

## **DESENVOLVIMENTO DE UMA FERRAMENTA COMPUTACIONAL PARA CÁLCULO DA CONCENTRAÇÃO DE POLUENTES GERADOS A PARTIR DA COMBUSTÃO DO GÁS NATURAL**

Douglas Moreira Ribeiro Junior<sup>1</sup>; Jefferson Santos Silva<sup>2</sup>; Hernandes de Souza Brandão<sup>3</sup>;  
Robson Rodrigues da Silva<sup>4</sup>

1. Estudante do curso de Engenharia Química; e-mail: douglas.moreira121@hotmail.com
2. Estudante do curso de Engenharia Química; e-mail: je\_grave@hotmail.com
3. Professor da Universidade de Mogi das Cruzes; e-mail: hernadesbrandao@uol.com.br
4. Professor da Universidade de Mogi das Cruzes; e-mail: robson.silva@umc.com

Área do conhecimento: **Engenharia Química**

**Palavras-chave:** Gás natural; cinética; Python; termodinâmica; combustão.

### **INTRODUÇÃO**

Um dos mais importantes campos de estudo no conjunto das ciências e da tecnologia é, com toda certeza, o dos combustíveis e de sua combustão. A grande atividade industrial atual tornou-se realidade pelo sempre crescente fornecimento de energia, que se pode ser utilizada de forma conveniente como energia calorífica, obtida através de combustíveis (HILSDORF, 2016). Por outro lado, os efeitos das emissões de gases na atmosfera são cada dia mais evidentes. Sob pressão de órgãos não-governamentais (ONG) ambientalistas, uma legislação tem sido apresentada aos governos federais restringindo a quantidade de poluentes emitidos da queima de combustíveis fósseis. Surge então a necessidade de um controle, influenciando assim um grau maior de desenvolvimento da tecnologia, para minimizar esses efeitos adversos (SPIRO; STIGLIANI, 2009). De todas as formas de geração de energia, pode-se citar a combustão do gás natural. Esse gás é constituído da mistura de gás metano com pequenas quantidades de hidrocarbonetos gasosos mais pesados, como etano, propano e butano, e pode ser liquefeito a baixas temperaturas para transporte em navios (BRAGA et al, 2005). Em relação a geração de eletricidade podem ser utilizadas turbinas a gás, operando como turbinas a jato (BRAGA et al, 2005). Não há um modelo global de mecanismo de combustão que atenda a todas as condições de operação. Para cada reação elementar escreve-se a expressão da lei de velocidade, formando um sistema de equações diferenciais acopladas, constituindo assim um modelo matemático capaz de estimar as concentrações de poluentes primários gerados a partir da combustão do gás natural. Nesse contexto, o objetivo do presente trabalho é desenvolver, a partir de um modelo matemático, uma ferramenta computacional, com interface amigável, capaz de calcular a concentração de poluentes primários gerados com a combustão do gás natural de composição majoritariamente metano, etano e propano. A finalidade principal dessa ferramenta é que possa ser utilizada nas aulas do curso de Química e Engenharia Química, complementando assim o ensino dos princípios básicos da cinética química.

### **OBJETIVOS**

Este trabalho teve por objetivo realizar uma pesquisa sobre os possíveis mecanismos de reação que podem ser responsáveis pela combustão do gás natural e a partir das informações coletadas desenvolver uma ferramenta computacional que forneça uma previsão da concentração dos poluentes gerados na combustão.

## METODOLOGIA

A execução deste projeto foi desenvolvida em três etapas. Na etapa inicial foram realizadas pesquisas sobre fundamentação teórica do tema (Apêndice A). O modelo matemático foi desenvolvido a partir da construção dos mecanismos de reações (Apêndice B). A validação desse mecanismo de reação (Apêndice D) foi baseada na lei de Hess (CHANG, 2010). Também foi de suma importância conhecer a temperatura máxima alcançada na combustão que por definição é a temperatura que atingiria os fumos se toda energia despreendida da combustão somada com os calores sensíveis dos reagentes fosse utilizada exclusivamente para o aquecimento, sem haver perdas de calor (HILSDORF, 2016). Por fim foram estudados os métodos numéricos responsáveis pela resolução dos sistemas de equações diferenciais acopladas, implementadas no modelo a partir da resolução cinética dos mecanismos de reação.

A segunda etapa do processo constitui-se no desenvolvimento dos mecanismos de reações (Apêndice B), do sistema de equações diferenciais acopladas, que descreve o modelo, e do cálculo da temperatura máxima teórica de combustão.

Assim na terceira e última etapa da pesquisa foi implementada uma ferramenta computacional na linguagem de programação Python. Essa linguagem foi escolhida por ser muito utilizada atualmente pela comunidade científica, além de ser “OpenSource” e possuir várias ferramentas que nos auxiliaram no desenvolvimento da interface gráfica para o usuário e todas as resoluções matemáticas do mecanismo, como por exemplo a biblioteca ODEINT que nos permitiu resolver os sistemas de equações diferenciais acopladas.

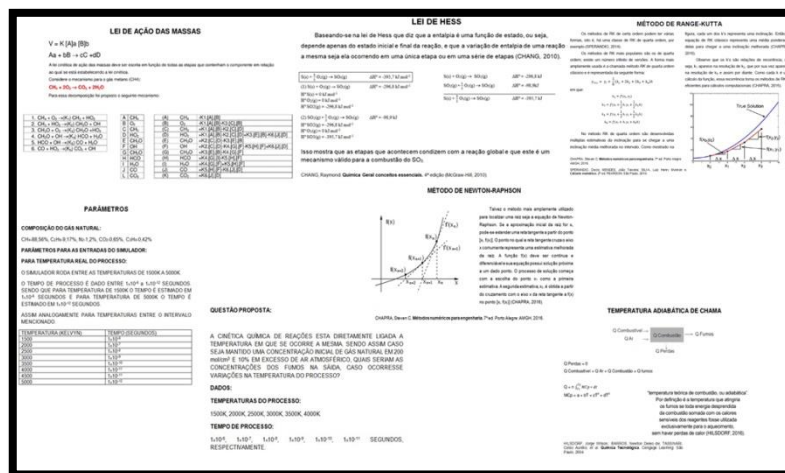
## RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Figura 1 traz a tela inicial da ferramenta computacional. Ela possui quatro menus: Parâmetros, Simulador, Teoria e Atividade. No menu “Parâmetros” é apresentado algumas dicas para o melhor funcionamento do simulador como máxima temperatura e tempo de combustão, a ferramenta abrange uma temperatura de 1500 a 5000 Kelvin e o tempo de processo se dá no intervalo entre  $1 \times 10^{-6}$  a  $1 \times 10^{-12}$  segundos, em “Simulador” é possível optar por trabalhar com a temperatura adiabática ou real. Já no menu “Teoria” é possível visualizar informações que nos auxiliam a entender melhor o funcionamento e as teorias que compuseram o trabalho, como por exemplo: método de Range-Kutta, Newton-Raphson, lei de Hess, entre outras, e por fim no menu “Atividade” ele sugere um exercício para colocar em prática o funcionamento do simulador. Os menus “Parâmetros”, “Teoria” e “Atividade” estão representados na Figura 2.

Figura 1 – Tela inicial do simulador

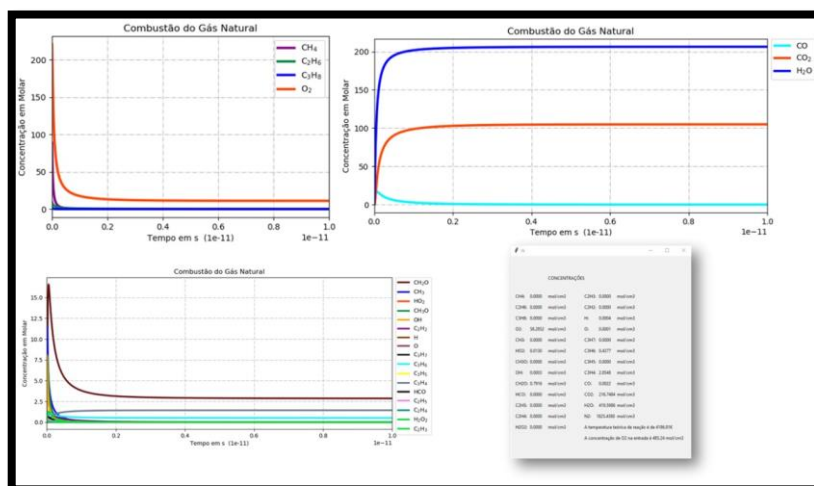


Figura 2 – Telas de ajuda e teorias



Após definido os parâmetros de simulação como temperatura e tempo de combustão, o usuário inicia o programa que assim irá apresentar os gráficos correspondentes as concentrações geradas pela combustão e também os valores dessas concentrações segundo a ilustrado na Figura 3.

**Figura 3** – Gráficos e valores numéricos da simulação



A combustão de combustíveis hidrocarbonetos consiste primeiramente numa fragmentação sequencial da molécula combustível inicial em espécies intermediárias menores as quais são convertidas nos produtos finais, usualmente H<sub>2</sub>O e CO<sub>2</sub>. Em muitos casos esses intermediários podem ser os próprios combustíveis. Por exemplo, etileno (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>) é um importante intermediário na combustão do propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>) e outros hidrocarbonetos pesados, mas o etileno pode ser também um combustível primário. Monóxido de carbono (CO) e hidrogênio (H<sub>2</sub>) são espécies comuns que são observadas durante a oxidação de todos os hidrocarbonetos, e o mesmo serve para os radicais H, O, OH, HO<sub>2</sub>, HCO. Essas observações foram usadas para estabelecer os mecanismos cinéticos das reações de combustão (WESTBROOK; DRYER, 1984). Este trabalho segue a teoria dos radicais livres, onde com a queima do combustível é iniciada com reações em cadeia e com velocidades proporcionais à concentração dos reagentes e a temperatura da câmara de combustão. Reações em cadeia envolvem a formação de espécies químicas, radicais que consecutivamente reagem produzindo outro radical. Esse radical, por sua vez, reage formando outro radical. Esse conjunto de fatos, ou reações em cadeia, permanece até que uma reação envolvendo a produção de moléculas estáveis a partir de dois radicais quebre a cadeia. (TURNS, 2013).

Para o problema abordado neste trabalho forma-se um conjunto de equações que se acoplam com os princípios de conservação da massa, quantidade de movimento linear e energia, além das equações de estado e quaisquer relações complementares, para formar um sistema de equações que pode ser integrado numericamente utilizando um computador. (TURNS, 2013). Com base nos dados já citados referentes ao mecanismo de combustão do gás natural proposto, pode estar ocorrendo emissões de formaldeído (CH<sub>2</sub>O) e outros radicais livres para a atmosfera. A formação de formaldeído está diretamente relacionada com a razão de equivalência na mistura oxidante/combustível (SANTOS, 2016), contudo, realizando-se variações nos parâmetros de entrada da combustão, foi observado que quanto maior a temperatura da câmara de combustão maior são as emissões de formaldeído.

## CONCLUSÃO

A ferramenta elaborada nos permite calcular a concentração dos produtos de saída da combustão e a sua temperatura de operação de uma maneira rápida e pratica, além de exibir graficamente o consumo dos reagentes e a produção dos fumos ao longo do tempo. Como o trabalho foi elaborado baseado em hipóteses simplificadoras (sem a formação de carvão e com o gás nitrogênio (N<sub>2</sub>) como inerte), ele se mostra uma ótima ferramenta para fins

didáticos, pois é possível fazer diversas simulações e exibir as relações existentes em uma combustão.

## REFERÊNCIAS

BRAGA, B. *et al.* **Introdução à Engenharia Ambiental**. Pearson Pratices Hall: São Paulo, 2005.

CHANG, Raymond. **Química Geral conceitos essenciais**. 4ª edição (McGraw-Hill, 2010)

HILSDORF, Jorge Wilson.; BARROS, Newton Deleo de; TASSINARI, Celso Aurélio; *et al.* **Química Tecnológica**. Cengage Learning: São Paulo, 2004

NETTO, João Cardoso Pereira. **Reflexões sobre conceitos da Cinética Química e do Equilíbrio Químico**. Edição do Autor: Mogi das Cruzes, 2004.

SANTOS, A. A. B.;\* dos Santos, F. N.; TORRES, E. A.; PEREIRA, P. A. P. **Avaliação das Taxas de Emissão de Formaldeído e Acetaldeído em Chamas de Gás Natural Confinado com OEC**. *Rev. Virtual Quim.*, 2016, 8 (4), 1181-1191. Data de publicação na Web: 9 de agosto de 2016

SPIRO, T. G.; STIGLIANI, W. M. **Química Ambiental**. Pearson Pratices Hall: São Paulo, 2009.

TURNIS, Stephen R. **Introdução à combustão: conceitos e aplicações**. 3ª ed. AMGH: Porto Alegre, 2013.

WESTBROOK, Charles K.; DRYE, Frederick L. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion. **Prog. Energy Combust.** Vol. 10, pp. 1-57. Set. 1984.