

CONEM2024-0096

ANÁLISE NUMÉRICA DO COMPORTAMENTO DE COMBUSTÃO EM UM MODELO DE REATOR PERFEITAMENTE MISTURADO-PSR

Artur Fereguetti Silva, artur.fereguetti@ufv.br¹

Julio Cesar Costa Campos, julio.campos@ufv.br¹

Antônio Marcos de Oliveira Siqueira, antonio.siqueira@ufv.br¹

Henrique Marcio Pereira Rosa, Henrique.rosa@ufv.br¹

Rogério Fernandes Brito, rogbrito@unifei.edu.br²

Washington Orlando Irrazabal Bohorquez, wirraz@engenharia.ufjf.br³

¹Universidade Federal de Viçosa

²Universidade Federal de Itajubá

³Universidade Federal de Juiz de Fora

Resumo: Um reator perfeitamente misturado é um modelo proposto de reator ideal no qual a mistura completa entre reagentes e produtos da reação é alcançada no interior do reator. O modelo de reator perfeitamente misturado pode ser utilizado com o intuito de verificar diversos aspectos da combustão, como as condições de extinção de chama, o comportamento da combustão para diferentes razões de equivalência e o comportamento do índice de emissões de gases. Por meio da análise numérica, com o auxílio do software CHEMKIN, o objetivo desse estudo é utilizar um modelo de Reator Perfeitamente Misturado para obter conhecimento sobre a validade de utilização desse tipo de modelo computacional em estudos da combustão. Nesse sentido foi necessário comparar o comportamento teórico com o simulado de maneira a validar o referido estudo. Para isso, foram feitos estudos de caso determinando os mecanismos de reação e condições desejadas para o estudo da combustão em regime permanente no reator, o qual foi considerado adiabático. Além disso foi considerado o efeito da temperatura, pressão e volume, além da variação de outros parâmetros como a razão de equivalência e a vazão de massa. Com os resultados obtidos foi feita uma comparação com o teórico e a análise dos resultados. Os resultados obtidos para esse estudo foram a relação da vazão de massa de entrada no reator com a extinção da chama, a diferença no comportamento da combustão com base na variação da razão de equivalência e o comportamento do índice de emissões. Assim, foram obtidos resultados que demonstram qual será o comportamento esperado de uma reação de combustão dadas as condições nas quais as reações ocorrem. Pode-se concluir que é possível utilizar o modelo de Reator Perfeitamente Misturado e a análise numérica dos resultados para representar o comportamento dos mecanismos de reação em diferentes condições. Essa situação foi analisada considerando os diversos estudos de caso.

Palavras-chave: Combustão, Reator Perfeitamente Misturado, Extinção de Chama, Emissões

1. INTRODUÇÃO

Um reator perfeitamente misturado é um modelo de reator teórico no qual ocorre uma mistura completa dos reagentes. A solução para o modelo de Reator Perfeitamente Misturado pode ser feita por meio de uma solução 0D, ou seja, por métodos de solução numéricos que não levam em conta dimensões espaciais, tornando a solução do problema uniforme, o que simplifica a sua solução. Esse tipo de solução é desejável quando se trabalha com mecanismos com diversas reações químicas, por exemplo, para que seja necessário menor esforço computacional com o intuito de obter os resultados desejados. Por meio do estudo desse modelo, é possível compreender o comportamento de alguns fenômenos da combustão, incluindo a extinção de chama e emissões.

Importante destacar, no estudo de reatores perfeitamente misturado, a introdução de combustíveis originários de fontes alternativas, como por exemplo, o biodiesel entre outros vem sendo estudado por (Hilário et al., 2024) os resultados desses estudos em motores de combustão são excelentes, de acordo com (Albuquerque et al., 2023; Silva et al., 2024). É fato que os mecanismos de reação química são elevados o que sugere a utilização de simulação numérica para a solução. Portanto, a composição química de novos combustíveis é geralmente muito complexa e sua composição provavelmente varia dependendo das propriedades da matéria-prima inicial. Vários esforços estão sendo realizados para caracterizar adequadamente todas as propriedades relevantes dos combustíveis de nova geração

(Biagini et al., 2013). Em trabalhos anteriores, o papel da química na determinação da capacidade de uma mistura suportar perturbações em condições próximas à extinção em um PSR foi investigado (Marra e Martelli 2011, Acampora et al., 2012, Marra et al. 2015).

Após discussão teóricas e práticas de alguns autores sobre reator perfeitamente misturado o objetivo desse estudo é utilizar a simulação numérica, com auxílio do CHEMKIN, de um modelo de Reator Perfeitamente Misturado para obter conhecimento sobre a validade de utilização desse tipo de modelo computacional em estudos da combustão.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

Para a obtenção dos resultados numéricos e avaliação do comportamento dos fenômenos estudados foi utilizado o software CHEMKIN, por meio do qual é possível estabelecer os parâmetros que serão avaliados em cada estudo de caso, incluindo razão de equivalência, vazão de massa, volume do reator, entre outros. É válido notar que para os estudos de caso feitos neste trabalho, foi considerado um reator adiabático, ou seja, sem transferência de calor.

2.1. Mecanismos de reação

Com o intuito de realizar a análise dos comportamentos de combustão por meio de métodos numéricos, é importante determinar quais os mecanismos de reação serão avaliados. Os mecanismos de reação determinam o número de equações e espécies químicas que estabelecerão os caminhos de reação, de forma que a escolha de um mecanismo de reação adequado deve ser considerada para garantir que a previsão dos comportamentos seja a mais coerente possível. Conforme apresentado (Westbrook e Dryer, 1981), ao variar condições como temperatura e pressão, diferentes reações dos mecanismos de reação irão ocorrer.

O mecanismo de reação GRI-MECH 3.0 é um conjunto de regras e equações que descrevem as taxas de reação e os produtos formados em uma variedade de reações químicas relevantes para a combustão de hidrocarbonetos. Foi Desenvolvido pela Combustion Research Facility do Sandia National Laboratories, o GRI-MECH 3.0 é amplamente utilizado em modelos de combustão para simular e prever o comportamento de combustíveis em uma ampla gama de condições. Desta forma, neste trabalho, foi escolhido o mecanismo de reação GRI-MECH 3.0, usado para representar a combustão de gás natural, contando com 325 reações e 53 espécies químicas.

O gás natural é uma mistura de hidrocarbonetos predominantemente composta por metano (CH_4), mas também pode conter pequenas quantidades de outros hidrocarbonetos, como etano (C_2H_6), propano (C_3H_8), butano (C_4H_{10}) e traços de gases inertes como nitrogênio (N_2) e dióxido de carbono (CO_2).

Portanto, a fórmula química típica do gás natural é:
 $CH_4(\text{metano}) + C_2H_6(\text{etano}) + C_3H_8(\text{propano}) + C_4H_{10}(\text{butano}) + \text{traços de } N_2 \text{ e } CO_2$. É importante observar que a composição específica do gás natural pode variar dependendo da fonte e do processo de produção. No entanto, o metano é geralmente o componente predominante, representando a maior parte do gás natural extraído e utilizado comercialmente.

2.2. Reator Perfeitamente Misturado em regime permanente

Conforme Turns (2013), o equacionamento de um Reator Perfeitamente Misturado pode ser feito a partir da aplicação das leis de conservação da massa e conservação de energia, de forma que temos:

$$\frac{dm_{i,vc}}{dt} = \dot{m}_i''' V + \dot{m}_{i,ent} - \dot{m}_{i,sai} \quad (1)$$

Na qual “i” representa i-ésima espécie química no volume de controle, $\dot{m}_i''' V$ representa a taxa de produção mássica de i no volume de controle, $\dot{m}_{i,ent}$ é a vazão de massa que entra no reator e $\dot{m}_{i,sai}$ é a vazão de massa que sai do reator. A taxa de acumulação de i no volume de controle é representada por $\frac{dm_{i,vc}}{dt}$.

Além disso, é possível considerar:

$$\dot{m}_i = \dot{m} Y_i \quad (2)$$

$$\dot{m}_i''' V = \dot{\omega}_i MW_i \quad (3)$$

Em que Y_i é a fração molar de cada elemento i, $\dot{\omega}_i$ é a taxa de produção líquida de cada espécie e MW_i a massa molar da i-ésima espécie.

Considerando essas equações e o regime permanente no reator temos:

$$\dot{\omega}_i MW_i V + \dot{m}(Y_{i,ent} - Y_{i,sai}) = 0 \quad (4)$$

Ademais, a conservação de energia pode ser descrita por:

$$\dot{Q} = \dot{m}(\sum_{i=1}^N Y_{i,sai} h_i(T) - \sum_{i=1}^N Y_{i,ent} h_i(T_{ent})) \quad (5)$$

Em que

$$h_i(T) = h_{f,i}^0 + \int_{T_{ref}}^T c_{p,i} dT \quad (6)$$

Sendo $h_i(T)$ a entalpia da espécie “i” a uma temperatura T, $c_{p,i}$ o calor específico da espécie “i”, $h_{f,i}^0$ a entalpia de formação padrão da espécie “i”, $Y_{i,sai}$ a fração molar da espécie “i” que sai do reator, $Y_{i,ent}$ a fração molar da espécie “i” entrando no reator e \dot{Q} a taxa de variação de energia.

Outros parâmetros importantes para o estudo da combustão em um Reator Perfeitamente Misturado são a Razão de Equivalência e o Tempo de Residência, os quais podem ser dados, respectivamente, por:

$$\phi = \frac{(A/F)_{esteq}}{(A/F)} \quad (7)$$

$$\tau = \frac{\rho V}{\dot{m}} \quad (8)$$

Nas quais ϕ é a razão de equivalência, $(A/F)_{esteq}$ a razão entre ar e combustível estequiométrica e (A/F) a razão entre ar e combustível da mistura. Além do mais, τ é o tempo de residência médio, ρ a densidade da mistura, V e \dot{m} a vazão mássica da mistura no reator.

2.3. Validação

Para a validação de resultados que serão discutidos posteriormente, fez-se um estudo de caso para comparação de resultados já obtidos. Assim, para a validação dos resultados numéricos deste estudo, foi escolhido o estudo de limites de inflamabilidade. Com esse intuito, foi feita a simulação da reação de Propano com o ar (79% N₂ e 21% de O₂) em um Reator Perfeitamente Misturado e observado o comportamento dos limites de inflamabilidade. Embora o propano tenha um menor percentual quando comparado ao metano em relação ao gás natural, foi uma escolha dos pesquisadores para validar os seus dados.

Conforme Dwyer *et al.* (2003), os limites de inflamabilidade são a quantidade de combustível necessária para manter o processo de combustão, sendo estes o Limite de Inflamabilidade Inferior (LII) e o Limite de Inflamabilidade Superior (LIS). O Limite de Inflamabilidade Inferior está associado ao mínimo de combustível que deve estar presente na mistura para que a combustão ocorra, visto que há excesso de ar, enquanto o Limite de Inflamabilidade Superior representa a máxima quantidade de combustível que pode estar presente na mistura para que a reação ocorra, visto que há excesso de combustível.

Consoante Takahashi *et al.* (2003) a inflamabilidade pode ser afetada pelo volume e formato dos recipientes no qual ocorre a combustão, de forma que variar o volume do reator pode ter efeitos no limite de inflamabilidade da reação. Além disso, Galdini e Silva (2019) apresentaram um estudo dos limites de inflamabilidade de hidrocarbonetos por meio do cálculo do equilíbrio químico. Visto que em um Reator Perfeitamente Misturado ocorre a mistura da reação até que o equilíbrio químico seja alcançado, a comparação entre esses estudos se fez importante para a análise dos resultados numéricos e sua conformidade com a teoria.

Em um reator perfeitamente misturado, assume-se que a mistura de propano e ar é uniforme em todo o volume do reator e que as condições dentro do reator são as mesmas em todos os pontos. Isso permite uma análise simplificada da cinética e da composição dos produtos, facilitando a modelagem e a simulação do processo de combustão.

Portanto, foi simulada a reação de Propano(C₃H₈) com o ar em regime permanente em um reator perfeitamente misturado. Inicialmente, foram definidos volumes variados para o reator, temperatura de entrada dos gases de 298 K e temperatura inicial no reator de 1500 K. Além do mais, a análise foi feita para diferentes volumes de reatores, todos a uma pressão constante de 1 atm.

A Figura 1a apresenta os resultados obtidos para a Temperatura Adiabática de Chama em diferentes volumes de reator variando a razão de equivalência para as condições já descritas anteriormente. É possível notar que o comportamento das três curvas apresentadas nas Figs. 1(a) e (b) são similares. Inicialmente, para valores de $\phi < 0,45$, a reação de combustão não ocorre, de modo que os valores obtidos para essa faixa são iguais à temperatura de entrada dos gases no reator (298K). Essa constatação é evidenciada na Fig. 1a na parte inferior a esquerda da figura, entre 200 e 400 K em vermelho. Outra percepção é com relação a razão de equivalência próxima a 1. Nesta posição tem-se um pico com uma temperatura adiabática de chama em torno de 2300 K, aproximadamente. Nesta posição tem-se uma mistura estequiométrica. Para valores superiores a 1, ocorre o decaimento da temperatura adiabática de chama em virtude do aumento da razão de equivalência. Nesta posição é caracterizado como uma mistura rica, isto é, ocorre a predominância de excesso de combustível. Além disso pode-se perceber que para valores de $\phi > 2,1$, a reação de combustão deixou de acontecer para diferentes pontos de razão de equivalência, conforme fig. 1a no canto inferior a direita com cores azul, verde e vermelho caracterizando volumes de 0,3L, 0,4L e 0,5L respectivamente. Ainda, com

relação a esses volumes de modo que o valor de razão de equivalência, na qual a reação deixou de ocorrer aumentou conforme o volume do reator foi aumentado. Ao comparar as figs. 1(a) e 1(b) os valores do Propano são iguais a aproximadamente a 3 em relação a razão de equivalência e temperatura de chama adiabática.

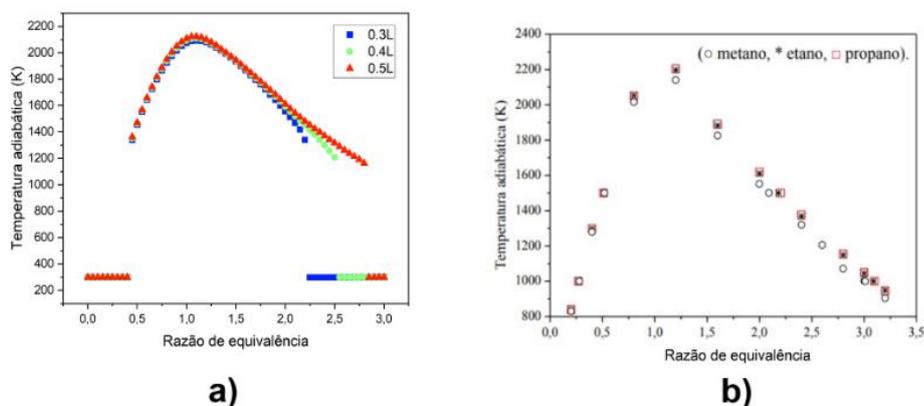


Figura 1. Temperatura Adiabática de Chama em função da Razão de Equivalência. (a) Fonte: autor. (b) Fonte: Galdini e Silva (2019) (Adaptada)

A Figura 1(b). (Galdini e Silva, 2019) representa os valores obtidos para a Temperatura Adiabática de Chama para o Metano (CH_4), Etano (C_2H_6) e Propano (C_3H_8) em função da razão de equivalência. É possível observar que em comparação à Fig. 1a o comportamento das curvas obtidas foi parecido, de modo que inicialmente, para baixos valores de Razão de Equivalência, a reação de combustão também não ocorre e, após a maior temperatura alcançada, os valores de temperatura começam a decrescer até que seja alcançado um valor de Razão de Equivalência alto o suficiente para que a reação deixe de ocorrer.

Na Figura 1(a), é possível perceber que para todos os volumes analisados, o Limite Inferior de Inflamabilidade do Propano (C_3H_8) foi o mesmo, porém o Limite de Inflamabilidade Superior mudou conforme a variação de volume. Galdini e Silva (2019) e Kondo *et al.* (2006), encontraram valores de Razão de Equivalência no Limite de Inflamabilidade Inferior do Propano iguais a 0,51 e 0,49, respectivamente. Enquanto os valores de Razão de Equivalência no Limite de Inflamabilidade Superior encontrados por esses autores foram iguais a 2,2 e 2,5, respectivamente. Para o estudo de caso feito no Reator Perfeitamente Misturado, consoante demonstrado na Fig. 1a, o valor da Razão de Equivalência no Limite de Inflamabilidade Inferior do Propano encontrado foi igual a 0,45, enquanto o Limite de Inflamabilidade Superior variou conforme o volume do reator. Para um reator de volume igual a 0,3 litros foi encontrado um valor de Razão de Equivalência no Limite de Inflamabilidade Superior igual a 2,2, enquanto para volumes iguais a 0,4 litros e 0,5 litros, foram encontrados valores de Razão de Equivalência iguais a 2,5 e 2,8, respectivamente. Assim, fica evidente que houve diferentes resultados de Limites de Inflamabilidade para diferentes volumes nos quais as reações ocorrem, assim como previsto por Takahashi *et al.* (2003).

Outro fato que pôde ser verificado foi que a máxima temperatura de chama para essa reação, conforme a Fig. 1a ocorreu a uma razão de equivalência igual a 1,05, o que está de acordo com os resultados demonstrados por Turns (2013). Ademais, tanto no trabalho demonstrado por Turns (2013), Galdini e Silva (2019) e na simulação apresentada na Fig. 1a, o máximo valor de Temperatura Adiabática de Chama alcançada foi um valor próximo a 2200K.

Com base nesses aspectos, é notório que os resultados obtidos estão próximos de resultados alcançados anteriormente em diferentes estudos. Dessa forma, é possível afirmar que os resultados obtidos neste estudo são válidos.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1. Extinção de chama por excesso de vazão

As condições em que uma reação química ocorre devem ser averiguadas para determinar se essa reação é possível. Para reações de combustão, é importante saber qual a vazão de massa será utilizada, visto que conforme Turns (2013), uma vazão demasiadamente grande pode causar a extinção de chama em um Reator Perfeitamente Misturado. O aumento da velocidade de escoamento provoca o fenômeno de levantamento da chama até que o escoamento atinja uma velocidade crítica, na qual ocorre a extinção de chama, assim ocorre a extinção de chama por excesso de vazão.

Com o objetivo de prever o momento de extinção de chama, foi utilizado o Metano (CH_4) como combustível reagindo com o a uma razão de equivalência igual a 1 em um modelo de Reator Perfeitamente Misturado de 1 litro a 1atm. Foi definida uma temperatura de entrada de 1450K. Dessa forma, a vazão mássica de entrada da mistura de ar e combustível foi variada de forma a identificar o ponto em que ocorre a extinção de chama. A Figura 2 mostra a

temperatura alcançada pela combustão de CH₄ para diferentes vazões de massa. É possível observar que a temperatura se mantém em valores elevados antes do momento de extinção de chama, de modo que a partir de 0,45Kg/s a temperatura final no reator se iguala à temperatura de entrada no reator (1450K).

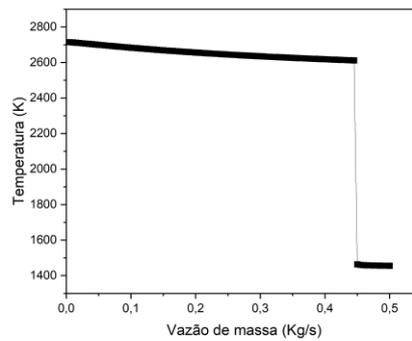


Figura 2. Temperatura alcançada no reator em função da vazão de massa (Fonte: autor)

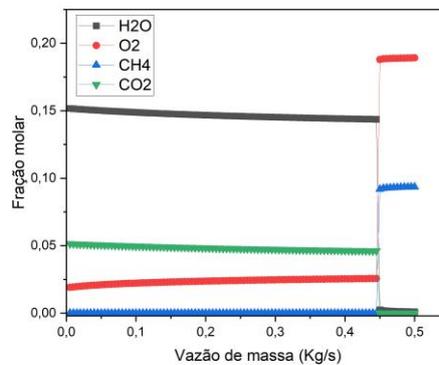


Figura 3. Frações molares em função da vazão de massa (Fonte: autor)

A Figura 3 mostra os valores das frações molares de reagentes e produtos da reação (com exceção de N₂), demonstrando que no momento de extinção de chama, a formação de produtos (CO₂ e H₂O), deixa de ocorrer. Além do mais, as frações molares de CH₄ e O₂ (reagentes) se igualam à fração molar de entrada no reator e as frações molares de H₂O e CO₂ (produtos de uma combustão completa) se tornam nulas, o que caracteriza a ausência de reação, visto que não há formação de produtos. Assim, para esse ponto específico, ocorre a extinção de chama por excesso de vazão.

Conforme Broadwell *et al.* (1984) a extinção de chama ocorre porque o tempo de reação dado para que a ignição aconteça chega a um valor menor que o valor necessário para manter a reação. Conforme a equação do tempo de residência médio, Eq. (8), quanto maior o valor da vazão de massa da mistura, menor o tempo de residência. Assim, a extinção de chama por excesso de vazão em um Reator Perfeitamente Misturado pode ser associada à diminuição do tempo de residência conforme o aumento da vazão. As Figuras 4(a) e (b) representam o comportamento do valor do Tempo de Residência em função da vazão de massa e razão de equivalência. É perceptível que o valor do tempo de residência decresce conforme o aumento da vazão de massa até que o valor limite de tempo de residência seja atingido. Também é perceptível que há um decréscimo no tempo de residência conforme a razão de equivalência aumenta. Na fig. 4(a) verifica-se que vazões baixas ocasionam um tempo de residência elevado, aproximadamente 0,025s, da mesma forma, na fig. 4(b) esse tempo seria de 0,00115s em relação a razão de equivalência de 0,05. Isso é para garantir a segurança do processo, especialmente em reações exotérmicas que podem gerar calor excessivo. Um tempo de residência prolongado pode permitir uma dissipação adequada do calor gerado pela reação, ajudando a evitar o superaquecimento do reator e a ocorrência de reações indesejadas. Mas, em contrapartida pode favorecer a conclusão da reação química. Desta forma, o tempo de residência deve ser cuidadosamente controlado e ajustado de acordo com os requisitos específicos do processo.

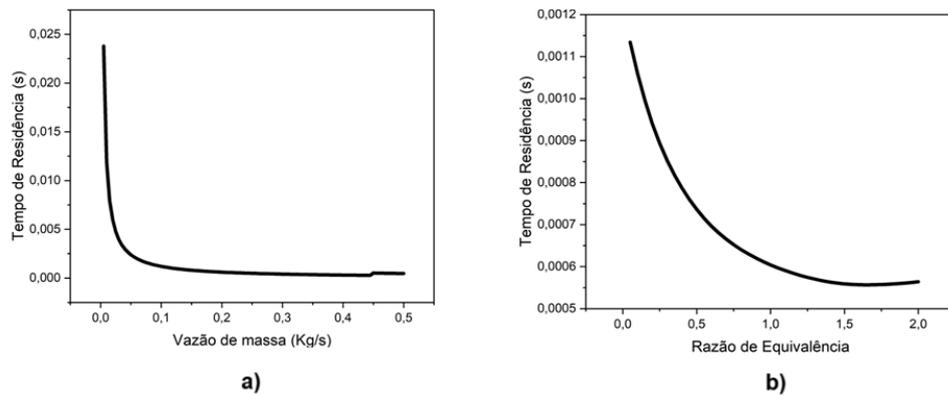


Figura 4. Tempo de Residência (Fonte: autor) (a) Em função da vazão de massa (b) Em relação à Razão de Equivalência

Outro fator importante que tem sido estudado em Reatores Perfeitamente Misturados são as curvas-“S”, curvas nas quais é avaliado o tempo de residência e sua relação com a extinção e ignição em fenômenos de combustão. De acordo com os pesquisadores, (Shan e Lu, 2012; Acampora e Marra, 2015; Acampora *et al.* 2015; Kooshkbaghi *et al.* 2015) os pontos de ignição e extinção de combustão podem ser representados por pontos de inflexão nas curvas-“S”. Ainda em concordância com Shan e Lu (2012) e Kooshkbaghi *et al.* (2015) a parte superior das curvas-“S” representam “chamas em forte estado de combustão” e o ponto de inflexão da parte superior da curva representa a extinção de chama, visto que a reação de combustão não pode ser mantida para um tempo de residência menor que esse ponto de inflexão, o que mais uma vez, torna evidente a relação do tempo de residência com a extinção de chama.

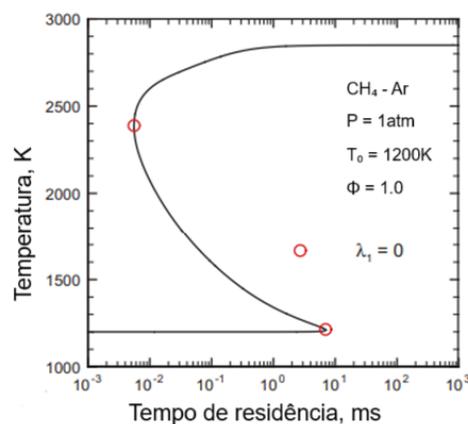


Figura 5. Curva-“S” obtida para a combustão de Metano com o ar (Fonte: Shan e Lu, 2012) (Adaptada)

A Figura 5 (Shan e Lu, 2012) mostra uma Curva- “S” obtida para CH₄ a pressão de 1atm e temperatura de entrada de 1200K. Note que as curvas- “S” são dadas pela temperatura alcançada no reator em função do tempo de residência. Os pontos demarcados em vermelho na Fig. 5 são os pontos de inflexão da curva. O ponto de inflexão superior representa o ponto de extinção de chama, enquanto o ponto de inflexão inferior representa o ponto de ignição.

Com base nesses aspectos teóricos, pode-se considerar que a utilização de um modelo numérico de um Reator Perfeitamente Misturado é capaz de prever o momento de extinção de chama por excesso de vazão em concordância com a diminuição do tempo de residência, previsto pela Eq. (8) e pelo comportamento da curva-“S”, o qual demonstra que, com a diminuição do tempo de residência, pode ocorrer a extinção de chama.

3.2. Efeitos da razão de equivalência

Como apresentado anteriormente, a razão de equivalência é um parâmetro importante para a compreensão dos processos de combustão. Por meio desta, é possível ter noção sobre o Limite de Inflamabilidade Inferior e o Limite de Inflamabilidade Superior. Para estudar os efeitos da razão de equivalência para diferentes combustíveis; Metano (CH₄), Etano (C₂H₆) e Propano(C₃H₈), manteve-se volume e pressão constantes no reator, uma temperatura de entrada igual a 298K, também constante, enquanto a razão de equivalência foi diferente para cada solução.

A Figura 6 demonstra os resultados de temperatura obtidos para esses combustíveis em função da razão de equivalência. Para $\phi < 1$, há excesso de ar, de modo que, para valores de Razão de Equivalência abaixo de 0,45, a reação não ocorre, visto que não há combustível suficiente para que o processo de combustão ocorra. Além do mais,

no intervalo observado, apenas o Limite de Inflamabilidade Superior do Metano foi alcançado, visto que, observando os resultados obtidos na Fig. 6 para o Etano e o Propano, as temperaturas não caem diretamente para valores iguais a 298K, demonstrando que a reação de combustão ainda ocorre. Para os três combustíveis analisados, conforme a Fig. 6, observou-se que a maior temperatura de chama adiabática foi alcançada a uma razão de equivalência igual 1,05.

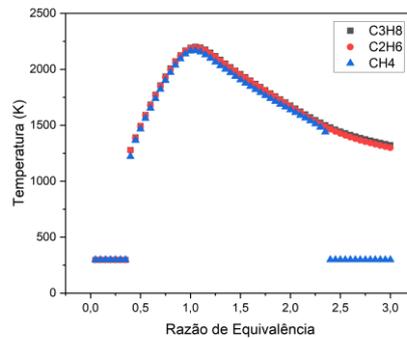


Figura 6. Temperaturas alcançadas em diferentes razões de equivalência para Metano, Etano e Propano (Fonte: autor)

3.3. Índice de emissões

Outro estudo importante na área da combustão são os índices de emissões. Preocupações com mudanças climáticas têm sido um motivo para pesquisas na área e levar países e organizações internacionais a buscar formas de reduzir emissões, como expressado por Ang e Goh (2019). Consoante Lebedev *et al.* (2009) as características dos processos que ocorrem nos mecanismos de reação podem ser utilizadas para avaliar os índices de emissões de NO_x, CO_x e SO_x. Como discorrido por Azami *et al.* (2019), existem esforços no sentido de melhorar a eficiência de combustíveis e diminuir as emissões de gases de efeito estufa, incluindo estudos sobre biocombustíveis. Além do mais, há estudos que buscam entender o comportamento de emissões quando há diluição do combustível ou recirculação de gases, a exemplo do estudo feito por Fackler *et al.* (2011), o qual afirma que o mecanismo GRI-MECH 3.0 prevê os dados de emissão experimentais de NO_x satisfatoriamente.

No entanto, em condições reais, podem ocorrer reações secundárias que levam à formação de outros produtos indesejados, como monóxido de carbono (CO) e óxidos de nitrogênio (NO_x). Essas reações secundárias são influenciadas por vários fatores, incluindo temperatura, pressão, taxa de mistura, tempo de residência e outros.

Para determinar o índice de emissões de poluentes em um reator perfeitamente misturado, é necessário realizar simulações computacionais ou experimentos em laboratórios para avaliar a influência desses fatores nas emissões de poluentes atmosféricos. Essas análises são essenciais para o desenvolvimento de estratégias de controle de poluição e para garantir a conformidade com regulamentações ambientais. Portanto, o índice de emissões de poluentes em um reator perfeitamente misturado pode ser avaliado com base nas condições operacionais do reator, na composição dos reagentes e nas características das reações químicas que ocorrem no interior dele. Para determinar os níveis de emissão de poluentes, é necessário considerar os seguintes fatores: composição dos reagentes, cinética das reações, temperatura, pressão e razão de equivalência.

Para a avaliação dos índices de emissões, foi feita a análise da combustão de CH₄ misturada com diferentes frações de Hidrogênio (H₂), para que os efeitos da adição de H₂ nos índices de emissões pudesse ser avaliado. Conforme Meziane e Bentebiche (2019), é possível diminuir as emissões de CO em detrimento do aumento das emissões de NO_x com a adição de H₂ ao gás natural.

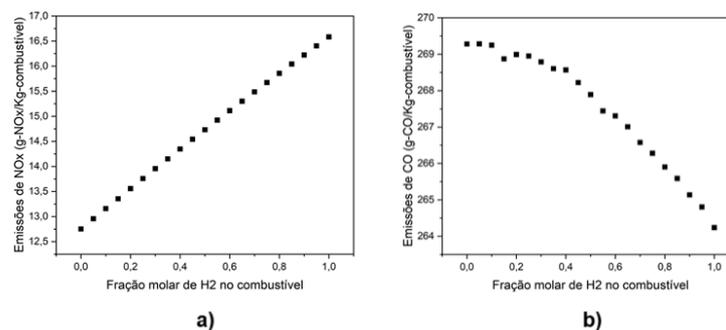


Figura 7. Emissões com base na adição de H₂ (Fonte: autor) (a) Emissões de NO_x. (b) Emissões de CO

A Figura 7(a) demonstra que, com a adição de H₂ a CH₄, a quantidade de emissões de NO_x aumenta, enquanto a Fig. 7(b) mostra a diminuição das emissões de CO com o aumento da quantidade de H₂ na mistura de combustível.

Assim, a diminuição de CO ocorreu como previsto por Rajpara *et al.* (2018) que demonstrou os efeitos da adição de H₂ na combustão de CH₄, afirmando que a adição de H₂ pode ser uma vantagem em termos de velocidade de chama, temperatura e emissões de CO. Ademais, como relatado por Burbano *et al.* (2008), a adição de H₂ ao Metano é capaz de aumentar a concentração de radicais OH, os quais favorecem a oxidação de radicais CO, formando CO₂, de forma que a adição de H₂ a CH₄ diminui as emissões de CO, o que também pôde ser observado nesse estudo de caso.

A Figura 8 mostra o aumento da temperatura alcançado pela combustão do combustível em função da fração molar de H₂ presente no combustível. Como discorrido por Habib *et al.* (2007), a formação de NO_x se dá principalmente pela existência de dois mecanismos conhecidos em inglês como “Prompt NO_x” e “Thermal NO_x”. A formação de NO_x relacionada ao Thermal NO_x é afetada pela temperatura em que ocorre a combustão e pela concentração de O₂, de forma que aumentar a temperatura ou a concentração de O₂ favorecem esse mecanismo, aumentando a formação de NO_x. Para esse estudo de caso, tal fato pôde ser observado, visto que a adição de H₂ a CH₄ aumentou o regime de temperatura e conseqüentemente, pode ter favorecido a formação de NO_x tendo como base o mecanismo Thermal NO_x.

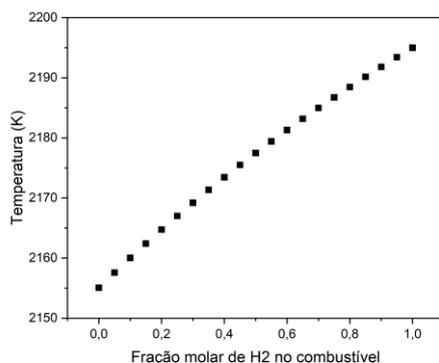


Figura 8. Temperatura com base na fração molar de H₂ (Fonte: autor)

4. CONCLUSÃO

A partir dos resultados apresentados, Reatores Perfeitamente Misturados podem ser utilizados para compreender vários aspectos da combustão. Além disso esses reatores são utilizados para obter parâmetros de cinética química.

A análise do tempo de residência em reatores perfeitamente misturados é essencial para garantir a eficiência, segurança e controle adequado de processos químicos e reações. Um tempo de residência bem ajustado pode maximizar a conversão da reação, minimizar a formação de produtos indesejados e garantir um desempenho consistente e seguro do reator ao longo do tempo.

Em relação ao mecanismo de reação GRI-MECH 3.0 é uma ferramenta poderosa para modelar e simular processos de combustão de hidrocarbonetos. Ele fornece uma representação detalhada das reações químicas envolvidas na combustão, permitindo uma análise precisa do desempenho de sistemas de combustão e a otimização de processos industriais relacionados à energia.

Portanto, mais esforços de investigação serão dedicados para identificar o nível mínimo de complexidade de um mecanismo químico tem que ter para investigar corretamente fenômenos de combustão dinâmica.

Com base nos estudos de caso demonstrados e comparação com a teoria, pode-se concluir que o uso de um modelo numérico de Reator Perfeitamente Misturado para a compreensão de processos de combustão se revelou condizente com resultados obtidos anteriormente e resultados esperados pela teoria, tendo como base as discussões feitas acerca da extinção de chama por excesso de vazão, razão de equivalência e índice de emissões.

5. AGRADECIMENTOS

This paper was carried out with the support of the Minas Gerais State Research Support Foundation (FAPEMIG) and Arthur Bernardes Foundation (FUNARBE) - Process PPE-00023-21, Government of Minas Gerais - Seinfra-MG, Railway Technological Development Nucleo of the State of Minas Gerais -NDF.

6. REFERÊNCIAS

- ALBUQUERQUE, José Eduardo de, SANTIAGO, Bruno C. L., CAMPOS, Júlio César C., REIS, Alexandre M., SILVA, Charles L. da, MARTINS, João Paulo and COIMBRA, Jane S. R. Photoacoustic Spectroscopy as an Approach to Assess Chemical Modifications in Edible Oils. *J. Braz. Chem. Soc.*, Vol. 24, No. 3, 369-374, 2013. <https://doi.org/10.5935/0103-5053.20130047>. Acesso 30 mar de 2024.
- ACAMPORA, L.; FRANCESCO SAVERIO MARRA. Numerical strategies for the bifurcation analysis of perfectly stirred reactors with detailed combustion mechanisms. *Computers & Chemical Engineering*, v. 82, p. 273–282, 1 nov. 2015.
- ACAMPORA, L.; MANCUSI, E.; MARRA, F. S. Bifurcation Analysis of Perfectly Stirred Reactors with Large Reaction Mechanisms. *DOAJ (DOAJ: Directory of Open Access Journals)*, 1 maio 2015.
- ACAMPORA, L., MARRA, F. S. and MARTELLI, E., Non-linear response to periodic forcing of methane-air in continuous stirred tank reactors, XXXV Meeting of the Italian Section of the Combustion Institute, 2012.
- ANG, B. W.; GOH, T. Index decomposition analysis for comparing emission scenarios: Applications and challenges. *Energy Economics*, v. 83, p. 74–87, set. 2019.
- AZAMI, M. H. et al. Modelling the performance of aero-gas turbine engine using algae-based biofuel with emission prediction. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, v. 488, p. 012007, 19 mar. 2019.
- BROADWELL, J. E.; DAHM, W. J. A.; MUNGAL, M. G. Blowout of turbulent diffusion flames. *Symposium (International) on Combustion*, v. 20, n. 1, p. 303–310, jan. 1985.
- BURBANO, H. J.; AMELL, A. A.; GARCÍA, J. M. Effects of hydrogen addition to methane on the flame structure and CO emissions in atmospheric burners. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 33, n. 13, p. 3410–3415, 1 jul. 2008.
- DWYER, J.; HANSEL, J. G.; PHILIPS, T. Temperature Influence on the Flammability Limits of Heat Treating Atmospheres. 1 jan. 2003.
- GALDINI, Jéssica & Akisawa Silva, Luciana. (2019). DETERMINAÇÃO DOS LIMITES DE INFLAMABILIDADE DE HIDROCARBONETOS POR MEIO DO CÁLCULO DO EQUILÍBRIO QUÍMICO.
- HABIB, M. A.; ELSHAFEI, M.; DAJANI, M. Influence of combustion parameters on NO_x production in an industrial boiler. *Computers & Fluids*, v. 37, n. 1, p. 12–23, jan. 2008.
- HILÁRIO, C. V.; CAMPOS, J. C. C.; SIQUEIRA, A. M. de O.; LEITE, M. de O.; MARTINS, M. A.; BRITO, R. F.; FETUGA, I. A.; ABDERRAHMANE, K. Physical-Chemical Properties of First-Generation Biofuel Aiming Application in Diesel Locomotive. *Revista de Gestão Social e Ambiental, São Paulo (SP)*, v. 18, n. 5, p. e05080, 2024. DOI: 10.24857/rgsa.v18n5-042. Disponível em: <https://rgsa.emnuvens.com.br/rgsa/article/view/5080>. Acesso em: 30 mar. 2024.
- K. BOYD FACKLER et al. Experimental and Numerical Study of NO_x Formation From the Lean Premixed Combustion of CH₄ Mixed With CO₂ and N₂. *Journal of engineering for gas turbines and power*, v. 133, n. 12, 1 set. 2011.
- KONDO, S. et al. Flammability limits of multi-fluorinated compounds. *Fire Safety Journal*, v. 41, n. 1, p. 46–56, 1 fev. 2006.
- LEBEDEV, A. B. et al. Modeling study of gas-turbine combustor emission. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 32, n. 2, p. 2941–2947, 1 jan. 2009.
- MARRA, F. S., ACAMPORA, L. and MARTELLI, E., Non-linear response to periodic forcing of methane-air global and detailed kinetics in continuous stirred tank reactors close to extinction conditions, *International Journal of Spray and Combustion Dynamics* 7(3), 175–208, 2015.
- MARRA, F. S. and MARTELLI, E.: 2011, Non-linear response to periodic forcing of methane-air global and detailed kinetics in perfectly stirred reactors, 23th ICDERS, International Colloquium on the Dynamics of Explosion and Reactive System, University of California, Irvine - July 24–29, 2011.
- MAHDI KOOSHKBAGHI et al. n-Heptane/air combustion in perfectly stirred reactors: Dynamics, bifurcations and dominant reactions at critical conditions. *Combustion and Flame*, v. 162, n. 9, p. 3166–3179, 1 set. 2015.
- MEZIANE, S.; BENTEBBICHE, A. Numerical study of blended fuel natural gas-hydrogen combustion in rich/quench/lean combustor of a micro gas turbine. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 44, n. 29, p. 15610–15621, jun. 2019.
- RAJPARA, P.; SHAH, R.; BANERJEE, J. Effect of hydrogen addition on combustion and emission characteristics of methane fuelled upward swirl can combustor. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 43, n. 36, p. 17505–17519, 6 set. 2018.
- SILVA, J. A. da ; SILVA, L. P. da ; CAMPOS, J. C. C. ; SIQUEIRA, A. M. de O. ; GURGEL, A. ; GÓMEZ, L. C. Dynamic mesh analysis by numerical simulation of internal combustion engines. *REM - International Engineering Journal*, v. 77, p. 27-37, 2024. <https://doi.org/10.1590/0370-44672023770003>. Acesso em 30 mar.2024.
- SHAN, R.; LU, T. Ignition and extinction in perfectly stirred reactors with detailed chemistry. *Combustion and Flame*, v. 159, n. 6, p. 2069–2076, 1 jun. 2012.
- TAKAHASHI, A. et al. Effect of vessel size and shape on experimental flammability limits of gases. *Journal of Hazardous Materials*, v. 105, n. 1-3, p. 27–37, 1 dez. 2003.

TURNER, S. Introdução à Combustão: Conceitos e Aplicações. Tradução: Amir Júnior. London: Mcgraw-Hill Education - Europe, 2013.

WESTBROOK, C. K.; DRYER, F. L. Chemical kinetics and modeling of combustion processes. Symposium (International) on Combustion, v. 18, n. 1, p. 749–767, 1981.

7. RESPONSABILIDADE AUTORAL

Os trabalhos escritos em português ou espanhol devem incluir (após direitos autorais) título, os nomes dos autores e afiliações, o resumo e as palavras-chave, traduzidos para o inglês e a declaração a seguir, devidamente adaptada para o número de autores.

O(s) autor(es) é(são) o(s) único(s) responsável(is) pelo conteúdo deste trabalho.

NUMERICAL ANALYSIS OF THE BEHAVIOR OF COMBUSTION IN A PERFECTLY STIRRED REACTOR MODEL-PSR

Artur Fereguetti Silva, artur.fereguetti@ufv.br¹

Julio Cesar Costa Campos, julio.campos@ufv.br¹

Antônio Marcos de Oliveira Siqueira, antonio.siqueira@ufv.br¹

Henrique Marcio Pereira Rosa, Henrique.rosa@ufv.br¹

Rogério Fernandes Brito, rogbrito@unifei.edu.br²

Washington Orlando Irrazabal Bohorquez, wirraz@engenharia.ufjf.br³

¹Universidade Federal de Viçosa

²Universidade Federal de Itajubá

³Universidade Federal de Juiz de Fora

Abstract. *A perfectly stirred reactor is a proposed model of an ideal reactor in which complete mixing between reactants and reaction products is achieved within the reactor. The perfectly stirred reactor model can be used to verify various aspects of combustion, such as flame extinguishing conditions, combustion behavior for different equivalence ratios and the behavior of the gas emission index. Through numerical analysis, with the aid of the CHEMKIN software, the objective of this study is to use a Perfectly Stirred Reactor model to obtain knowledge about the validity of using this type of computational model in combustion studies. In this sense, it was necessary to compare the theoretical behavior with the simulated one in order to validate the aforementioned study. For this, case studies were conducted determining the reaction mechanisms and desired conditions for the study of steady-state combustion in the reactor, which was considered adiabatic. Furthermore, the effect of temperature, pressure and volume were considered, in addition to the variation of other parameters such as the equivalence ratio and mass flow rate. With the results obtained, a comparison was made with the theory and the results were analyzed. The results obtained for this study were the relationship between the mass flow rate entering the reactor and the flame extinction, the difference in combustion behavior based on the variation in the equivalence ratio and the behavior of the emission index. Thus, results were obtained that demonstrate what the expected behavior of a combustion reaction will be given the conditions under which the reactions occur. It can be concluded that it is possible to use the Perfectly Stirred Reactor model and numerical analysis of the results to represent the behavior of reaction mechanisms under different conditions. This situation was analyzed considering the different case studies.*

Keywords: *Combustion, Perfectly Stirred Reactor, Flame Extinction, Emissions*