizando os termos, obtém-se uma equação em que a única incógnita passa a ser a temperatura dos produtos. Admitindo que os reagentes estejam na temperatura de referência  $T_0$ , a entalpia total inicial do sistema é conhecida. Logo, se tem:

$$\sum_1 n \bar{h}_{f,1}^\circ - \sum_2 n \bar{h}_{f,2}^\circ = \sum_2 n \int_{T_0}^{T_{ad}} c_p(T) dT \quad (12)$$

De acordo com Turns (2012), o termo do lado esquerdo é a entalpia padrão de reação, ou seja:

$$\sum_1 n \bar{h}_{f,1}^\circ - \sum_2 n \bar{h}_{f,2}^\circ = -\Delta H_R^\circ \quad (13)$$

onde:  $\Delta H_R^\circ$  é a entalpia de reação (kJ)

Portanto, a forma final usada para determinar a temperatura de chama adiabática é:

$$\Delta H_R^\circ = - \sum_2 n \int_{T_0}^{T_{ad}} c_p(T) dT \quad (14)$$

Como a Equação(14) depende da temperatura por meio do termo integral do calor específico, sua solução não pode ser determinada de forma analítica. Assim, a temperatura de chama adiabática foi calculada por meio de procedimento numérico iterativo, procedimentos os quais serão abordados na próxima seção.

### 3. METODOLOGIA

#### 3.1. Primeiros Passos

Inicialmente, torna-se necessária a definição dos combustíveis a serem analisados, uma vez que essa escolha estabelece a base para as comparações propostas no estudo. Dessa forma, foram selecionados os seguintes combustíveis:  $\text{CH}_4$  (metano),  $\text{C}_2\text{H}_6$  (etano),  $\text{C}_2\text{H}_4$  (eteno),  $\text{C}_2\text{H}_2$  (acetileno) e  $\text{C}_3\text{H}_8$  (propano).

A seleção contempla hidrocarbonetos de diferentes cadeias carbônicas, permitindo avaliar o comportamento da temperatura de chama adiabática em função da composição química do combustível e ampliar a abrangência da análise comparativa.

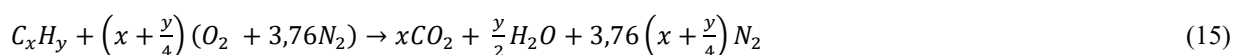
#### 3.2. Considerações Iniciais

Além das hipóteses estabelecidas na fundamentação teórica, torna-se necessária a definição das condições iniciais do sistema e do regime de combustão adotado. Essas definições garantem a padronização dos cálculos e asseguram a comparabilidade dos resultados obtidos entre as diferentes bases de dados termodinâmicos. Adicionalmente, assumiu-se que o processo de combustão ocorre sem considerar a dissociação química dos produtos, admitindo-se, portanto, a formação completa das espécies finais

A temperatura inicial dos reagentes foi fixada em  $T_0 = 298,15 \text{ K}$ , correspondente à temperatura ambiente. A adoção desse valor como referência é coerente com as condições padrão amplamente empregadas em análises termodinâmicas e na tabulação de propriedades, permitindo maior consistência na utilização das entalpias de formação e demais parâmetros termodinâmicos.

Embora o processo seja modelado a pressão constante, estabeleceu-se como condição de referência a pressão de  $P = 1 \text{ atm}$ . Essa escolha está alinhada às condições padrão de literatura e simplifica a comparação entre diferentes metodologias e ferramentas computacionais, sem comprometer a validade da análise proposta.

Quanto ao regime de combustão, optou-se pela condição estequiométrica, na qual a quantidade de oxidante é exatamente a necessária para a completa conversão do combustível, sem excesso de ar ou combustível residual. Dito isto, vale ressaltar então que o fator de equivalência ( $\phi$ ) é a razão entre a proporção combustível/ar real e a proporção estequiométrica, indicando se a mistura é pobre ( $\phi < 1$ ), estequiométrica ( $\phi = 1$ ) ou rica ( $\phi > 1$ ), neste caso adotamos ele como 1. A condição estequiométrica para a combustão de um hidrocarboneto pode ser representada pela seguinte equação balanceada:



onde:  $\text{C}_x\text{H}_y$  é a fórmula química genérica para um hidrocarboneto.

Neste trabalho, o nitrogênio foi considerado como um gás inerte no processo de combustão. Mesmo não participando diretamente das reações químicas, ele é incluído nos cálculos devido à sua considerável presença no ar atmosférico, que é composto por aproximadamente 79% de  $\text{N}_2$  e 21% de  $\text{O}_2$ . Logo, nas equações de combustão costuma aparecer o termo

3,76 N<sub>2</sub>, valor obtido pela razão entre as porcentagens de nitrogênio e oxigênio no ar ( $79/21 \approx 3,76$ ), indicando que para cada mol de oxigênio presente há cerca de 3,76 mol de nitrogênio acompanhando a mistura.

A opção pela combustão estequiométrica se deu por ela ser uma referência padrão e bem definida em estudos de chama adiabática. Nessa condição, a liberação de energia é máxima, o que resulta na maior temperatura possível para o sistema. Além disso, ao eliminar o excesso de ar, conseguimos isolar as variáveis e focar especificamente em como as diferentes bases de dados termodinâmicos influenciam o cálculo final da temperatura.

### 3.3. Bases de Dados Termodinâmicos

Para a determinação da temperatura de chama adiabática, foram empregadas diferentes fontes de dados termodinâmicos, a fim de avaliar a influência da base adotada nos resultados obtidos. As bases consideradas neste estudo compreendem os polinômios termodinâmicos da NASA, os dados implementados na biblioteca computacional Cantera, as propriedades apresentadas na literatura clássica de termodinâmica (MORAN; SHAPIRO, 2010), as bibliotecas termodinâmicas discutidas em estudos de combustão (TURNS, 2012) e as rotinas de equilíbrio químico propostas por Borman e Olikara, amplamente utilizadas em análises computacionais de processos de combustão.

A base da NASA é amplamente utilizada em estudos de combustão e modelagem de sistemas reativos em altas temperaturas. Nessa abordagem, as propriedades termodinâmicas das espécies químicas — como capacidade calorífica a pressão constante, entalpia e entropia — são representadas por polinômios em função da temperatura, válidos em intervalos específicos (tipicamente divididos em faixas de baixa e alta temperatura). Essa formulação permite uma representação contínua das propriedades e é particularmente adequada para aplicações envolvendo temperaturas elevadas, como no cálculo da chama adiabática.

A biblioteca Cantera, por sua vez, constitui uma ferramenta computacional que integra propriedades termodinâmicas, mecanismos cinéticos e rotinas de cálculo de equilíbrio químico. Embora utilize frequentemente os mesmos polinômios da NASA em seus arquivos termodinâmicos, seu diferencial está na capacidade de resolver automaticamente problemas de equilíbrio, incluindo efeitos de dissociação química em altas temperaturas. Dessa forma, o Cantera não apenas emprega dados termodinâmicos, mas os insere em um ambiente numérico capaz de considerar a composição de equilíbrio dos produtos da combustão.

As tabelas termodinâmicas apresentadas por Turns (2012) reúnem propriedades de diversas espécies químicas relevantes em processos de combustão, como entalpia, energia livre de Gibbs e capacidade calorífica, geralmente expressas por meio de polinômios em função da temperatura. Esses polinômios permitem calcular as propriedades termodinâmicas em uma ampla faixa de temperaturas, o que facilita sua aplicação em modelos computacionais de combustão e na análise de processos reacionais.

Já as rotinas de equilíbrio químico propostas por Olikara e Borman baseiam-se na minimização da energia livre de Gibbs do sistema para determinar a composição de equilíbrio dos produtos da reação. A partir das propriedades termodinâmicas das espécies envolvidas e das condições de pressão e temperatura, o método calcula as frações molares das espécies presentes no equilíbrio químico, sendo amplamente empregado na análise de sistemas de combustão e na determinação da temperatura de chama adiabática.

Já os dados apresentados por Moran e Shapiro (2010) baseiam-se em compilações experimentais consolidadas, disponibilizadas predominantemente na forma de tabelas. Nessas tabelas são fornecidos valores de entalpia, entropia e capacidade calorífica para diferentes substâncias, geralmente em condições padrão ou em faixas moderadas de temperatura. Diferentemente dos polinômios da NASA, essa abordagem exige interpolação para temperaturas intermediárias e não é especificamente voltada à modelagem detalhada de combustão em regimes de alta temperatura com dissociação significativa.

Do ponto de vista conceitual, as diferenças entre as bases utilizadas estão relacionadas à forma de representação das propriedades e ao método de cálculo do equilíbrio químico. Os polinômios da NASA descrevem propriedades termodinâmicas por meio de expressões matemáticas contínuas em função da temperatura, amplamente empregadas em ferramentas computacionais. A biblioteca Cantera utiliza esses coeficientes dentro de um ambiente integrado capaz de resolver automaticamente o equilíbrio químico. Moran e Shapiro (2010) apresentam propriedades em forma tabulada, voltadas à análise termodinâmica clássica. Já Turns (2012) reúne dados termodinâmicos direcionados a aplicações em combustão, enquanto as rotinas de Olikara e Borman fornecem um procedimento iterativo para calcular a composição de equilíbrio dos produtos. Essas diferenças metodológicas podem resultar em pequenas variações nos valores da temperatura de chama adiabática.

### 3.4. Ferramentas Computacionais

A seguir são apresentados os procedimentos adotados para a realização das simulações em cada uma das ferramentas computacionais empregadas neste estudo. O objetivo desta seção é descrever, de forma clara e organizada, as etapas seguidas na implementação dos modelos, bem como os parâmetros definidos em cada ambiente de cálculo.

Embora o princípio físico utilizado seja o mesmo — a aplicação do balanço de energia sob condição adiabática e pressão constante — a forma de implementação varia conforme a estrutura e os recursos disponíveis em cada software.

Dessa maneira, a descrição individual dos procedimentos permite evidenciar as particularidades de cada ferramenta, garantindo transparência metodológica e reprodutibilidade dos resultados obtidos.

### 3.4.1 EES (Engineering Equation Solver)

Inicialmente, é carregada a biblioteca termodinâmica da NASA por meio do comando “\$Load 'NASA'”, possibilitando o acesso às propriedades das espécies químicas em função da temperatura. Em seguida, define-se a temperatura inicial dos reagentes, adotando-se 298,15K como referência, a qual é convertida para Kelvin por meio da função “converttemp”.

Na sequência, são obtidas as entalpias padrão de formação das espécies envolvidas na reação. Para o combustível, o valor é fornecido como dado de entrada obtido na literatura (MORAN; SHAPIRO, 2010), enquanto para as demais espécies ( $O_2$ ,  $N_2$ ,  $CO_2$  e  $H_2O$ ) utilizam-se as funções internas do EES, como “enthalpy\_formation”. No caso da água, considera-se a entalpia correspondente à fase de vapor na temperatura de referência.

Posteriormente, são definidos como variáveis de entrada os números de mols de reagentes e produtos, de acordo com a reação estequiométrica considerada. Com esses valores, calcula-se o calor de reação padrão (D), a partir da diferença entre a soma das entalpias de formação dos reagentes e a soma das entalpias de formação dos produtos.

Para entender como a energia dos produtos varia com a temperatura, definimos um intervalo de análise e usamos a estrutura “duplicate” para calcular as entalpias de  $CO_2$ ,  $H_2O$  e  $N_2$  em cada ponto. A variação da entalpia sensível é calculada em relação ao estado de referência e multiplicada pelo número de mols de cada componente. Somando tudo, chegamos à energia total dos produtos para cada temperatura (variável 'E[j]'), o que permite acompanhar claramente essa evolução energética ao longo da faixa escolhida.

Por fim, definimos a temperatura de chama adiabática ( $T_{ad}$ ) como a incógnita principal. Com base nela, recalculamos as entalpias de cada espécie e suas respectivas variações, seguindo a mesma lógica das etapas anteriores. O balanço de energia é fechado igualando as variáveis 'E\_2' e 'D', completando o processo detalhado na Fig. 1.

```

$Load 'NASA'
T_reagente = converttemp(C, K, 25)

"-- Entalpias padrão de formação (kJ/kmol) --"
$Input h_form_Comb
h_form_N2 = enthalpy_formation(N2)
h_form_O2 = enthalpy_formation(O2)
h_form_CO2 = enthalpy_formation(CO2)
h_form_H2O_liq = enthalpy_formation(H2O)
h_form_H2O_vap = enthalpy_formation(H2O, T=T_reagente)

"-- Números de mols --"
$Input n_Comb
$Input n_O2
$Input n_N2
$Input n_CO2
$Input n_H2O

"-- Calor de reação padrão --"
D = (n_Comb*h_form_Comb + n_N2*h_form_N2 + n_O2*h_form_O2) - (n_CO2*h_form_CO2 + n_H2O*h_form_H2O_vap + n_N2*h_form_N2)

"-- Faixa de temperaturas --"
T[1..14] = [298, 15, 2000, 2300, 2350, 2400, 2450, 2500, 2550, 3000, 3500, 3350, 4000, 5000, 6000]

Duplicate j=1,14
  "-- CO2 --"
  h_CO2[j] = enthalpy(CO2, T=T[j])
  DELTAh_CO2[j] = h_CO2[j] - h_form_CO2
  NtimesDELTAh_CO2[j] = n_CO2 * DELTAh_CO2[j]

  "-- H2O --"
  h_H2O[j] = enthalpy(H2O, T=T[j])
  DELTAh_H2O[j] = h_H2O[j] - h_form_H2O_vap
  NtimesDELTAh_H2O[j] = n_H2O * DELTAh_H2O[j]

  "-- N2 --"
  Call NASA(N2, T[j], CP_N2[j], h_N2[j], S_N2[j])
  DELTAh_N2[j] = h_N2[j] - h_form_N2
  NtimesDELTAh_N2[j] = n_N2 * DELTAh_N2[j]

  "-- Soma total da energia dos produtos --"
  E[j] = NtimesDELTAh_CO2[j] + NtimesDELTAh_H2O[j] + NtimesDELTAh_N2[j]
End

E_2 = D
E_2 = NtimesDELTAh_CO2_2 + NtimesDELTAh_H2O_2 + NtimesDELTAh_N2_2

```

Figura 1 – Código no EES.

Fonte: Autor (2026).

Dessa forma, o EES resolve iterativamente a equação até encontrar o valor da  $T_{ad}$  que satisfaz a conservação de energia, caracterizando a temperatura de chama adiabática para as condições estabelecidas.

### 3.4.2 Python (Cantera)

A simulação em Python foi realizada com o auxílio da biblioteca Cantera, utilizando o mecanismo GRI-Mech 3.0 (gri30.yaml), que contém as propriedades termodinâmicas e o conjunto de reações necessárias para a modelagem da combustão. Inicialmente, o código permite a seleção do combustível entre cinco opções previamente definidas (metano, propano, hidrogênio, etano e butano), associando a escolha à respectiva espécie química.

Em seguida, a mistura reagente é configurada em condição estequiométrica por meio do comando “set\_equivalence\_ratio”, adotando-se fator de equivalência  $\phi = 1,0$  e ar atmosférico idealizado como oxidante ( $O_2$ : 1,  $N_2$ : 3,76). As condições iniciais são fixadas em 298,15 K e 1 atm.

A determinação da temperatura de chama adiabática é realizada com o comando “equilibrate(“HP”)”, que impõe equilíbrio químico a entalpia e pressão constantes. Dessa forma, a conservação da entalpia caracteriza o processo como adiabático, enquanto o Cantera calcula simultaneamente a temperatura final e a composição de equilíbrio dos produtos, considerando possíveis efeitos de dissociação química.

Por fim, o programa apresenta a temperatura obtida e as frações molares das principais espécies formadas, permitindo a análise tanto do valor da chama adiabática quanto da composição final do sistema. O código é mostrado por meio da Fig. 2.

```

1 import cantera as ct
2 gas = ct.Solution("gri30.yaml")
3 print("Escolha o combustível:")
4 print("1 - Metano (CH4)")
5 print("2 - Etano (C2H6)")
6 print("3 - Eteno (C2H4)")
7 print("4 - Acetileno (C2H2)")
8 print("5 - Propano (C3H8)")
9
10 opcao = input("Escolha o combustível: ")
11
12 if opcao == "1":
13     fuel = "CH4"
14     a, b = 1, 4
15     nome = "Metano"
16 elif opcao == "2":
17     fuel = "C2H6"
18     a, b = 2, 6
19     nome = "Etano"
20 elif opcao == "3":
21     fuel = "C2H4"
22     a, b = 2, 4
23     nome = "Eteno"
24 elif opcao == "4":
25     fuel = "C2H2"
26     a, b = 2, 2
27     nome = "Acetileno"
28 elif opcao == "5":
29     fuel = "C3H8"
30     a, b = 3, 8
31     nome = "Propano"
32 else:
33     raise ValueError("Opção inválida!")
34
35 O2_st = a + b/4
36 N2_st = 3.76 * O2_st
37
38 # Estado inicial
39 T0 = 298.15
40 P0 = ct.one_atm
41
42 gas.TPX = T0, P0, f"{fuel}:1, O2:{O2_st}, N2:{N2_st}"
43 h_reag = gas.enthalpy_mass
44
45 # Produtos FIKOS (sem dissociação)
46 gas.TPX = T0, P0, f"C02:{a}, H2O:{b/2}, N2:{N2_st}"
47 h_prod_ref = gas.enthalpy_mass
48
49 # Resolver T tal que h_prod(T) = h_reag
50 def f(T):
51     gas.TPX = T, P0, f"C02:{a}, H2O:{b/2}, N2:{N2_st}"
52     return gas.enthalpy_mass - h_reag
53 T_guess = 2500
54
55 for i in range(100):
56     gas.TPX = T_guess, P0, f"C02:{a}, H2O:{b/2}, N2:{N2_st}"
57     cp = gas.cp_mass
58     T_guess = T_guess - f(T_guess)/cp
59 T_ad = T_guess
60
61 # Resultados
62 print("\n=====")
63 print(f"Combustível: {nome}")
64 print(f"Modelo: combustão completa (sem dissociação)")
65 print(f"Temperatura de chama adiabática = {T_ad:.2f} K")
66 print("=====")

```

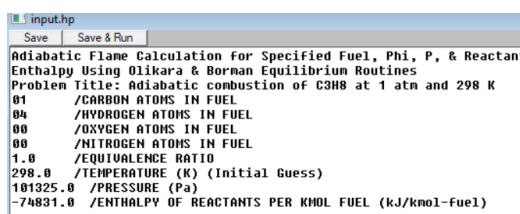
Figura 2 – Código no Python.  
Fonte: Autor (2026).

### 3.4.3 HPFLAME

A temperatura de chama adiabática foi determinada utilizando o software HPFLAME na formulação HP, em que o processo ocorre a pressão constante com conservação da entalpia do sistema. Nessa abordagem, a temperatura final é obtida a partir da igualdade entre a entalpia dos reagentes e dos produtos em equilíbrio químico. A composição de equilíbrio foi calculada por meio das rotinas desenvolvidas por Olikara e Borman, enquanto a entalpia dos reagentes utilizada como entrada foi obtida na literatura (TURNS, 2012).

A composição do combustível é definida pela contagem de átomos de carbono, hidrogênio, oxigênio e nitrogênio. No nosso caso, como as moléculas não possuem oxigênio nem nitrogênio, informamos apenas os teores de C e H. Com esses dados, o programa já executa os balanços elementares e calcula automaticamente a quantidade estequiométrica de oxidante necessária.

A razão de equivalência foi fixada em  $\phi = 1$ , caracterizando combustão estequiométrica. As condições iniciais adotadas foram temperatura de 298,15 K e pressão de 101325 Pa (1 atm). Por fim, foi especificada a entalpia dos reagentes por kmol de combustível, correspondente à entalpia padrão de formação, permitindo ao programa aplicar o balanço de energia e determinar iterativamente a temperatura de chama adiabática para cada combustível analisado. A forma a qual o processo foi feito, é evidenciado pela Fig. 3.



```

input.hp
Save Save & Run
Adiabatic Flame Calculation for Specified Fuel, Phi, P, & Reactant
Enthalpy Using Olikara & Borman Equilibrium Routines
Problem Title: Adiabatic combustion of C3H8 at 1 atm and 298 K
01 /CARBON ATOMS IN FUEL
04 /HYDROGEN ATOMS IN FUEL
00 /OXYGEN ATOMS IN FUEL
00 /NITROGEN ATOMS IN FUEL
1.0 /EQUIVALENCE RATIO
298.0 /TEMPERATURE (K) (Initial Guess)
101325.0 /PRESSURE (Pa)
-74831.0 /ENTHALPY OF REACTANTS PER KMOL FUEL (kJ/kmol-fuel)

```

Figura 3 – Interface do HPflame.  
Fonte: Autor (2026).

Conforme discutido no livro (TURNS, 2012, p. 37), a consideração da dissociação química reduz a temperatura de chama adiabática, pois parte da energia liberada na reação é consumida na quebra de ligações químicas. Ao negligenciar esse efeito, toda a variação de entalpia é convertida em entalpia sensível, resultando em valores mais elevados de  $T_{ad}$ . O autor indica que essa diferença pode ser da ordem de 100 K para misturas hidrocarboneto-ar estequiométricas. Dessa forma, adotou-se neste trabalho um acréscimo aproximado de 100 K aos resultados do HPFLAME, a fim de representar a condição sem dissociação, em concordância com a literatura.

### 3.5 Critério de comparação

Para comparar as temperaturas de chama adiabática obtidas a partir das diferentes bases termodinâmicas, adotou-se uma abordagem quantitativa sem assumir qualquer método como referência absoluta. Para cada combustível, calculou-se inicialmente a média das três temperaturas, utilizada como valor de referência neutro.

Em seguida, determinaram-se as diferenças absolutas entre os resultados, Eq(16), e o erro relativo percentual de cada método em relação à média, Eq(17).

$$\Delta T_{ij} = |T_i - T_j| \quad (16)$$

Onde: os subscritos i e j representam métodos computacionais distintos e  $T_i$  e  $T_j$  as suas respectivas temperaturas.

$$\varepsilon_i(\%) = |T_i - T_{média}| \frac{100}{T_{média}} \quad (17)$$

Onde:  $\varepsilon_i(\%)$  é erro relativo percentual de certo método computacional.

Complementarmente, foi calculado o desvio padrão, Eq. (18), e o coeficiente de variação, Eq. (19), permitindo avaliar o grau de dispersão entre os valores obtidos.

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum (T_i - T_{média})^2}{n-1}} \quad (18)$$

Onde:  $\sigma$  é desvio padrão e  $n$  é o número total de amostras

$$CV = \frac{\sigma}{T_{média}} 100 \quad (19)$$

Essa metodologia possibilita quantificar as discrepâncias e analisar a influência das diferentes bases de dados sobre os resultados da temperatura de chama adiabática.

#### 4 RESULTADOS

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos para a temperatura de chama adiabática dos combustíveis analisados e os para análises estatísticas de comparação. Os valores são discutidos de forma comparativa, buscando evidenciar as diferenças observadas entre as metodologias empregadas e avaliar a influência das propriedades termodinâmicas nos resultados finais. Além da comparação numérica, são analisadas as tendências e a consistência física dos valores obtidos, de modo a fornecer uma interpretação clara e fundamentada dos resultados.

Tabela 1

| Combustível\Método | EES     | CANTERA | HPFLAME | Média   |
|--------------------|---------|---------|---------|---------|
| $T_{ad,CH_4}(K)$   | 2324,00 | 2325,60 | 2326,54 | 2325,38 |
| $T_{ad,C_3H_8}(K)$ | 2392,00 | 2392,10 | 2366,78 | 2383,63 |
| $T_{ad,C_2H_6}(K)$ | 2378,00 | 2379,85 | 2365,36 | 2374,40 |
| $T_{ad,C_2H_2}(K)$ | 2955,00 | 2909,35 | 2639,27 | 2834,54 |
| $T_{ad,C_2H_4}(K)$ | 2564,00 | 2564,53 | 2469,43 | 2532,65 |

A Tabela 1 indica boa concordância entre os resultados do EES e do Cantera, com diferenças pequenas entre si. O HPFLAME apresentou valores ligeiramente distintos em alguns casos. Observa-se ainda que o acetileno atingiu a maior temperatura de chama adiabática, enquanto o metano apresentou valores menores, evidenciando a influência do combustível no resultado.

Tabela 2

| $C_xH_y$ \Diferença           | $ T_{EES} - T_{CANTERA}  (K)$ | $ T_{EES} - T_{HP}  (K)$ | $ T_{CANTERA} - T_{HP}  (K)$ |
|-------------------------------|-------------------------------|--------------------------|------------------------------|
| CH <sub>4</sub>               | 1,6                           | 2,54                     | 0,94                         |
| C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> | 0,1                           | 25,22                    | 25,32                        |
| C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> | 1,85                          | 12,64                    | 14,49                        |
| C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> | 45,65                         | 315,73                   | 270,08                       |
| C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> | 0,53                          | 94,57                    | 95,10                        |

As diferenças absolutas entre as temperaturas calculadas estão apresentadas na Tabela 2. Verifica-se que os menores desvios ocorrem entre o EES e o Cantera, com valores bastante reduzidos para a maioria dos combustíveis. Em



contrapartida, as maiores discrepâncias envolvem o HPFLAME, especialmente no caso do acetileno e do eteno, onde as diferenças são significativamente mais elevadas, indicando menor concordância desse método em relação aos demais.

Tabela 3

| $\varepsilon \setminus \text{Método}$    | EES  | CANTERA | HPFLAME |
|------------------------------------------|------|---------|---------|
| $\varepsilon_{\text{CH}_4}(\%)$          | 0,06 | 0,01    | 0,05    |
| $\varepsilon_{\text{C}_3\text{H}_8}(\%)$ | 0,35 | 0,36    | 0,71    |
| $\varepsilon_{\text{C}_2\text{H}_6}(\%)$ | 0,15 | 0,23    | 0,38    |
| $\varepsilon_{\text{C}_2\text{H}_2}(\%)$ | 4,25 | 2,64    | 6,89    |
| $\varepsilon_{\text{C}_2\text{H}_4}(\%)$ | 1,24 | 1,26    | 2,5     |

Os erros relativos associados às temperaturas calculadas estão apresentados na Tabela 3. Observa-se que, para metano, etano e propano, os valores permanecem baixos em todos os métodos, indicando boa concordância. Por outro lado, os maiores erros estão associados ao acetileno e ao eteno, especialmente no HPFLAME, evidenciando maior sensibilidade desses combustíveis às hipóteses adotadas no modelo.

Tabela 4

| $\sigma \setminus C_xH_y$ | CH <sub>4</sub> | C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> | C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> | C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> | C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> |
|---------------------------|-----------------|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| $\sigma$ (K)              | 1,28            | 14,59                         | 7,89                          | 170,64                        | 54,75                         |

Os valores de desvio padrão das temperaturas calculadas estão apresentados na Tabela 4. Nota-se que o metano apresenta a menor dispersão entre os métodos, enquanto o acetileno apresenta o maior desvio padrão, indicando maior divergência entre os resultados obtidos. Os demais combustíveis apresentam valores intermediários, evidenciando variações moderadas entre as diferentes ferramentas utilizadas.

Tabela 5

| CV $\setminus C_xH_y$ | CH <sub>4</sub> | C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> | C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> | C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> | C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> |
|-----------------------|-----------------|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| CV (%)                | 0,06            | 0,61                          | 0,33                          | 6,02                          | 2,16                          |

Os coeficientes de variação apresentados na Tabela 5 indicam que a dispersão relativa das temperaturas de chama adiabática é inferior a 2,5% para a maioria dos combustíveis analisados. O acetileno apresentou o maior CV (6,02%), seguido pelo eteno (2,16%), enquanto o propano (0,61%), o etano (0,33%) e o metano (0,06%) apresentaram variações relativamente pequenas.

O coeficiente de variação é amplamente utilizado como medida adimensional de dispersão relativa, permitindo avaliar a magnitude das variações independentemente da escala dos valores analisados (Montgomery; Runger, 2014). De modo geral, os resultados indicam boa concordância entre os métodos, embora o acetileno apresente uma dispersão mais elevada em comparação aos demais combustíveis.

## 5 CONCLUSÃO

Pelos resultados, dá para ver que as temperaturas de chama calculadas batem bem entre si. As médias da Tabela 1 mostram valores muito próximos nos três métodos, com variações sutis que dependem do combustível. Essas diferenças ficam um pouco mais evidentes em compostos com maior razão carbono-hidrogênio, como no caso do acetileno e do eteno.

A análise das diferenças absolutas (Tabela 2) evidencia que as maiores discrepâncias ocorrem quando se compara o HPFLAME com os demais métodos, enquanto os resultados obtidos entre EES e Cantera permanecem, na maioria dos casos, bastante próximos. Tendência semelhante pode ser observada na análise dos erros relativos (Tabela 3), em que os maiores desvios estão associados principalmente ao acetileno, indicando maior sensibilidade desse combustível às bases de dados e aos procedimentos numéricos empregados.

A avaliação estatística, por meio do desvio padrão (Tabela 4) e do coeficiente de variação (Tabela 5), confirma essa tendência. Para a maior parte dos combustíveis, os valores de dispersão permanecem relativamente baixos, indicando consistência entre os métodos adotados. Entretanto, o acetileno apresenta maior variabilidade, refletindo as diferenças mais pronunciadas observadas anteriormente.

De modo geral, os resultados indicam que, embora existam diferenças mensuráveis entre as ferramentas computacionais e bases termodinâmicas utilizadas, a concordância global entre os valores obtidos pode ser considerada satisfatória para a maioria dos combustíveis analisados. Esses resultados reforçam a importância da escolha da base de dados termodinâmica e do método de cálculo na determinação da temperatura de chama adiabática, especialmente em estudos que demandam maior precisão na previsão do comportamento térmico dos combustíveis.

## 6 AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à Universidade Federal de Viçosa (UFV). Este trabalho foi realizado com o apoio da Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) e da Fundação Arthur Bernardes (FUNARBE) - Processo PPE-00023-21, Governo de Minas Gerais - Seinfra-MG, Núcleo de Desenvolvimento Tecnológico Ferroviário do Estado de Minas Gerais - NDF e CNPq.

## 7 REFERÊNCIAS

MONTGOMERY, D. C.; RUNGER, G. C. *Applied Statistics and Probability for Engineers*. 6. ed. New York: John Wiley & Sons, 2014.

MORAN, M. J.; SHAPIRO, H. N. *Fundamentals of Engineering Thermodynamics*. 7. ed. New York: John Wiley & Sons, 2010.

URNS, S. R. *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. 3. ed. New York: McGraw-Hill, 2012

## 8 RESPONSABILIDADE AUTORAL

Os autores declaram ser integralmente responsáveis pelo conteúdo deste trabalho, incluindo a utilização adequada das referências bibliográficas, bem como pelas análises, interpretações e resultados apresentados.

# COMPARATIVE ASSESSMENT OF ADIABATIC FLAME TEMPERATURE FROM DIFFERENT THERMODYNAMIC DATA SOURCES

Estêvão Faria Duarte Freitas, [estevao.freitas@ufv.br](mailto:estevao.freitas@ufv.br)<sup>1</sup>

Júlio César Costa Campos, [julio.campos@ufv.br](mailto:julio.campos@ufv.br)<sup>1</sup>

Álvaro M. Bigonha Tibiriçá, [alvaro.tibirica@ufv.br](mailto:alvaro.tibirica@ufv.br)<sup>1</sup>

Pedro Ribeiro de Oliveira, [pedro.oliveira7@ufv.br](mailto:pedro.oliveira7@ufv.br)<sup>1</sup>

Rogério Fernandes Brito, [rogerio6497@gmail.com](mailto:rogerio6497@gmail.com)<sup>2</sup>

Antônio Marcos de Oliveira Siqueira, [antonio.siqueira@ufv.br](mailto:antonio.siqueira@ufv.br)<sup>1</sup>

Washington Orlando Irrazabal Bohorquez, [washington.irrazabal@ufjf.br](mailto:washington.irrazabal@ufjf.br)<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Universidade Federal de Viçosa - UFV

<sup>2</sup> Universidade Federal de Itajubá - UNIFEI

<sup>3</sup> Universidade Federal de Juiz de Fora - UFJF

**Abstract.** In the context of thermal engineering and combustion, the adiabatic flame constitutes a fundamental tool for evaluating fuel performance, controlling pollutant emissions, and optimizing components subjected to high temperatures. The adiabatic flame temperature is one of the main parameters associated with this phenomenon, as it represents the theoretical thermal limit reached by the system in the absence of heat losses to the surroundings. Its magnitude is directly related to pollutant formation, particularly nitrogen oxides (NO<sub>x</sub>), whose formation rate increases significantly at higher temperature ranges. Furthermore, this parameter directly influences the efficiency of thermal cycles, such as those employed in gas turbines and internal combustion engines, affecting overall performance and the operational limits imposed by material constraints.

The determination of the adiabatic flame temperature depends essentially on the thermodynamic data of the reactants and products involved in the combustion process, such as enthalpies of formation, specific heats, and internal energy functions. These data are obtained from different thermodynamic databases available in the literature, including those based on NASA polynomial formulations and other experimental compilations. However, discrepancies among authors and data sources are common, which may lead to differences in calculated values and impact performance and emissions analyses.

In this context, the present work aims to calculate the adiabatic flame temperature of the same fuel using different thermodynamic databases, in order to evaluate the consistency, reliability, and sensitivity of the results with respect to the selected data source. To this end, three computational tools are employed: the Engineering Equation Solver (EES), using a library based on NASA polynomials; a Python code developed with the Cantera library; and the HP Flame software, supplied with thermodynamic data reported in the literature. The methodology consists of maintaining equivalent operating conditions while varying only the thermodynamic database, followed by a comparison of the obtained results to establish a benchmark among the approaches.

The results indicate that the calculated temperatures are close in magnitude, with variations on the order of tens of temperature units, attributed to differences in the thermodynamic parameters employed. The study highlights the direct influence of the selected database on fuel behavior prediction and reinforces the importance of carefully choosing thermodynamic data sources in applications requiring high accuracy, emission control, and maximization of thermal efficiency.

**Keywords:** Thermal Engineering; Chemical Equilibrium; NASA Polynomials; Dissociation Numerical Reliability