

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

MEDIÇÃO DA VELOCIDADE DE QUEIMA LAMINAR DE BIOGÁS E GÁS DE  
SÍNTESE ATRAVÉS DO MÉTODO DO FLUXO DE CALOR E COMPARAÇÃO COM  
MECANISMOS CINÉTICOS

por

Hugo Ohno Barbosa Nonaka

Dissertação para obtenção do Título de  
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, abril de 2015

MEDIÇÃO DA VELOCIDADE DE QUEIMA LAMINAR DE BIOGÁS E GÁS DE  
SÍNTESE ATRAVÉS DO MÉTODO DO FLUXO DE CALOR E COMPARAÇÃO COM  
MECANISMOS CINÉTICOS

por

Hugo Ohno Barbosa Nonaka  
Engenheiro Mecânico

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, da  
Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos  
necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Energia

Orientador: Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira

Aprovada por:

Prof. Dr. Alexandre Vagtinski de Paula, DEMEC / UFRGS

Prof. Dr. Amir Antônio Martins de Oliveira Júnior, POSMEC / UFSC

Prof. Dr. Paulo Smith Schneider, PROMEC / UFRGS

Prof. Dr. Luiz Alberto Oliveira Rocha  
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 17 de abril de 2015.

## **AGRADECIMENTOS**

A CAPES pelo apoio financeiro.

Aos professores do programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Rio Grande do Sul pelos ensinamentos transmitidos, em especial ao professor Fernando Marcelo Pereira pela orientação e amizade.

Aos amigos e colegas do programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Aos meus pais, Silvio Tsutomu Nonaka e Maria da Glória Russi Barbosa, por todo suporte, apoio, confiança e paciência.

À minha namorada Mauren, pela compreensão, carinho e apoio em todos os momentos.

À bolsista Júlia Aliatti pelo auxílio na realização de boa parte dos experimentos.

À todos aqueles que de uma maneira ou de outra contribuíram para a realização deste trabalho.

## RESUMO

A velocidade de queima laminar adiabática é um importante parâmetro da combustão que dita o comportamento de chamas pré-misturadas. Dos métodos disponíveis para a medição desse parâmetro, o método do fluxo de calor destaca-se pela simplicidade e precisão. No presente trabalho, esse método é utilizado para medir a velocidade de queima de biogás (modelado como  $\text{CH}_4$  com diferentes níveis de diluição com  $\text{CO}_2$ ) e de gás de síntese (modelado como uma mistura de  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$  e  $\text{N}_2$ ) em ar a 298 K e 1 atm. Tais gases são de crescente interesse para a sociedade em função de aspectos ambientais, porém, suas velocidades de queima não foram amplamente estudadas ainda. Os resultados obtidos são comparados com as previsões de cinco mecanismos cinéticos (GRI-Mech 3.0, Davis et al., Konnov, San Diego e USC Mech II) a fim de avaliar a sua capacidade preditiva. Os resultados experimentais e numéricos das velocidades de queima de biogás e ar apresentam uma boa concordância e as incertezas encontradas foram condizentes com as relatadas na literatura. Os resultados experimentais desse gás foram parametrizados em uma correlação empírica de fácil utilização em modelos numéricos. As medições da velocidade de queima de gás de síntese e ar, por outro lado, apresentaram valores inferiores às previsões numéricas de todos os mecanismos estudados. Os dados experimentais da literatura, para a mesma mistura, diferem tanto em valores quanto em comportamento dos resultados do presente trabalho. Tal comportamento está provavelmente relacionado a alguma contaminação no CO utilizado, já que quando esse gás está presente observa-se uma chemi-luminescência não relatada na literatura.

Palavras-chave: velocidade de queima laminar adiabática, método do fluxo de calor, cinco mecanismos cinéticos, biogás, syngas.

## ABSTRACT

The adiabatic laminar burning velocity is an important combustion parameter that dictates premixed flames characteristics. Among the measuring methods available in literature, the heat flux method stands out for its simplicity and accuracy. In the present work, this method is used to measure the adiabatic laminar burning velocity of biogas (modeled as CH<sub>4</sub> with different dilution levels with CO<sub>2</sub>) and syngas (modeled as a CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> and N<sub>2</sub> mixture) in air at 298 K and 1 atm. Such gases are of growing society interest due to environmental aspects, however, their adiabatic laminar burning velocity have not been widely studied yet. The experimental results are compared to predictions of five kinetic mechanisms (GRI-Mech 3.0, Davis et al., Konnov, San Diego e USC Mech II) to evaluate their predictive capacity. Experimental and numerical results of biogas/air mixtures adiabatic laminar burning velocity show good agreement and the found uncertainties are in agreement with literature. Experimental results of this gas were fitted in an empiric correlation of simple numerical application. Experimental results of the laminar burning velocity of syngas/air, on the other hand, show lower values than the numerical predictions of all studied kinetic mechanisms. Literature available data for the same mixture differ both in values and behavior of the present work results. Such behavior is probably related to some contamination on the CO used since a chemi-luminescence not reported in literature can be noted when this gas is present.

Keywords: adiabatic laminar burning velocity, heat flux method, five kinetic mechanisms, biogas, syngas.

# ÍNDICE

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO.....</b>	<b>1</b>
1.1	Motivação .....	1
1.2	Revisão Bibliográfica .....	2
1.2.1	<i>Velocidade de queima laminar</i> .....	2
1.2.2	<i>Gases de estudo</i> .....	5
1.2.2.1	<i>Biogás</i> .....	5
1.2.2.2	<i>Gás de síntese</i> .....	6
1.2.3	<i>Mecanismos de reação</i> .....	7
1.3	Objetivos.....	8
<b>2</b>	<b>MÉTODOS.....</b>	<b>9</b>
2.1	Método do fluxo de calor.....	9
2.1.1	<i>Princípio do método</i> .....	9
2.1.2	<i>Perfil de temperaturas teórico da placa perfurada</i> .....	12
2.2	Bancada experimental.....	14
2.2.1	<i>Queimador</i> .....	16
2.2.2	<i>Placa perfurada</i> .....	17
2.3	Determinação da velocidade de queima .....	18
2.3.1	<i>Área unidimensional</i> .....	20
2.3.2	<i>Controle da razão de equivalência e fatores de correção para a vazão</i> .....	20
2.3.3	<i>Correção para posicionamento irregular dos termopares</i> .....	21
2.3.4	<i>Propagação de incertezas</i> .....	25
2.3.4.1	<i>Incerteza na razão de equivalência</i> .....	25
2.3.4.2	<i>Incerteza na velocidade de queima adiabática</i> .....	26
2.4	Método numérico.....	29
2.4.1	<i>Equações governantes</i> .....	29
2.4.1.1	<i>Equação de conservação de massa total</i> .....	30
2.4.1.2	<i>Equação de conservação de massa das espécies químicas</i> .....	30
2.4.1.3	<i>Equação de transporte da energia</i> .....	31
2.4.2	<i>Estratégia computacional</i> .....	32

2.4.3	<i>Mecanismos estudados</i> .....	33
<b>3</b>	<b>RESULTADOS</b> .....	<b>35</b>
3.1	Metano .....	35
3.2	H <sub>2</sub> /CO .....	38
3.3	Biogás .....	42
3.4	Gás de síntese .....	47
3.5	Discussões acerca do método .....	49
3.5.1	<i>Área perfurada da placa</i> .....	50
3.5.2	<i>Temperatura da mistura dentro do plenum</i> .....	52
3.5.3	<i>Influência da temperatura da camisa de aquecimento</i> .....	54
3.5.4	<i>Nova análise de incertezas</i> .....	55
3.5.4.1	<i>Incerteza no coeficiente parabólico</i> .....	56
3.5.4.2	<i>Incerteza na velocidade de queima</i> .....	57
3.5.4.3	<i>Resultados</i> .....	58
<b>4</b>	<b>CONCLUSÕES</b> .....	<b>61</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	<b>63</b>
	<b>APÊNDICE A – Métodos de medição da velocidade de queima</b> .....	<b>76</b>
A.2	<i>Método do Bico de Bunsen</i> .....	76
A.3	<i>Método da chama estabilizada em um escoamento</i> .....	77
A.4	<i>Método da chama de expansão esférica</i> .....	78
A.5	<i>Método da chama plana</i> .....	78
	<b>APÊNDICE B – Parâmetros utilizados nas simulações numéricas</b> .....	<b>80</b>
	<b>APÊNDICE C – Procedimento experimental</b> .....	<b>81</b>
	<b>APÊNDICE D – Coeficiente de determinação</b> .....	<b>82</b>
	<b>APÊNDICE E – Resultados tabelados</b> .....	<b>84</b>
D.1	Validações.....	84

<i>D.1.1</i>	<i>Metano</i> .....	84
<i>D.1.2</i>	<i>H<sub>2</sub>/CO</i> .....	85
D.2	Biogás .....	87
D.3	Gás de síntese .....	91



## LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Estrutura de uma chama laminar de pré-mistura.....	3
Figura 2.1 – Esquema do queimador do método do fluxo de calor.....	10
Figura 2.2 – Esboço das trocas térmicas existentes na placa perfurada quando há estabilização de chama. ....	10
Figura 2.3 – Perfil de temperatura de uma chama livre (linha contínua) e de uma chama estabilizada (linha tracejada). ....	11
Figura 2.4 – Aproximação da transferência de calor entre chama e placa. ....	12
Figura 2.5 – Representação esquemática da bancada experimental base utilizada no presente trabalho. ....	15
Figura 2.6 – Dimensões, padrão de furação e furos especiais da placa perfurada. ....	17
Figura 2.7 – Perfis de temperatura experimentais (pontos) e teóricos ajustados (linhas) para diferentes velocidades de escoamento para combustão de metano e ar em condições ambientes e $\phi = 1$ . ....	19
Figura 2.8 – Coeficiente parabólico $\zeta$ em razão da velocidade de escoamento e seu polinômio ajustado para uma dada razão de equivalência. A seta indica a intersecção entre o polinômio e $\zeta = 0$ . ....	19
Figura 2.9 – Aproximação dos fenômenos de transferência de calor que ocorrem na placa. ....	21
Figura 2.10 – Diferença entre a temperatura medida e a curva teórica ajustada para cada termopar em razão do coeficiente parabólico $\zeta$ para $\phi = 1$ . ....	23
Figura 2.11 – Residuais de cada termopar em função do coeficiente parabólico para $0,7 \leq \phi \leq 1,4$ . ....	24
Figura 2.12 – Perfis de temperaturas corrigidos para a combustão de metano e ar em condições ambientes e $\phi = 1$ . ....	24
Figura 2.13 – Estimativa da incerteza do coeficiente parabólico devida ao desvio $\sigma_{tp}$ da medida do termopar. O termopar em <i>re</i> é o mais externo utilizado nas medições. A linha tracejada indica a pior parábola possível devido às incertezas dos termopares quando ambos marcam temperaturas idênticas. ....	28

Figura 2.14 – Incerteza global em <i>SL0</i> em função da razão de equivalência de uma mistura de metano e ar.....	29
Figura 3.1 – Comparação entre os resultados experimentais do presente trabalho e dados recentes da literatura. O método do fluxo de calor foi utilizado por Goswami, 2014, Hermanns, 2007 e Bosschaart, 2002. Lowry et al., 2011, utilizou o método de chama de expansão esférica e Park et al., 2011, o método de jatos opostos. ....	36
Figura 3.2 – Comparação entre resultados numéricos e experimentais do presente trabalho. ....	37
Figura 3.3 – Comparação entre resultados experimentais do presente trabalho e dados da literatura. He et al, 2014, e Natarajan et al., 2007, utilizaram o método do fluxo de calor e o do bico de Bunsen respectivamente. O método da chama esférica e expansão foi utilizado por Sun et al., 2007, e Hassan et al., 1997.....	39
Figura 3.4 – Comparação entre resultados numéricos e experimentais do presente trabalho. ....	39
Figura 3.5 – Erros absolutos na <i>SL0</i> em função da razão de equivalência.....	40
Figura 3.6 – Estranha chemi-luminescência observada nos experimentos de validação. Chama correspondente a uma mistura de $\phi = 0,6$ com velocidade de escoamento de 14,99 cm/s. ....	41
Figura 3.7 – Placa perfurada (a) antes e (b) depois dos experimentos. Observa-se um acúmulo de material na face superior da mesma.....	41
Figura 3.8 – Comparação entre resultados experimentais do presente trabalho e dados recentes da literatura para diluições de 20% (a) e 40% (b). A medições realizadas por Kishore et al., 2008, foram realizadas a 307 K e 1 atm. ....	43
Figura 3.9 – Comparação entre os resultados numéricos e experimentais da velocidade de queima de misturas de biogás com diferentes níveis de CO <sub>2</sub> – 10% (a), 20% (b), 30% (c), 40% (d) e 50% (e) – e ar para razões de equivalência de 0,8 a 1,3. ....	44
Figura 3.10 – Velocidade de queima medida, calculada e temperaturas de chama adiabática calculada para diferentes níveis de diluição de CO <sub>2</sub> . O deslocamento da velocidade e temperatura máximas pode ser facilmente observado. O mecanismo utilizado para essa análise foi o de Konnov por apresentar um R <sup>2</sup> médio mais próximo da unidade que os demais mecanismos. ....	45

Figura 3.11 – Comparação entre os resultados experimentais e as previsões da correlação do presente trabalho para diferentes níveis de diluição.....	47
Figura 3.12 – Comparação entre resultados experimentais, numéricos e da literatura para o gás de síntese estudado. Monteiro et al., 2010, utilizou o método da chama esférica em expansão a 293 K e 1 atm.....	49
Figura 3.13 – Chemi-luminescência observada nas chamas da mistura de syngas estudada. Chama de uma mistura com $\phi = 0,65$ e velocidade de escoamento de 10,73 cm/s...49	49
Figura 3.14 – Diferença entre área perfurada real e teórica. ....	50
Figura 3.15 – Comparação entre as velocidades de queima obtidas para $dA = 29,55$ mm e $dA = 30$ mm.....	51
Figura 3.16 – Comparação qualitativa entre as velocidades de queima obtidas controlando a temperatura da mistura através dos termopares e do banho frio. ....	53
Figura 3.17 – Efeito da temperatura do banho quente na velocidade de queima de uma mistura de metano e ar para (a) $\phi = 1$ e (b) $\phi = 1,1$ a 298 K e 1 atm. ....	54
Figura 3.18 – Comparação entre as incertezas calculadas pelo método padrão e pelo método proposto no presente trabalho.....	59
Figura 3.19 – Comparação entre as incertezas calculadas pelo método padrão e pelo método proposto no presente trabalho.....	60
Figura A.1 – Configuração <i>counterflow</i> proposta por Wu e Law, 1984, para a medição da <i>SL0</i> . Fonte: adaptado de Hoerlle, 2015.....	77
Figura A.2 – Processo de expansão de uma frente de chama esférica. Fonte: adaptado de Beeckmann et al., 2014.....	78
Figura A.3 – Queimador McKenna [Holthuis & Associates, 2015]. Queimador atual da variação criada por Botha e Spalding, 1954.....	79

## LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Principais componentes da bancada experimental. ....	15
Tabela 2.2 – Modelos, capacidades de fluidos e calibração dos controladores utilizados. .	16
Tabela 2.3 – Pureza dos gases utilizados no presente trabalho. ....	16
Tabela 2.4 – Localização radial dos termopares.....	18
Tabela 2.5 – Influência de cada uma das fontes de incertezas na incerteza global de $S_L^0$ ..	29
Tabela 2.6 – Mecanismos utilizados no presente trabalho em ordem de complexidade e suas características.....	34
Tabela 3.1 – Parâmetros da correlação (3.1) ajustados aos resultados do presente trabalho. ....	46
Tabela 3.2 – Composição do gás de síntese estudado. ....	48
Tabela 3.3 – Comparação entre as fontes de incertezas na $S_L^0$ para $d_A = 29,55$ mm. ....	51
Tabela 3.4 – Comparação quantitativa entre as velocidades de queima obtidas controlando a temperatura da mistura através dos termopares e do banho frio. ....	53
Tabela 3.5 – Comparação quantitativa entre a análise de incerteza padrão do método, $\delta S_{L0}$ , e alternativa , $\delta S_{L a}^0$ para o caso com correções nos termopares. ....	59
Tabela 3.6 - Comparação quantitativa entre a análise de incerteza padrão do método, $\delta S_{L0sc}$ , e alternativa , $\delta S_{L a,sc}^0$ para o segundo caso estudado (sem correções). ....	59
Tabela 3.7 – Comparação quantitativa entre a análise de incerteza padrão do método com correções, $\delta S_{L^0}$ , e a alternativa sem correções $\delta S_{L a,sc}^0$ . ....	60
Tabela B.1 – Principais parâmetros utilizados nas simulações numéricas.....	80
Tabela E.1 – Resultados experimentais tabelados.....	84
Tabela E.2 – Resultados numéricos (em cm/s) tabelados. ....	84
Tabela E.3 – Diferenças absolutas (em cm/s), médias e $R^2$ entre resultados numéricos e experimentais.....	85
Tabela E.4 – Resultados experimentais tabelados.....	85
Tabela E.5 – Resultados numéricos (em cm/s) tabelados. ....	85
Tabela E.6 – Diferenças absolutas (em cm/s), médias e $R^2$ entre resultados numéricos e experimentais.....	86

Tabela E.7 – Resultados experimentais tabelados.....	87
Tabela E.8 – Reduções da velocidade de queima tabeladas. Velocidades com 0% de diluição utilizadas com referência.....	88
Tabela E.9 – Resultados numéricos (em cm/s) tabelados. ....	89
Tabela E.10 – Diferenças absolutas (em cm/s), médias e $R^2$ entre resultados numéricos e experimentais.....	90
Tabela E.11 – Resultados experimentais tabelados.....	91
Tabela E.12 – Resultados numéricos (em cm/s) tabelados. ....	91
Tabela E.13 – Diferenças absolutas (em cm/s), médias e $R^2$ entre resultados numéricos e experimentais.....	91

## LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

AIE	Agência Internacional de Energia
C <sub>1</sub>	Hidrocarboneto de um átomo de carbono
C <sub>4</sub>	Hidrocarboneto de quatro átomos de carbono
CARS	<i>Coherent anti-stokes Raman scattering</i>
CH <sub>4</sub>	Metano
CO	Monóxido de carbono
CO <sub>2</sub>	Dióxido de carbono
EPE	Empresa de Pesquisa Energética
FS	Fundo de escala
H <sub>2</sub>	Hidrogênio
L	Leitura
N <sub>2</sub>	Nitrogênio
NO <sub>x</sub>	Óxidos de apenas um átomo de nitrogênio
TU/e	Universidade Tecnológica de Eindhoven

## LISTA DE SÍMBOLOS

$a$	Espessura da placa perfurada
$A$	Área perfurada
$b$	Medida
$C$	Constante
$C_p$	Calor específico
$d$	Diâmetro
$D_{ij}$	Coefficiente de difusão multicomponente
$D^T$	Coefficiente de difusão térmica
$F$	Fator de correção
$h$	Entalpia
$l_C$	Espessura de chama
$l_P$	Espessura da zona de pré-aquecimento
$l_R$	Espessura da zona de reação
$\dot{m}$	Vazão mássica
$M$	Massa molecular
$N_s$	Número de espécies
$N_r$	Número de reações
$P$	Pressão
$p$	Passo
$p_e$	Proporção estequiométrica
$q$	Fluxo de calor da chama para a placa
$q'$	Troca líquida de calor entre os gases e a placa
$q_+$	Fluxo de calor que entra na placa perfurada
$q_-$	Fluxo de calor que sai da placa perfurada
$\dot{Q}$	Vazão volumétrica
$r$	Raio
$r_e$	Posição radial do termopar mais externo utilizado na determinação da $S_L^0$
$R$	Constante da mistura

$R_u$	Constante universal dos gases
$R^2$	Coefficiente de determinação
$RC$	Resultado calculado
$S_L$	Velocidade de queima laminar
$SQ$	Soma dos quadrados
$T$	Temperatura
$T_c$	Temperatura do centro da placa
$u$	Velocidade axial
$U$	Velocidade de difusão
$x$	Posição axial
$X$	Fração molar
$Y$	Fração mássica

### **Símbolos Gregos**

$\alpha$	Expoente empírico
$\beta$	Expoente empírico
$\delta$	Incerteza
$\varepsilon$	Coefficiente ajustado empiricamente
$\epsilon$	Relação entre as condutividades efetivas radial e axial da placa perfurada
$\eta$	Coefficiente ajustado empiricamente
$\lambda$	Condutividade térmica efetiva
$\gamma$	Coefficiente de transferência de calor entre a placa e os gases
$\omega$	Produção/consumo
$\Omega$	Coefficiente ajustado empiricamente
$\phi$	Razão de equivalência
$\psi$	Coefficiente ajustado empiricamente
$\rho$	Massa específica
$\sigma$	Desvio padrão
$\tau$	Coefficiente ajustado empiricamente
$\xi$	Coefficiente ajustado empiricamente



$W$	Coeficiente ajustado empiricamente
$\zeta$	Coeficiente parabólico

### Super-Índices

$^0$	Adiabático
$\cdot$	Taxa
$-$	Média
$\wedge$	Estimado

### Sub-Índices

$a$	Alternativo
$ar$	Ar (atmosférico)
$ad$	Unidade de aquisição de dados
$A$	Área perfurada
$cal$	Calibrado
$comb$	Combustível
$g$	Gases
$i$	Espécie/elemento $i$
$j$	Espécie/elemento $j$
$l$	Latão
$m$	Medido
$máx$	Máximo
$min$	Mínimo
$n$	Espécie/elemento/observação $n$
$nq$	Não queimado
$o$	Valor observado
$p$	Placa
$\dot{Q}$	Vazão volumétrica
$r$	Direção radial

<i>ref</i>	Referência
<i>res</i>	Resíduos
<i>sc</i>	Sem correções
$\sigma_{tp}$	Desvio remanescente do termopar pós correção
<i>tot</i>	Total
<i>tp</i>	Termopar
<i>x</i>	Direção axial
$\zeta$	Coefficiente parabólico

# 1 INTRODUÇÃO

A descoberta do fogo, e como controlá-lo, foi um divisor de águas na história da humanidade. Ela não só possibilitou a evolução de nossa civilização como hoje a conhecemos, como também marcou o início de nossa dependência de combustíveis para geração de energia. Partindo da madeira e passando pelo carvão, hoje a principal fonte de energia da humanidade é, sem dúvidas, o petróleo. Entretanto, o atual cenário econômico e ambiental mundial vem incentivando o uso de combustíveis alternativos. Nesse contexto, o estudo de tais combustíveis, como o biogás e o gás de síntese (*syngas*), é uma área de crescente interesse e importância. No presente trabalho, misturas de biogás e ar e gás de síntese e ar, com diferentes razões de equivalência, são estudadas a pressão e temperatura ambientes para a determinação de sua velocidade de queima.

## 1.1 Motivação

No último relatório elaborado pela Agência Internacional de Energia (*International Energy Agency*) envolvendo as principais estatísticas referentes a situação energética mundial [Agência Internacional de Energia (AIE), 2014] observa-se que, em 2012, a participação de combustíveis (e portanto de processos de combustão) na matriz energética mundial foi de quase 92%. Mesmo um país com uma participação significativa de fontes renováveis em sua matriz energética como o Brasil, com cerca de 41% em 2013 [Empresa de Pesquisa Energética (EPE), 2014], apresenta aproximadamente 80% de sua produção de energia oriunda de processos de queima, uma vez que uma boa parcela de suas fontes renováveis – cerca de 60% em 2013 [EPE, 2014] – depende desse processo para geração de energia. Isso mostra o quão importante ainda é o processo de combustão na produção de energia.

No Brasil, biocombustíveis – combustíveis de origem biológica – são a fonte renovável mais utilizada para produção de energia [EPE, 2014] e apresentam uma perspectiva de crescimento considerável até 2035 [IEA, 2014]. Dentre os combustíveis encontrados nessa categoria, pode-se destacar o biogás e o gás de síntese pela sua versatilidade, pois podem ser produzidos a partir de diferentes matérias-primas. Entretanto, como todo combustível de baixo poder calorífico, seu uso traz desafios uma vez que suas características (poder calorífico, velocidade de queima, estabilidade, etc.) são diferentes dos combustíveis até então utilizados.

A velocidade de queima é um importante parâmetro da combustão que dita o comportamento de chamas pré-misturadas (geometria, estabilidade, propagação, consumo de combustível, etc.) e também tem um papel importante na estabilização de chamas difusivas do tipo jato. Ela ainda é um parâmetro chave em projetos de equipamentos [Dong et al., 2009] e desempenha um papel importante na validação e desenvolvimento de mecanismos cinéticos de reação [Bosschaart e de Goey, 2003; Egolfopoulos et al., 2014].

O maior desafio na medição desse parâmetro é a obtenção de uma chama unidimensional e sem perda de calor. Diversas técnicas para sua obtenção foram desenvolvidas ao longo dos anos (ver Apêndice A), com um notável aumento da concordância entre resultados mais recentes [Egolfopoulos et al., 2014]. Dentre essas técnicas, o método do fluxo de calor se destaca pela utilização de interpolação entre medições na obtenção da velocidade de queima, diferentemente das demais que utilizam extrapolações. Não obstante, medições da velocidade de queima de combustíveis alternativos, como o biogás e o gás de síntese, ainda são escassas.

Simulações numéricas são capazes de calcular diversos parâmetros da combustão, como a velocidade de queima, utilizando mecanismos de reação com diversos graus de detalhamento. Esses, entretanto, são geralmente ajustados durante o seu desenvolvimento para melhor prever determinados comportamentos passíveis de medições experimentais. Isso os torna dependentes dos resultados experimentais disponíveis no momento de seu desenvolvimento. Assim, mecanismos de reação podem não descrever corretamente certos parâmetros da combustão quando empregados em combustíveis ou condições para os quais não foram ajustados.

Dessa forma, o presente trabalho propõe a medição da velocidade de queima laminar adiabática de misturas de biogás/ar e de gás de síntese/ar em condições atmosféricas utilizando o método do fluxo de calor e a avaliação da capacidade preditiva de mecanismos cinéticos disponíveis.

## **1.2 Revisão Bibliográfica**

### **1.2.1 Velocidade de queima laminar**

Mallard e Le Chatelier postularam, em 1883, que a estrutura de uma chama laminar pré-misturada pode ser dividida em duas regiões distintas: uma zona de pré-aquecimento e uma zona de reação [Coelho e Costa, 2007]. A zona de pré-aquecimento é caracterizada pela ausência de reações químicas onde a mistura ainda não queimada é aquecida pelo calor proveniente da zona de reação transportado por condução. Já a zona de reação, como o próprio

nome diz, é onde ocorrem as reações químicas do processo de combustão e, portanto, onde há a liberação da energia do combustível. A espessura de chama,  $l_C$ , é definida como a soma da espessura dessas duas zonas,  $l_P$  e  $l_R$  respectivamente (Figura 1.1). Entretanto, como  $l_R$  é muito menor que  $l_P$ , tem-se que  $l_C$  é aproximadamente igual a  $l_P$ . Como, em geral,  $l_P$  é muito pequena (na ordem de 1 mm para chamas estequiométricas de hidrocarbonetos em condições ambientes), uma chama pré-misturada pode ser considerada como uma interface que separa a mistura queimada e a não queimada. Tal aproximação para a estrutura de uma chama permite identificar os processos mais importantes em cada região e deu origem a uma série de estudos teóricos.

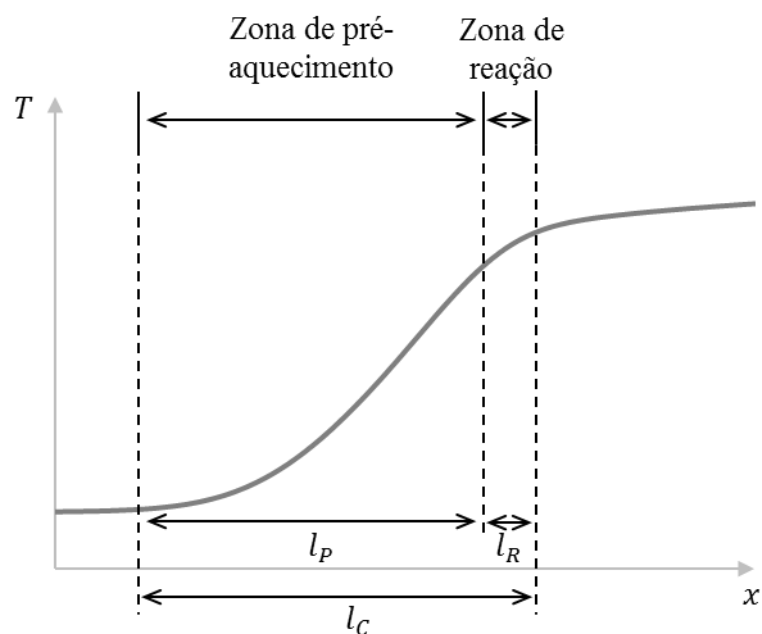


Figura 1.1 – Estrutura de uma chama laminar de pré-mistura.

A velocidade de queima  $S_L$  é definida como a velocidade de propagação característica da estrutura representada pela Figura 1.1 em uma mistura combustível/oxidante. Em uma chama estacionária, essa velocidade apresenta a mesma direção e módulo da velocidade da mistura reagente não afetada termicamente a montante da chama, porém em sentido contrário. A velocidade de queima laminar adiabática,  $S_L^0$ , estudada no presente trabalho, é uma propriedade fundamental dessa mistura, onde, para um dado estado termodinâmico inicial (composição, temperatura e pressão), existe apenas uma  $S_L^0$ .

A influência da pressão e da temperatura sobre a  $S_L^0$  já foi bastante estudada na literatura [Metghalchi e Keck, 1982; Gu et al., 2000; Bosschaart, 2002]. O tipo de correlação mais empregado é:

$$S_L^0 = S_{L\ ref}^0 \left( \frac{P}{P_{ref}} \right)^\beta \left( \frac{T}{T_{ref}} \right)^\alpha \quad (1.1)$$

na qual  $S_{L\ ref}^0$  é a velocidade de queima laminar adiabática nas condições de referência (normalmente a 1 atm e 298 K),  $P_{ref}$  e  $T_{ref}$  a pressão e temperatura de referência respectivamente, e  $\alpha$  e  $\beta$  os expoentes empíricos. O expoente  $\alpha$  é sempre positivo indicando uma influência também positiva da temperatura sobre a velocidade de queima, ou seja, quanto maior a temperatura, maior a velocidade de queima. Já o expoente  $\beta$  é sempre negativo, indicando uma influência negativa da pressão sobre a  $S_L^0$ .

Um parâmetro importante para a determinação da  $S_{L\ ref}^0$  é a razão de equivalência  $\phi$ . Ela define a proporção entre oxidante e combustível em uma mistura e é definida como:

$$\phi = \frac{\left( \frac{\dot{m}_{comb}}{\dot{m}_{ar}} \right)}{\left( \frac{\dot{m}_{comb}}{\dot{m}_{ar}} \right)_{estequiométrico}} \quad (1.2)$$

onde  $\dot{m}_{comb}$  é a vazão mássica de combustível e  $\dot{m}_{ar}$  a de ar. Uma mistura estequiométrica é definida como aquela que contem a quantidade exata de oxidante necessária para converter todo o combustível em produtos saturados, ou seja,  $\phi = 1$ . Quando  $\phi < 1$  tem-se excesso de oxidante na mistura, a qual é denominada de pobre. Já quando  $\phi > 1$  há excesso de combustível e a mistura é denominada de rica. A influência da razão de equivalência sobre a  $S_{L\ ref}^0$  está ligada à influência da razão de equivalência sobre a temperatura da chama, de modo que  $S_{L\ ref}^0$  é máxima em misturas levemente ricas, fenômeno observado em hidrocarbonetos [Lowry et al., 2011; Park et al., 2011; Goswami, 2014] e no gás de síntese [Sun et al. 2007], onde dependendo do conteúdo de  $H_2$  – cuja velocidade máxima ocorre em misturas muito ricas – a máxima velocidade de queima pode ocorrer em misturas mais ricas.

## 1.2.2 Gases de estudo

### 1.2.2.1 Biogás

O biogás é um biocombustível gasoso composto tipicamente por metano (40-85 % vol.) e dióxido de carbono (15-60 % vol.) [Cheolsoo et al., 2015] de crescente interesse recente [Weiland, 2010] devido a sua sustentabilidade e possibilidade de produção a partir de diversas fontes. Esse biocombustível é produzido a partir da digestão anaeróbia de biomassa ou de resíduos orgânicos biodegradáveis [Subramanian et al., 2013; Olsson e Fallde, 2014], e sua composição final depende do processo de digestão e da matéria-prima utilizados em sua obtenção [Lee et al., 2010]. Ele é utilizado para a produção de eletricidade e calor [Porpatham et al., 2008; Park et al., 2011; Baciocchi et al., 2013], e também pode ser transformado em gás de síntese ou em hidrogênio [Avraam et al., 2010; Lau et al., 2011; Vikram e Purnanand, 2014; Ahmed et al., 2015]. Em áreas rurais da China, por exemplo, ele já desempenha um papel importante na produção de energia [Chen et al., 2014].

Devido ao seu elevado teor de dióxido de carbono, o biogás apresenta características inferiores ao gás natural – composto basicamente por metano – no que diz respeito à sua combustão: menores poder calorífico (entre 17,5 e 30 MJ/m<sup>3</sup>), estabilidade e velocidade de chama [Ju et al., 1998; Lee e Hwang, 2007]. Entretanto, estudos apontam vantagens na sua utilização como combustível alternativo, principalmente na perspectiva ambiental [Uusitalo et al., 2013]. Por exemplo, o biogás possibilita uma maior taxa de compressão devido à sua elevada temperatura de autoignição [Porphatam et al., 2007]. Em motores do ciclo diesel, essa característica resulta em uma potência equivalente à proporcionada pelo óleo diesel, com uma redução de poluentes [Bora et al., 2014]. Nesses motores, uma substituição de até 85% do combustível por biogás é possível segundo Von Mitzlaff, 1998.

Alguns estudos envolvendo a velocidade de queima de misturas similares ao biogás são relatados na literatura [Kishore et al, 2008; Cardona e Amell, 2013; Hinton e Stone, 2014]. Entretanto, devido à falta de padronização das condições experimentais, a comparação entre dados torna-se de difícil realização. Cardona e Amell, 2013, por exemplo, realizaram seu estudo em apenas uma mistura de biogás (66% CH<sub>4</sub> e 34% CO<sub>2</sub> em volume) a 298 K e 0,828 atm, condições experimentais difíceis de encontrar em outro trabalho para comparação. Os resultados obtidos foram levemente inferiores às previsões do mecanismo utilizado (Gri-Mech 3.0). O estudo de Kishore et al., 2008, utilizou o método do fluxo de calor para medir as velocidades de queima de misturas de CH<sub>4</sub> e CO<sub>2</sub> (biogás) com níveis de CO<sub>2</sub> de até 60% em

volume a 307 K e 1 atm. Os resultados encontrados foram levemente superiores às previsões do mecanismo utilizado (Gri-Mech 3.0). Hinton e Stone, 2014, utilizaram o método de chama esférica em expansão para estudar o efeito da pressão sobre a velocidade de queima de misturas de biogás com níveis de CO<sub>2</sub> de até 40% em volume. Resultados foram obtidos para misturas com  $\phi = 1$  a 298K e 1 atm porém nenhuma comparação com mecanismos cinéticos foi realizada.

#### 1.2.2.2 Gás de síntese

O gás de síntese, ou *syngas*, também é um biocombustível gasoso produzido através do processo de gasificação de matéria orgânica rica em carbono. Isso inclui (além do carvão) biomassa, resíduos orgânicos, gás natural e, inclusive, o próprio biogás [Dixon et al., 2008]. O *syngas* é composto tipicamente por hidrogênio, metano, monóxido de carbono, dióxido de carbono e nitrogênio [Bridgwater, 1995; Shah et al., 2010] – exceto aquele produzido a partir do gás natural (contendo H<sub>2</sub>, CO e CH<sub>4</sub> apenas) [Habib et al., 2014] – onde suas proporções dependem do método e da matéria prima utilizados em sua produção. Sua utilização destina-se principalmente para a produção de energia [Lee et al., 2010; Sánchez et al., 2010; Khalil e Gupta, 2011], hidrogênio e monóxido de carbono [Rostrup-Nielsen, 2002].

A variabilidade e complexidade da composição desse biocombustível são desafios nos quesitos eficiência e desempenho de sistemas de geração de energia [Gobbato et al., 2011]. Não obstante, diversos estudos apontam o gás de síntese como um bom combustível alternativo para motores de combustão interna [Veziroglu e Barbir, 1992; Dunn, 2002; Huang et al., 2006; Salimi et al., 2009; Hagos et al., 2014], contribuindo para um aumento de sua eficiência e desempenho em alguns casos [Gomes et al., 2011; Kohn et al., 2011; Park et al., 2010; Ji et al., 2013].

Na literatura, a composição do gás de síntese é geralmente simplificada para o estudo de sua velocidade de queima. As composições mais comuns encontradas são H<sub>2</sub> e CO apenas [Sun et al., 2007; Bouvet et al., 2011; Goswami et al., 2013] ou com algum diluente (geralmente CO<sub>2</sub> ou N<sub>2</sub>) [Prathap et al., 2008; Kishore et al., 2011; Prathap et al., 2012; Yepes e Amell, 2013]. Bouvet et al., 2011, por exemplo, realizaram seu estudo com misturas de H<sub>2</sub> e CO – denominado-a como *syngas* – a pressão e temperatura ambientes (298 K e 1 atm) utilizando o método de chama em expansão esférica. Seus resultados experimentais apresentaram certas divergências tanto dos dados presentes na literatura quanto dos resultados de suas simulações numéricas. Algo similar ocorre no trabalho de Phathap et al., 2008, onde as velocidades de



queima de misturas de H<sub>2</sub> e CO (também considerado como *syngas*) e N<sub>2</sub> foram medidas através da mesma técnica.

Existem também alguns trabalhos que se preocuparam em modelar a composição de um gás de síntese específico. Este é o caso de Monteiro et al., 2010, que estudaram a velocidade de queima de misturas compostas por H<sub>2</sub>, CO, CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub> e N<sub>2</sub> muito próximas daquela do gás de síntese produzido a partir da gasificação de madeira. Monteiro et al, 2010, utilizaram o método da chama de expansão esférica e condições normais de temperatura e pressão (293 K e 1 atm). Seus resultados, entretanto, não foram comparados com dados da literatura e nenhuma simulação numérica foi realizada. Franscisco, 2014, também estudou a velocidade de queima de misturas de cinco componentes (H<sub>2</sub>, CO, CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub> e N<sub>2</sub>). Seu trabalho, no entanto, foi focado na influência do metano sobre a velocidade de queima (entre outros parâmetros) dessas misturas. Para tal, a concentração de metano foi variada de 0 a 100% em passos de 20% enquanto a proporção dos demais componentes foi mantida constante. Seus resultados foram comparados com as previsões dos mecanismos Gri-Mech 3.0 e San Diego, apresentando uma boa concordância.

### 1.2.3 Mecanismos de reação

Para se determinar numericamente a velocidade de queima de uma mistura combustível/oxidante, um mecanismo de reação é necessário. Esses mecanismos ditam quais reações ocorrem durante um dado processo químico, sua sequência e suas velocidades e são acompanhados das propriedades termodinâmicas e de transporte das espécies químicas consideradas. Dos diversos mecanismos encontrados na literatura, o mais conhecido e utilizado é, sem dúvida, o GRI-Mech 3.0 [Smith et al., 1999] desenvolvido para a combustão de gás natural. Entretanto, mecanismos mais recentes, como os propostos por Davis et al, 2005, Konnov, 2005, Petrova e Williams, 2005 e Wang et al., 2007, parecem apresentar resultados mais condizentes com alguns dos resultados experimentais mais recentes da literatura. Nenhum estudo envolvendo a comparação entre esses mecanismos para a previsão da  $S_L^0$  de misturas biogás/ar e gás de síntese/ar foi encontrado na literatura.

### 1.3 Objetivos

O objetivo do presente trabalho é medir a velocidade de queima laminar adiabática de misturas biogás/ar e de gás de síntese/ar em condições atmosféricas e avaliar a capacidade preditiva de mecanismos cinéticos disponíveis. A fim de cumprir esse objetivo, esse trabalho se concentrará no cumprimento dos seguintes objetivos parciais:

- Adaptação da atual bancada experimental (do método do fluxo de calor) para a queima de combustíveis gasosos complexos de até cinco componentes;
- Validação da nova configuração experimental e redução de possíveis incertezas presentes;
- Medição da velocidade de queima de misturas biogás/ar e de gás de síntese/ar e análise de incertezas;
- Simulação dos combustíveis estudados com diferentes mecanismos cinéticos e comparação com resultados experimentais.

## 2 MÉTODOS

### 2.1 Método do fluxo de calor

Criado por de Goey, 1993, o método do fluxo de calor é uma variação do método de chama plana para a medição da velocidade de queima adiabática de uma mistura. Nele, a perda de calor da chama, inerente à estabilização, é compensada via uma fonte de calor secundária. Isso possibilita a estabilização de chamas aproximadamente adiabáticas, dispensando extrapolações para perda de calor zero e para estiramento de chama zero, necessárias nos demais métodos de medição.

Esse método tem sido bastante explorado nos últimos anos [van Maaren et al., 1994; de Goey et al., 1995; Bosschaart, 2002; Bosschaart e de Goey, 2003; Hermanns, 2007; Meuwissen, 2009; Li et al., 2011; Konnov et al. 2013; Goswami, 2014] e é apresentado detalhadamente nas próximas seções.

#### 2.1.1 Princípio do método

Para melhor explicar o princípio de funcionamento desse método, primeiramente será apresentado o seu queimador, ilustrado na Figura 2.1. Ele é composto por um *plenum* e um cabeçote. O *plenum* tem a função de homogeneizar a mistura não queimada, apresentando uma tela metálica interna com um anteparo para dissipar o jato de mistura que entra pela base. Além disso, ele apresenta uma camisa d'água fria que controla a temperatura da mistura não queimada [van Maaren et al., 1994].

O cabeçote inclui uma camisa d'água quente e uma placa perfurada, sendo projetado para garantir um perfil de velocidades uniforme em sua saída. Uma placa de isolamento térmico localizada entre o cabeçote e o *plenum* impede que o calor da camisa de água quente seja transferido para as demais partes do queimador, evitando o aquecimento indesejado da mistura não queimada. O *design* da placa perfurada permite a estabilização de chamas planas (que se aproximam de chamas unidimensionais) dentro de determinada faixa de velocidades [van Maaren e de Goey, 1994; de Goey et al., 1995].

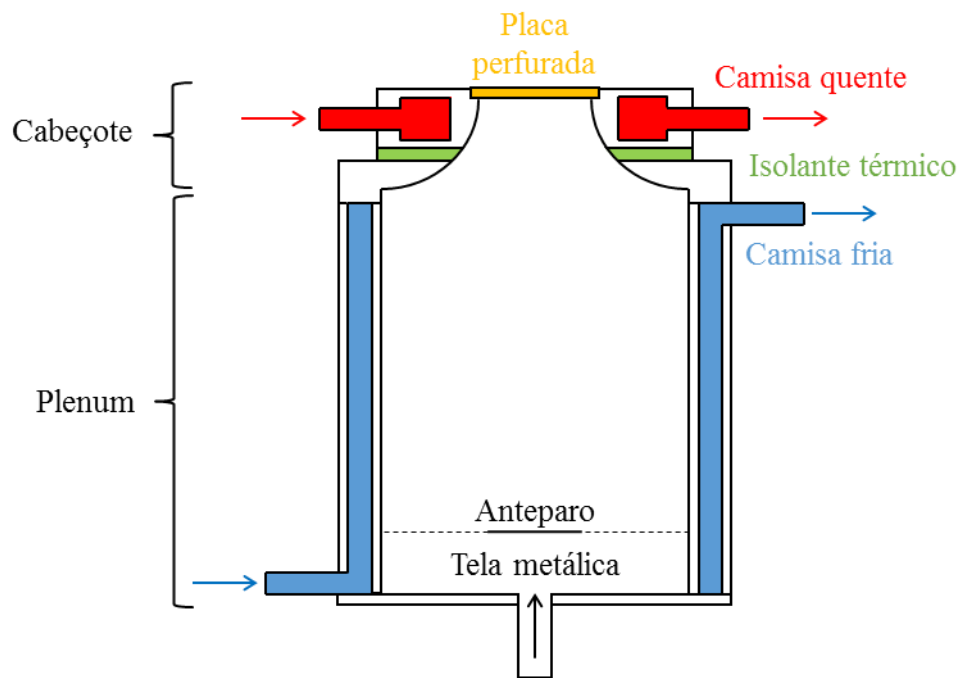


Figura 2.1 – Esquema do queimador do método do fluxo de calor.

As trocas térmicas que ocorrem na placa perfurada são representadas na Figura 2.2. Nela, uma pequena porção da placa – 3 furos – é representada juntamente com as linhas de corrente da mistura que escoam em sentido ascendente. À direita, as setas maiores indicam o calor perdido pela chama para a placa perfurada e as setas menores indicam o calor recebido pela placa para a mistura que passa através dos furos. Esse balanço ocorre em toda a extensão da placa.

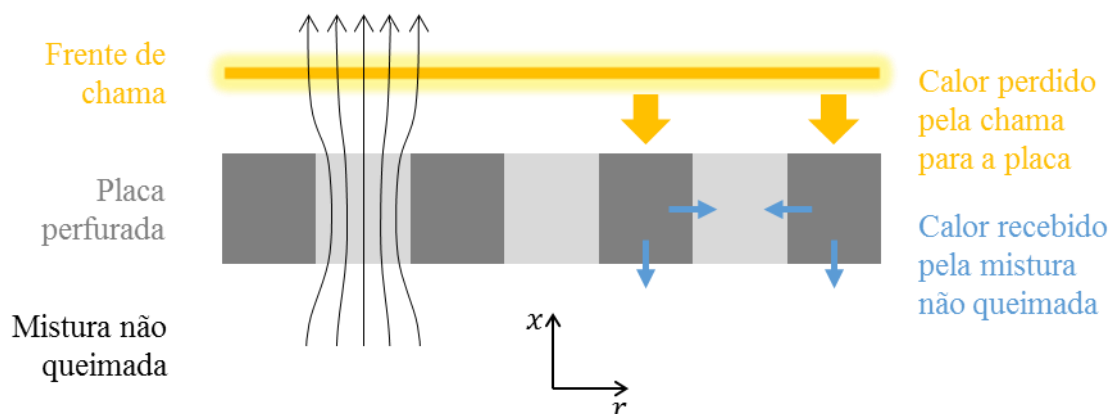


Figura 2.2 – Esboço das trocas térmicas existentes na placa perfurada quando há estabilização de chama.

Se o calor perdido pela chama para a placa for integralmente transferido para a mistura não queimada, o perfil de temperatura da chama estabilizada se assemelha ao de uma chama adiabática de livre propagação [de Goey, 1993], como pode ser observado na Figura 2.3. A região de 0 a  $a$  representa a espessura da placa perfurada e a reta  $T_p$  a sua temperatura aproximada.

A mistura não reagida aumenta sua temperatura a medida que entra em contato com a placa perfurada que está a temperatura  $T_p$ , na região próxima a  $x = 0$ . Próximo ao plano de saída,  $a$ , a temperatura volta a subir devido à perda de calor da chama, estabilizada logo acima da placa. Nota-se que, a partir de  $a$ , o perfil de temperatura é idêntico ao de uma chama de livre propagação, ou seja, a influência da placa no perfil de temperatura da chama se restringe à sua própria espessura.

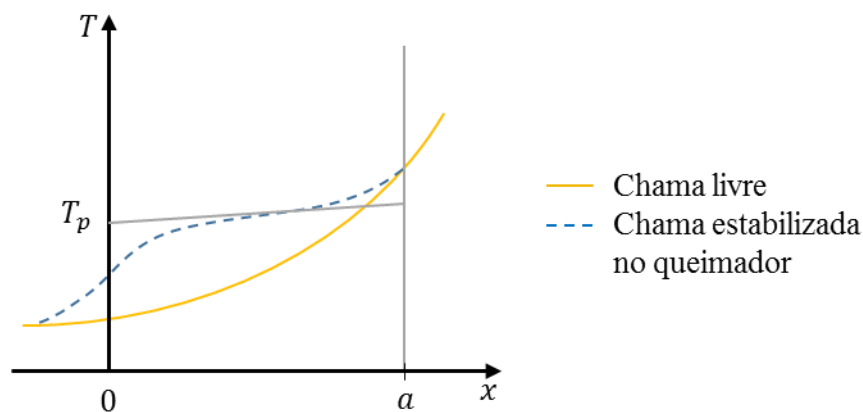


Figura 2.3 – Perfil de temperatura de uma chama livre (linha contínua) e de uma chama estabilizada (linha tracejada).

Devido ao calor recebido da chama, a temperatura da placa é um pouco maior em sua face superior, voltada para a chama. No entanto, a elevada condutividade térmica da placa (feita em latão) possibilita que esse gradiente de temperatura seja desprezível quando comparado ao gradiente dos gases. Adicionalmente, espera-se que a influência da placa seja desprezível por dois motivos: suas temperaturas relativamente baixas, as quais impossibilitam a ocorrência de reações; e a distância de estabilização da chama, a qual é suficientemente grande para que a destruição de radicais na placa seja desprezível. Assim, espera-se e que a chama resultante seja equivalente a uma chama livre [de Goey et al., 1993, de Goey et al., 1995; Bosschaart e de Goey, 2003].

A perda de calor para a periferia do cabeçote, entretanto, gera um gradiente radial de temperatura na placa e altera significativamente o perfil de temperatura descrito acima, afastando-o daquele observado em uma chama de livre propagação. O método do fluxo de calor busca compensar essa perda de calor através da camisa d'água quente, localizada na periferia da placa perfurada, possibilitando, assim, a estabilização de chamas com perda líquida de calor quase nula e, portanto, aproximadamente adiabáticas.

Experimentalmente, assume-se que a chama é adiabática quando não há gradiente radial de temperatura na placa perfurada e, portanto, o seu perfil de temperatura é constante [de Goey, 1993]. Esse perfil é mensurado através de termopares radialmente distribuídos na placa e é dependente da velocidade da mistura que a atravessa. A velocidade que gera um perfil de temperaturas constante na placa é definida como a velocidade de queima laminar adiabática daquela mistura.

A obtenção da velocidade de queima exata de uma mistura é uma tarefa de difícil realização devido à precisão necessária dos equipamentos utilizados no controle da velocidade da mistura. Assim, a velocidade de queima laminar adiabática é encontrada a partir da interpolação entre velocidades de queima próximas da condição adiabática, ou seja, a partir de perfis de temperaturas quase uniformes.

### 2.1.2 Perfil de temperaturas teórico da placa perfurada

No método do fluxo de calor a determinação da velocidade de queima vem da análise do perfil de temperatura da placa perfurada. Uma análise aproximada de tal perfil é apresentada nessa seção seguindo os trabalhos de Bosschaart, 2002, Hermans, 2007, e Goswami, 2014.

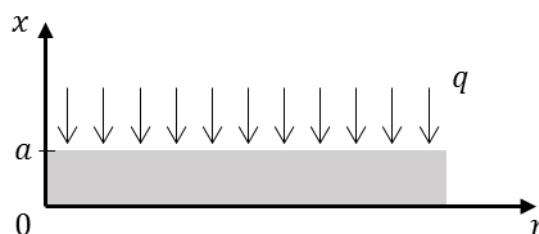


Figura 2.4 – Aproximação da transferência de calor entre chama e placa.

Para a determinação do perfil de temperaturas na placa perfurada, aproxima-se o fenômeno de transferência de calor que ocorre entre a chama e a placa pela situação apresentada

na Figura 2.4. Nela, a mistura entra pela parte inferior da placa perfurada – representada pelo retângulo cinza de espessura  $a$  – e sai pela parte superior da mesma e o calor perdido pela chama para a placa é representado pelo fluxo de calor uniforme  $q$ .

Assumindo-se que a condutividade térmica efetiva da placa  $\lambda_p$  independe da temperatura, a equação de conservação da energia em coordenadas cilíndricas aplicada a essa situação resulta em:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial x} \left[ \lambda_{p,x} \frac{\partial T_p(x,r)}{\partial x} \right] - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ \lambda_{p,r} r \frac{\partial T_p(x,r)}{\partial r} \right] \\ = \gamma(x,r) [T_g(x,r) - T_p(x,r)] \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde  $T_p$  é a temperatura da placa,  $T_g$  a temperatura dos gases,  $\lambda_{p,x}$  a condutividade térmica efetiva da placa na direção axial,  $\lambda_{p,r}$  a condutividade térmica efetiva da placa na direção radial,  $r$  o raio da placa e  $\gamma$  o coeficiente de transferência de calor entre a placa e os gases. A distinção entre as condutividades axial e radial da placa se faz necessária devido aos orifícios existentes no sentido axial.

Integrando-se a Equação (2.1) em  $x$  de 0 à  $a$  (espessura da placa) tem-se:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ \lambda_{p,r} r \frac{\partial}{\partial r} \int_0^a T_p(x,r) dx \right] \\ = \int_0^a \gamma(x,r) [T_g(x,r) - T_p(x,r)] dx + \left[ \lambda_{p,x} \frac{\partial T_p}{\partial x} \Big|_{x=a} - \lambda_{p,x} \frac{\partial T_p}{\partial x} \Big|_{x=0} \right] \\ \equiv q' \end{aligned} \quad (2.2)$$

O primeiro termo do lado direito da equação representa a troca de calor convectiva entre os gases e a placa. Os dois termos seguintes representam as trocas por condução na superfície superior (ganho de calor) e inferior (perda de calor). Logo, os três termos do lado direito podem ser substituídos pela troca líquida de calor entre os gases e a placa  $q'$ .

Define-se  $\bar{T}_p$  como a temperatura média da placa, onde:

$$\bar{T}_p = \frac{1}{a} \int_0^a T_p(x,r) dx \quad (2.3)$$

Substituindo (2.3) na Equação (2.2) tem-se:

$$-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[ \lambda_{p,r} r \frac{d\bar{T}_p}{dr} \right] = \frac{q'}{a} \quad (2.4)$$

Integrando duas vezes, tem-se:

$$\bar{T}_p = -\frac{q'}{4a\lambda_{p,r}} r^2 + C_1 \ln(r) + C_2 \quad (2.5)$$

Finalmente, assume-se que  $\bar{T}_p = T_c$  em  $r = 0$  e que  $T_c$  deve ser finita e chega-se a:

$$\bar{T}_p = T_c - \frac{q'}{4a\lambda_{p,r}} r^2 \quad (2.6)$$

na qual  $T_c$  é a temperatura no centro da placa.

É conveniente definir o coeficiente parabólico  $\zeta$ :

$$\zeta = -\frac{q'}{4\lambda a} \quad (2.7)$$

Assim, substituindo-se (2.7) na Equação (2.6), tem-se:

$$\bar{T}_p(r) = T_c + \zeta r^2 \quad (2.8)$$

A equação acima mostra que a distribuição de temperaturas na placa perfurada tem um perfil parabólico cujo máximo (ou mínimo) se encontra em seu centro e que o gradiente desse perfil depende do último termo dessa equação.

## 2.2 Bancada experimental

Um diagrama da bancada experimental empregada no presente trabalho é ilustrado na Figura 2.5. Nela, a mistura que entra no queimador é ajustada por controladores de vazão mássica, um para cada componente da mistura. Esses, por sua vez, são controlados através de módulos de controle e leitura locais. O queimador utilizado é o mesmo utilizado por Coelho, 2014. Banhos termostáticos são empregados para controlar a temperatura da água e bombeá-la



para as camisas de água quente e fria do queimador. O perfil de temperatura na placa perfurada é obtido através de termopares distribuídos radialmente e ligados a uma unidade de aquisição de dados. A Tabela 2.1 mostra um resumo dos equipamentos utilizados, incluindo função, fabricante e precisão de cada equipamento. Na Tabela 2.2 pode-se observar as configurações dos controladores de vazão e na Tabela 2.3 os dados dos gases utilizados.

Nas seções seguintes, os principais componentes da bancada são discutidos em detalhe.

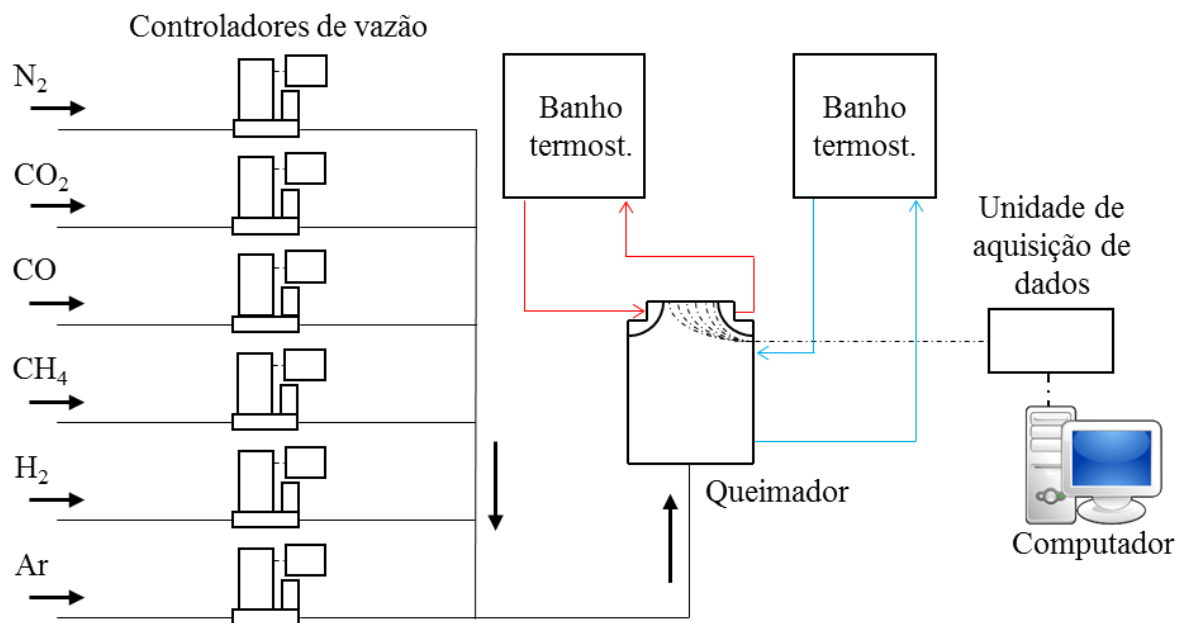


Figura 2.5 – Representação esquemática da bancada experimental base utilizada no presente trabalho.

Tabela 2.1 – Principais componentes da bancada experimental.

Componente	Fabricante	Modelo/Tipo	Função	Precisão*
<b>Controladores de vazão</b>	Bronkhorst	EL-FLOW	Controlar a vazão dos gases	0,5% L + 0,1% FS**
<b>Termopares</b>	OMEGA	Tipo T	Medir o perfil de temperatura da placa	1°C ou 0,75% (maior)
<b>Unidade de aquisição de dados</b>	Keysight	34970A	Traduzir a temperatura indicada pelos termopares	1°C
<b>Banhos termostáticos</b>	Cienlab	CE-110	Controlar a temperatura das camisas fria e quente	-

\*Dados fornecidos pelo fabricante.

\*\*0,5% L + 0,1% FS corresponde a um erro de 0,5% de leitura + 0,1% de fundo de escala.

Tabela 2.2 – Modelos, capacidades de fluidos e calibração dos controladores utilizados.

Modelo	Capacidade [l/min]*	Resolução [l/min]*	Fluido de calibração
<b>F-201CV-10K-AAD-22-V</b>	15	$10^{-2}$	Ar
<b>F-201CV-10K-AAD-22-V</b>	15	$10^{-2}$	N <sub>2</sub>
<b>F-201CV-10K-AAD-22-V</b>	15	$10^{-2}$	N <sub>2</sub>
<b>F-201CV-10K-AAD-22-V</b>	10	$10^{-2}$	CH <sub>4</sub>
<b>F-201CV-500-AAD-22-V</b>	0.5	$10^{-3}$	CH <sub>4</sub>
<b>F-201CV-500-AAD-22-V</b>	0.5	$10^{-3}$	CH <sub>4</sub>

\*A 298 K e 1 atm;

Tabela 2.3 – Pureza dos gases utilizados no presente trabalho.

Gás	Fórmula	Fornecedor	Pureza	Contaminantes* [ppm]
<b>Dióxido de carbono 3.5</b>	CO <sub>2</sub>	Ultra Air	99,950%	Não informado
<b>Hidrogênio 5.0</b>	H <sub>2</sub>	Linde	99,999%	$\leq 3$ H <sub>2</sub> O $\leq 1$ O <sub>2</sub> $\leq 5$ N <sub>2</sub> $\leq 1$ CO+CO <sub>2</sub> $\leq 1$ THC
<b>Metano 2.5</b>	CH <sub>4</sub>	White Martins	99,995%	Não informado
<b>Monóxido de carbono 2.5</b>	CO	Linde	99,500%	Não informado
<b>Nitrogênio 4.5</b>	N <sub>2</sub>	DNA Oxigênio	99,995%	Não informado

\*Dados fornecidos pelo fabricante.

### 2.2.1 Queimador

O queimador, ilustrado na Figura 2.1, é o centro da bancada experimental. Fabricado em latão ( $\lambda_l = 109$  W/m K), ele é composto, como já dito anteriormente, por um *plenum* e um cabeçote.

O *plenum* possui um diâmetro interno de 85 mm e uma altura de 119 mm – 1.35 litros – e suas laterais são envolvidas pela camisa d'água fria a qual é mantida a 298 K. Sua tela metálica interna apresenta 70 fios por polegada (*mesh*) com fios de 0,1 mm de diâmetro e o seu anteparo possui um diâmetro de 30 mm, ambos localizados a 25 mm da entrada da mistura.

O diâmetro interno do cabeçote é gradualmente reduzido de 85 para 30 mm, seguindo um raio de curvatura de 30 mm, o qual, combinado com o *plenum*, tela metálica e anteparo, gera um perfil de velocidades uniforme na saída do queimador [Bosschaart, 2002]. O cabeçote é dividido em três partes: uma placa de isolamento, uma camisa de água quente e a placa perfurada. A placa de isolamento é fabricada em nylon 6.0 com uma condutividade térmica efetiva de 0,25 W/m K, similar ao teflon utilizado em outros trabalhos [Hermanns, 2007; Meuwissen, 2009, Goswami, 2014]. Ela tem a função de isolar termicamente a camisa de água quente e a placa perfurada das demais partes do queimador, evitando o aquecimento indesejado da mistura combustível [Bosschaart, 2002]. A placa perfurada se localiza no fim da seção convergente do bocal do queimador e será devidamente apresentada na seção seguinte.

### 2.2.2 Placa perfurada

A placa perfurada é um disco de latão com 2 mm de espessura e 32 mm de diâmetro, com uma região perfurada de aproximadamente 30 mm de diâmetro. Seu padrão de furação é o mesmo descrito por van Maaren et al., 1994, com furos equidistantes de 0,5 mm de diâmetro e passo de 0,7 mm (Figura 2.6). Essa configuração assegura uma chama plana, com taxas de estiramento e não uniformidades desprezíveis para velocidades de escoamento até 40 cm/s [van Maaren e de Goey, 1994; de Goey et al., 1995; Konnov, 2013].

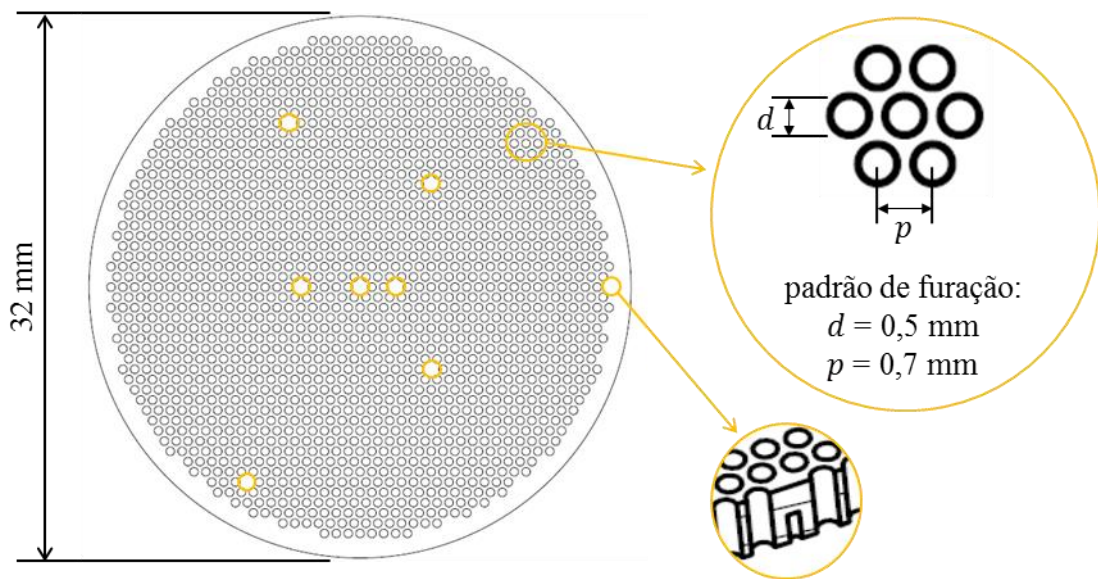


Figura 2.6 – Dimensões, padrão de furação e furos especiais da placa perfurada.

Para posicionar adequadamente os termopares, furos especiais com 1 mm de profundidade (não passantes) e 0,2 mm de diâmetro (espessura do termopar) foram fabricados. Esses furos são distribuídos sobre a placa de maneira a evitar um acúmulo de perturbações locais. Suas localizações podem ser observadas na Figura 2.6 e na Tabela 2.4.

Tabela 2.4 – Localização radial dos termopares.

<b>Termopar</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>	<b>5</b>	<b>6</b>	<b>7</b>	<b>8</b>
<b>Posição radial [mm]</b>	0,15	1,96	4,31	6,36	7,42	11,13	12,38	14,16

### 2.3 Determinação da velocidade de queima

Um perfil de temperaturas constante na placa é de difícil obtenção experimental. Logo, a velocidade de queima laminar adiabática é encontrada a partir da interpolação de velocidades de queima próximas da condição ideal, cada qual com seu perfil de temperaturas característico (Figura 2.7).

O intervalo de variação da velocidade da mistura para cada razão de equivalência é inicialmente estimado a partir dos resultados numéricos e dados recentes da literatura. Isso diminui consideravelmente o esforço necessário para localizar o ponto de inflexão da concavidade do perfil de temperatura (ponto adiabático). Uma vez localizado esse ponto, reduz-se o intervalo de variação e o passo entre variações de modo a aumentar a resolução na região próxima à inflexão.

O perfil de temperaturas experimental é obtido a partir das médias das temperaturas indicadas por cada termopar em um intervalo de tempo de 30 segundos, com 1 medição por segundo, totalizando 30 medições – amostra recomendada para uma confiabilidade de 95% [Moffat, 1988]. Medições cujas diferenças entre as temperaturas máximas e mínimas apontadas por um dado termopar foram superiores a 0,5 K nesse intervalo de tempo foram descartadas. O perfil de temperatura teórico (Equação (2.8)) é agora ajustado ao experimental, resultando nos parâmetros  $T_c$  e  $\zeta$ .

A adiabaticidade da chama é determinada pelo coeficiente parabólico  $\zeta$ . Um  $\zeta$  negativo indica uma perda líquida de calor da chama para o queimador, traduzindo-se em um perfil de temperatura cuja concavidade se encontra para baixo. Já um  $\zeta$  positivo indica um ganho líquido de calor, cujo perfil de temperatura é uma curva com a concavidade para cima (Figura 2.7). Um  $\zeta$  nulo representaria, portanto, uma chama adiabática.

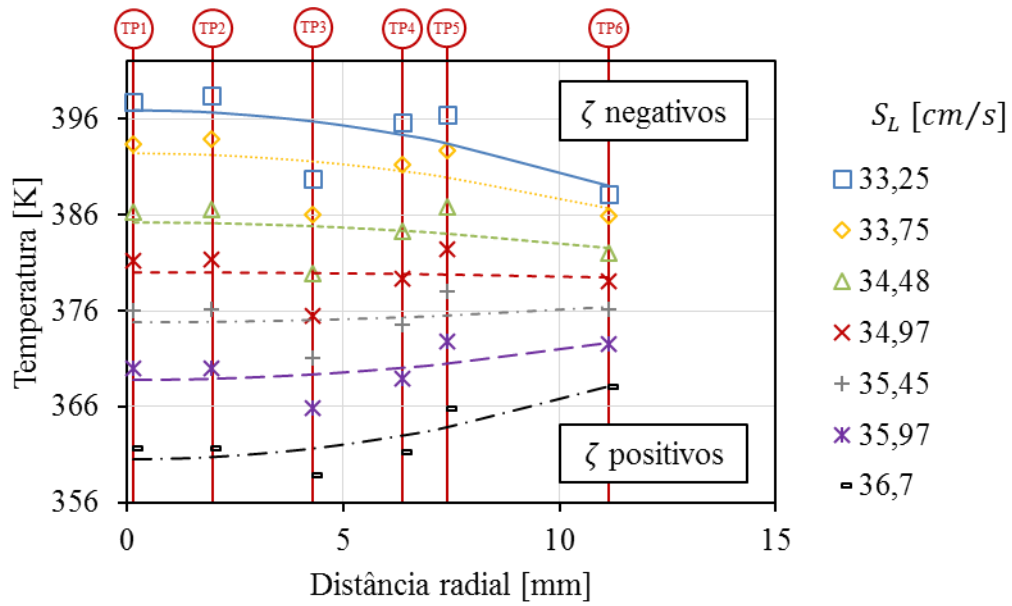


Figura 2.7 – Perfis de temperatura experimentais (pontos) e teóricos ajustados (linhas) para diferentes velocidades de escoamento para combustão de metano e ar em condições ambientes e  $\phi = 1$ .

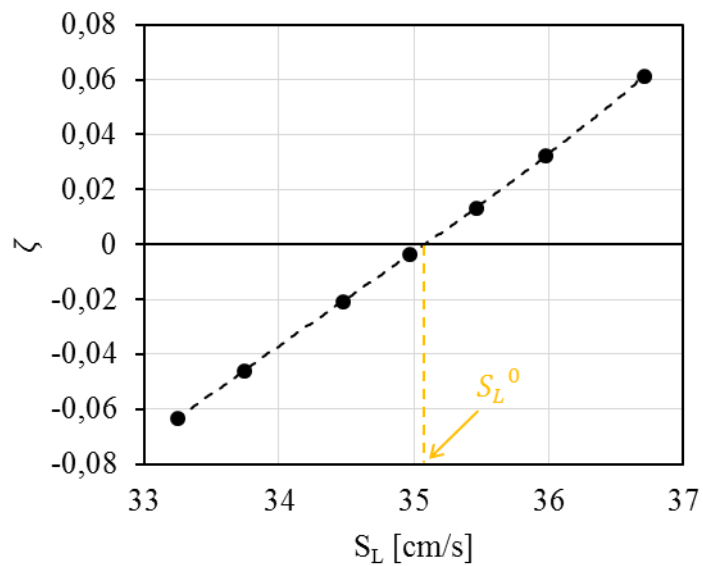


Figura 2.8 – Coeficiente parabólico  $\zeta$  em razão da velocidade de escoamento e seu polinômio ajustado para uma dada razão de equivalência. A seta indica a intersecção entre o polinômio e  $\zeta = 0$ .

Para encontrar a velocidade da mistura correspondente ao  $\zeta$  nulo, e portanto  $S_L^0$ , ajusta-se um polinômio de terceira ordem [Li et al., 2011] –  $R^2$  maior que 0,999 – aos pontos descritos pelo coeficiente parabólico em função da velocidade de escoamento (Figura 2.8). A velocidade de chama adiabática,  $S_L^0$ , corresponde à intersecção entre o polinômio ajustado e  $\zeta = 0$ .

### 2.3.1 Área unidimensional

Alguns estudos [van Maaren e de Goey, 1994; Konnov et al., 2013] observaram diferenças significativas entre as velocidades axiais centrais e periféricas da mistura logo acima da placa perfurada. No escoamento frio, quando não há chama, o perfil de velocidades apresenta pequenas flutuações ao longo da placa com picos notáveis em sua periferia, principalmente em velocidades mais elevadas (~30 cm/s). Isso faz com que a velocidade média dentro da área unidimensional da placa seja diferente da velocidade média da placa. Essa diferença, entretanto, parece não exceder 2% da velocidade média da placa.

A região onde essas flutuações são suficientemente pequenas corresponde a uma região de diâmetro inferior a 80% do diâmetro da placa perfurada e, portanto, uma chama estabilizada nessa região pode ser considerada unidimensional [Konnov et al., 2013]. Essa aproximação foi confirmada por Bosschaart et al., em 2001, através da técnica *coherent anti-stokes Raman scattering* (CARS) de medição de temperaturas.

No presente trabalho, o termopar mais distante do centro utilizado na obtenção do perfil de temperatura da placa perfurada é o termopar 6 que se encontra a 11,13 mm do centro da placa, como pode ser observado na Figura 2.7. Isso corresponde a aproximadamente 75% do diâmetro total da placa e, portanto, localiza-se dentro da região unidimensional da chama.

### 2.3.2 Controle da razão de equivalência e fatores de correção para a vazão

Outra dificuldade experimental encontrada foi a manutenção da razão de equivalência da mistura para diferentes velocidades de escoamento, de modo que a mesma permanecesse constante. Isso se deve à resolução limitada dos controladores de vazão, o que resulta em vazões aproximadas das teóricas que, em certos casos, gera uma mistura com razão de equivalência ligeiramente diferente da desejada. Sem um controle cuidadoso desse parâmetro, o que ocorre é a comparação de perfis de temperatura na placa para misturas de razões de equivalência diferentes.

Assim, velocidades cuja razão de equivalência da mistura apresentaram uma diferença superior a  $10^{-3}$  da desejada foram descartadas. Isso limitou o passo de variação da velocidade para a geração dos perfis de temperatura na placa perfurada.

Em algumas situações do presente trabalho, controladores foram utilizados no controle de gases diferentes daqueles para os quais eles foram calibrados. Como a vazão indicada pelo controlador é dependente das propriedades do gás controlado, nessas situações, a utilização de fatores de correção para as vazões indicadas pelos controladores se faz necessária. O fator de correção,  $F$ , adotado é aquele indicado pelo fabricante, ou seja:

$$F = \frac{C_{p_{cal}} \cdot \rho_{cal}}{C_{p_m} \cdot \rho_m} \quad (2.9)$$

onde  $C_{p_{cal}}$  e  $C_{p_m}$  são os calores específicos e  $\rho_{cal}$  e  $\rho_m$  as massas específicas dos gases calibrado e medido respectivamente.

### 2.3.3 Correção para posicionamento irregular dos termopares

Uma análise da Figura 2.7 revela desvios sistemáticos das temperaturas obtidas pelos termopares em relação aos perfis teóricos. Esse fenômeno foi atribuído ao posicionamento irregular dos termopares, uma vez que há um gradiente axial de temperatura na placa. No presente trabalho, adota-se a correção proposta por Bosschaart e de Goey, 2003, para essa irregularidade, a qual será apresentada a seguir.

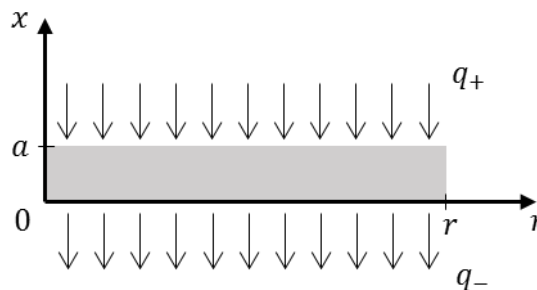


Figura 2.9 – Aproximação dos fenômenos de transferência de calor que ocorrem na placa.

O fenômeno de transferência de calor na placa perfurada é novamente modelado como um problema bidimensional, dessa vez representado pela Figura 2.9. Assume-se que não há

troca de calor entre a mistura e a placa dentro da mesma [Rook, 2001] e que a periferia da placa,  $r$ , encontra-se a uma temperatura constante  $T$ . Assume-se também que há um fluxo de calor  $q_+$  que entra na placa pela sua superfície superior ( $x = a$ ) e um fluxo  $q_-$  que sai pela sua superfície inferior ( $x = 0$ ). O fluxo de calor líquido da chama para a placa é dado por  $q = q_+ - q_-$  resultando em uma temperatura  $T_c$  no centro da placa. A equação de energia aplicada a placa resulta em:

$$\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial^2 T_p(x, r)}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_p(x, r)}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_p(x, r)}{\partial r^2} = 0 \quad (2.10)$$

onde  $T_p$  é a temperatura da placa e  $\epsilon$  pode ser definido como:

$$\epsilon = \frac{\lambda_{p,r}}{\lambda_{p,x}} \quad (2.11)$$

de modo a considerar a influência dos furos na condutividade radial da placa [van Maaren, 1994]. Assume-se que  $\lambda_{p,r}$  e  $\lambda_{p,x}$  são independentes da temperatura e, portanto, constantes.

As condições de contorno utilizadas na solução da equação (2.10) são:

$$\left. \frac{\partial T_p(x, r)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (2.12)$$

$$\left. \frac{\partial T_p(x, r)}{\partial x} \right|_{x=0} = q_- \quad (2.13)$$

$$\left. \frac{\partial T_p(x, r)}{\partial x} \right|_{x=a} = q_+ \quad (2.14)$$

$$T_p(0,0) = T_c \quad (2.15)$$

correspondendo à simetria radial, ao calor perdido e recebido pela placa e à temperatura no centro da placa, respectivamente. A solução da Equação (2.10) com as condições de contorno (2.12) a (2.15) foi obtida por Bosschaart e de Goey, 2003, resultando em:

$$T_p(x, r) = (T_c + \zeta r^2)(1 + C \epsilon \zeta a x) \quad (2.16)$$



onde  $C$  é uma constante. Comparando-se as Equações (2.8) e (2.16), nota-se que o problema foi estendido por um fator que contém o coeficiente parabólico  $\zeta$  e a posição  $x$ , correspondente ao posicionamento axial efetivo do termopar. Esse parâmetro é fixo para cada termopar. Logo, a correção é diferente para cada termopar, proporcional ao coeficiente parabólico  $\zeta$  e parece apresentar um comportamento linear, como pode ser observado na Figura 2.10. Nela, as diferenças entre as temperaturas indicadas por cada termopar e a curva teórica ajustada ao conjunto de temperaturas (Figura 2.7) são mostrados em função do coeficiente parabólico  $\zeta$ .

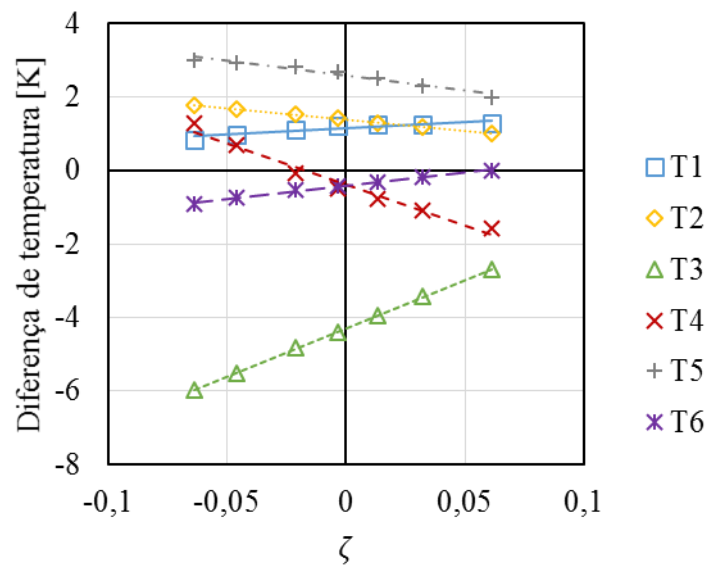


Figura 2.10 – Diferença entre a temperatura medida e a curva teórica ajustada para cada termopar em razão do coeficiente parabólico  $\zeta$  para  $\phi = 1$ .

A correção efetivamente aplicada a cada termopar é função do ajuste linear realizado aos residuais desse termopar para todas as razões de equivalências estudadas. A dispersão dos resíduos e o ajuste linear da correção de cada termopar podem ser observados na Figura 2.11 e os perfis de temperaturas corrigidos na Figura 2.12. O aumento na concordância entre as temperaturas corrigidas e o perfil teórico ajustado é significativo. Vale a pena ressaltar que essa correção não altera os coeficientes parabólicos dos perfis teóricos e, portanto, não altera as velocidades de queima obtidas anterior à sua aplicação.

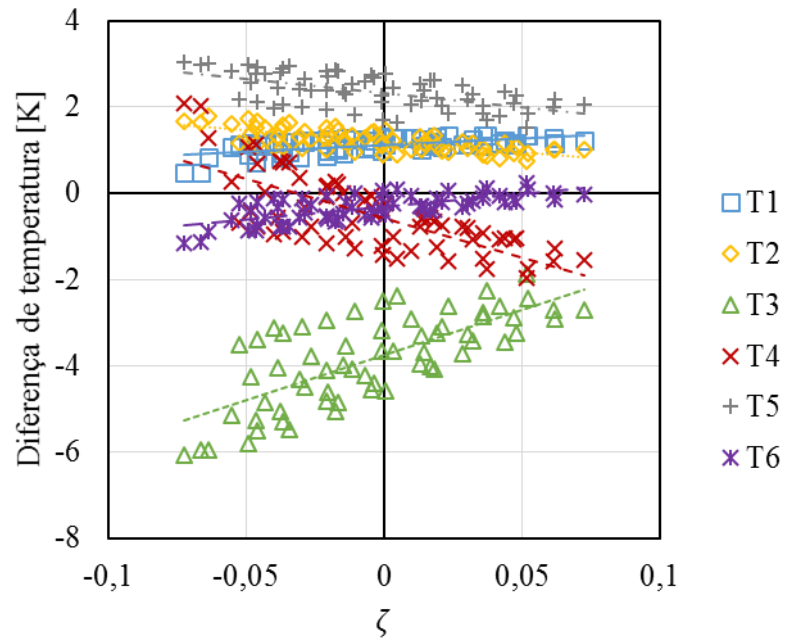


Figura 2.11 – Residuais de cada termopar em função do coeficiente parabólico para  $0,7 \leq \phi \leq 1,4$ .

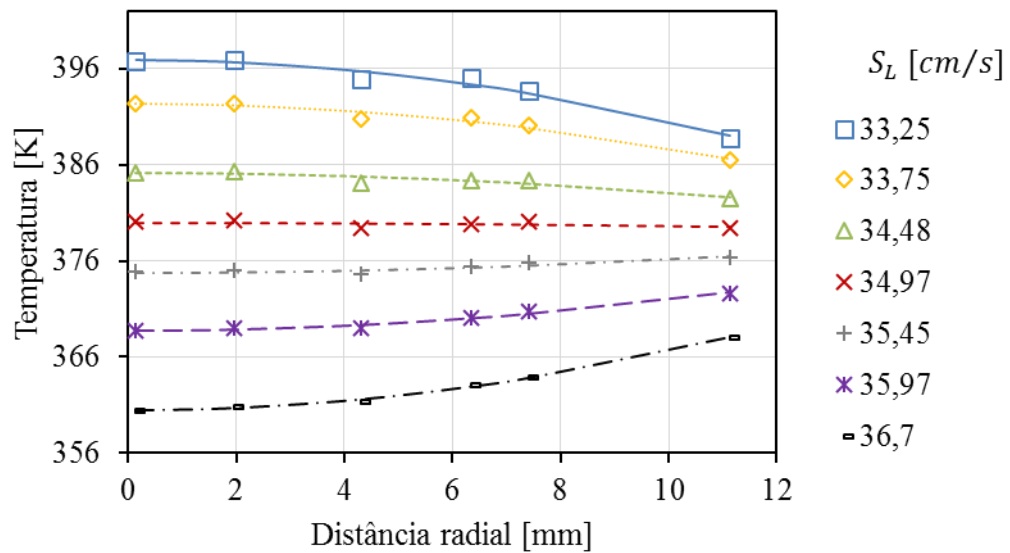


Figura 2.12 – Perfis de temperaturas corrigidos para a combustão de metano e ar em condições ambientes e  $\phi = 1$ .

### 2.3.4 Propagação de incertezas

Segundo Moffat, 1988, o efeito da incerteza em uma medida  $b_i$  sobre o resultado calculado  $RC = RC(b_1, b_2, b_3, \dots, b_N)$ , se apenas essa medida apresentasse incertezas, seria:

$$\delta RC_{b_i} = \frac{\partial RC}{\partial b_i} \delta b_i \quad (2.17)$$

onde  $\delta b_i$  é a incerteza em  $b_i$  e  $\delta RC_{b_i}$  a incerteza resultante em  $RC$ . A derivada parcial  $\delta RC / \delta b_i$  é definida como o coeficiente de sensibilidade do resultado  $RC$  em relação a medida  $b_i$ . Quando incertezas estão presentes em diversas variáveis independentes da função  $RC$ , o efeito combinado de todas as incertezas é dado pela raiz da soma dos quadrados do efeito individual de cada incerteza:

$$\delta RC = \sqrt{\sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial RC}{\partial b_i} \delta b_i \right)^2} \quad (2.18)$$

#### 2.3.4.1 Incerteza na razão de equivalência

A razão de equivalência,  $\phi$ , é calculada através da seguinte relação:

$$\phi = \frac{\dot{m}_{comb}}{\frac{1}{p_e} \dot{m}_{ar}} \quad (2.19)$$

na qual  $\dot{m}_{comb}$  é a vazão mássica de combustível,  $\dot{m}_{ar}$  a vazão mássica de ar e  $p_e$  a proporção estequiométrica mássica entre oxidante e combustível. Assim, a incerteza global da razão de equivalência  $\delta\phi$  é dada por:

$$\delta\phi = \sqrt{\left( \frac{1}{\frac{1}{p_e} \dot{m}_{ar}} \delta\dot{m}_{comb} \right)^2 + \left( -\frac{\dot{m}_{comb}}{\frac{1}{p_e} \dot{m}_{ar}^2} \delta\dot{m}_{ar} \right)^2} \quad (2.20)$$

onde  $\delta\dot{m}_{comb}$  é a incerteza na vazão mássica de combustível e  $\delta\dot{m}_{ar}$  a incerteza na vazão mássica de ar. A vazão mássica de combustível é a soma das vazões mássicas de seus  $i$  componentes:

$$\dot{m}_{comb} = \sum_{i=1}^N \dot{m}_i \quad (2.21)$$

E sua incerteza é dada por:

$$\delta\dot{m}_{comb} = \sqrt{\sum_{i=1}^N (\delta\dot{m}_i)^2} \quad (2.22)$$

As incertezas  $\delta\dot{m}_i$  e  $\delta\dot{m}_{ar}$  são calculadas a partir das incertezas nas vazões volumétricas  $\delta\dot{Q}_i$  indicadas pelo medidor:

$$\delta\dot{m}_i = \frac{\partial\dot{m}_i}{\partial\dot{Q}_i} \delta\dot{Q}_i = \rho_i \delta\dot{Q}_i \quad (2.23)$$

onde  $\rho_i$  é a massa específica do componente  $i$  nas condições de medição (298 K e 1 atm). A incerteza volumétrica adotada é aquela indicada pelo fabricante: 0,5% de leitura + 0,1% de fundo de escala.

#### 2.3.4.2 Incerteza na velocidade de queima adiabática

No método do fluxo de calor, a velocidade de queima adiabática é dada por:

$$S_L^0 = \frac{\dot{Q}}{A} \quad (2.24)$$

onde  $\dot{Q}$  é a vazão volumétrica da mistura que passa pela placa perfurada e  $A$  a área perfurada da placa. Desse modo, a incerteza na velocidade de queima adiabática devido à incerteza na vazão volumétrica,  $\delta S_L^0$ , é dada por:

$$\delta S_{L\dot{Q}}^0 = \frac{\partial \delta S_L^0}{\partial \dot{Q}} \delta \dot{Q} = \frac{1}{A} \delta \dot{Q} \quad (2.25)$$

onde a incerteza da vazão mássica da mistura  $\delta \dot{Q}$  é dada pela raiz da soma dos quadrados das incertezas das vazões de seus  $i$  componentes:

$$\delta \dot{Q} = \sqrt{\sum_{i=1}^N (\delta \dot{Q}_i)^2} \quad (2.26)$$

De maneira análoga, a incerteza na velocidade de queima adiabática causada pela incerteza na área perfurada,  $\delta S_{L_A}^0$ , é dada por:

$$\delta S_{L_A}^0 = \frac{\partial \delta S_L^0}{\partial A} \delta A = -\frac{\dot{Q}}{A^2} \delta A \quad (2.27)$$

onde  $\delta A$  é a incerteza na área perfurada:

$$\delta A = \frac{\pi d_A}{2} \delta d_A \quad (2.28)$$

onde  $d_A$  é o diâmetro da área perfurada e  $\delta d_A$  a sua incerteza. No presente trabalho, considera-se o diâmetro da área perfurada como o diâmetro do final do bocal do queimador, logo abaixo da placa perfurada (30 mm), e a sua incerteza como a precisão do processo de usinagem empregado em sua fabricação (0,1 mm).

Mesmo após a correção das temperaturas dos termopares devido ao seu posicionamento irregular, ainda há desvios entre as temperaturas corrigidas e o perfil de temperatura teórico ajustado. Segundo Dyakov et al., 2001, esses desvios possivelmente surgem pela variação de pressão e temperatura dentro do *plenum* do queimador, as quais podem divergir das do ambiente. No presente trabalho, essas incertezas são estimadas seguindo a metodologia proposta por Boschaart e de Goey, 2003 a qual será descrita a seguir.

A Figura 2.13 mostra o pior cenário possível (maior incerteza) no ajuste do perfil teórico de temperaturas. Nela, um perfil de temperaturas constante é interpretado como um perfil

inclinado devido ao desvio remanescente dos termopares central e periférico. Aplicando a Equação (2.8) a essa situação e assumindo  $\sigma_{tp}$  como sendo o desvio padrão remanescente geral dos termopares pós correção, chega-se na incerteza no coeficiente parabólico  $\delta\zeta$  nas proximidades de  $\zeta = 0$ :

$$\delta\zeta = \frac{4\sigma_{tp}}{r_e^2} \quad (2.29)$$

onde  $r_e$  é a posição radial do termopar mais externo utilizado na determinação do perfil de temperatura da placa, como ilustrado na Figura 2.13.

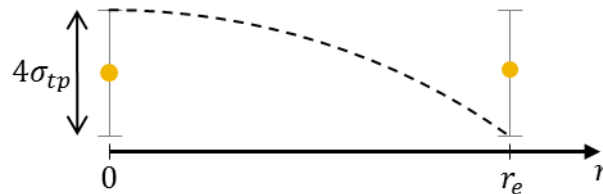


Figura 2.13 – Estimativa da incerteza do coeficiente parabólico devida ao desvio  $\sigma_{tp}$  da medida do termopar. O termopar em  $r_e$  é o mais externo utilizado nas medições. A linha tracejada indica a pior parábola possível devido às incertezas dos termopares quando ambos marcam temperaturas idênticas.

A incerteza resultante da velocidade de queima é obtida multiplicando-se  $\delta\zeta$  pela sensibilidade da velocidade de queima em relação ao coeficiente parabólico:

$$\delta S_L^0 \zeta = \left. \frac{\partial S_L^0}{\partial \zeta} \right|_{\zeta=0} \frac{4\sigma_{tp}}{r_e^2} \quad (2.30)$$

a qual pode ser determinada durante o procedimento de interpolação. Uma função sensibilidade foi determinada ajustando-se as sensibilidades, encontradas dos resultados das interpolações, a um polinômio de segunda ordem.

A incerteza global da velocidade de queima é dada pela raiz da soma dos quadrados das incertezas da vazão volumétrica, da área e do desvio dos termopares:

$$\delta S_L^0 = \sqrt{(\delta S_L^0_{\dot{q}})^2 + (\delta S_L^0_A)^2 + (\delta S_L^0_{\zeta})^2} \quad (2.31)$$

A curva resultante (Figura 2.14), gerada a partir de uma mistura de metano e ar com  $\sigma_{tp} = 0,42$  K e  $r_e = 11,13$  mm, explicita a maior precisão do método do fluxo de calor para razões de equivalência próximas da mistura estequiometria, onde a chama tem as maiores velocidades [Boschaart e de Goey, 2003]. A influência de cada uma das fontes de incertezas na incerteza global da velocidade de queima pode ser observada na Tabela 2.5.

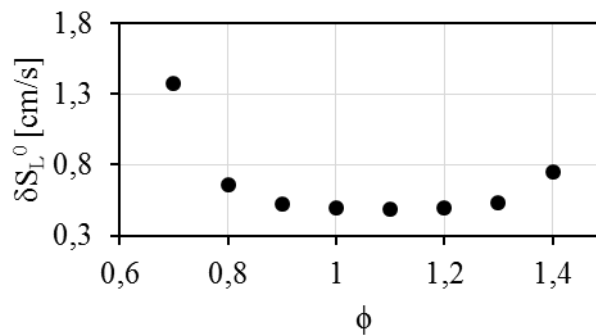


Figura 2.14 – Incerteza global em  $S_L^0$  em função da razão de equivalência de uma mistura de metano e ar.

Tabela 2.5 – Influência de cada uma das fontes de incertezas na incerteza global de  $S_L^0$ .

$\phi$	$\delta S_L^0_{\dot{q}}$ [cm/s]	$\delta S_L^0_A$ [cm/s]	$\delta S_L^0_{\zeta}$ [cm/s]	$\delta S_L^0$ [cm/s]
<b>0,7</b>	0,11	0,10	1,37	1,38
<b>0,8</b>	0,15	0,16	0,62	0,66
<b>0,9</b>	0,18	0,20	0,45	0,53
<b>1</b>	0,20	0,23	0,39	0,50
<b>1,1</b>	0,20	0,24	0,38	0,49
<b>1,2</b>	0,18	0,21	0,41	0,49
<b>1,3</b>	0,15	0,16	0,49	0,54
<b>1,4</b>	0,11	0,11	0,74	0,75

## 2.4 Método numérico

### 2.4.1 Equações governantes

Quimicamente, escoamentos reativos são governados por um conjunto de equações que descrevem a conservação e massa total, quantidade de movimento, energia e massa das espécies químicas. A velocidade de queima pode ser obtida através da solução desse conjunto de equações na sua versão unidimensional em regime permanente, as quais são apresentadas a seguir.

#### 2.4.1.1 Equação de conservação de massa total

A equação da conservação de massa total, também chamada de equação da continuidade, para uma chama unidimensional é expressa como:

$$\rho_{nq} S_L^0 = \rho u = \text{constante} \quad (2.32)$$

na qual  $u$  é a velocidade axial,  $\rho$  a massa específica e  $\rho_{nq}$  a massa específica da mistura não queimada. Para baixos números de Mach, pode-se assumir que a massa específica da mistura depende apenas da temperatura:

$$\rho = \frac{P_{ref}}{RT} \quad (2.33)$$

onde  $P_{ref}$  é a pressão de referência (ambiente),  $R$  a constante da mistura ( $R = R_u/\bar{M}$ , onde  $R_u$  é a constante universal dos gases e  $\bar{M}$  é o massa molecular média da mistura) e  $T$  a temperatura.

#### 2.4.1.2 Equação de conservação de massa das espécies químicas

Em um escoamento reativo, equações de transporte para cada espécie presente na mistura são necessárias. Assim para cada espécie escreve-se:

$$\frac{\partial \rho_{nq} S_L^0 Y_i}{\partial x} = \frac{\partial \rho U_i Y_i}{\partial x} + \dot{\omega}_i \quad (2.34)$$

na qual  $\dot{\omega}_i$  é a taxa de produção (ou consumo) da espécie  $i$  (considerando todas as reações nas quais tal espécie está envolvida),  $U_i$  sua velocidade de difusão e  $Y_i$  sua fração mássica definida



como  $Y_i = \rho_i/\rho$ , onde  $\rho_i$  é a densidade da espécie  $i$  na mistura. A velocidade de difusão  $U_i$ , em uma mistura multicomponente, é modelada por:

$$U_i = \frac{1}{X_i \bar{M}} \sum_{j=1}^{N_s} \left( M_j D_{ij} \frac{\partial X_j}{\partial x} - \frac{D_i^T}{\rho Y_i T} \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (2.35)$$

onde  $X_i$  e  $X_j$  são as frações molares das espécies  $i$  e  $j$  respectivamente,  $M_j$  a massa da espécie  $j$ ,  $D_{ij}$  o coeficiente de difusão multicomponente,  $D_i^T$  o coeficiente de difusão térmica da espécie  $i$  e  $N_s$  o número de espécies. A Equação (2.35) mostra que a difusão de massa é causada por gradientes de concentração (primeiro termo) e gradientes térmicos (segundo termo), também conhecido por difusão de Soret. A difusão de Soret é mantida devido a presença de  $H_2$  na mistura [Bongers e de Goey, 2003]. A difusão por gradientes de pressão é desprezada. Mais detalhes sobre o cálculo dos termos difusivos podem ser encontrados em Sommers, 1994.

#### 2.4.1.3 Equação de transporte da energia

A equação que descreve o transporte da energia, é dada por:

$$\frac{\partial \rho_{nq} S_L^0 h}{\partial x} = \frac{\partial q}{\partial x} \quad (2.36)$$

onde  $h$  é a entalpia da mistura, dada por:

$$h = \sum_{i=1}^{N_s} Y_i h_i \quad (2.37)$$

e onde  $h_i$  é a entalpia da espécie  $i$ , dada por:

$$h_i = h_{i,ref} + \int_{T_0}^T C_{p_i}(T) dT \quad (2.38)$$

sendo  $h_{i,ref}$  a entalpia da espécie  $i$  na condição de referência (298 K e 1 atm),  $T_{ref}$  a temperatura de referência (298 K) e  $C_{p_i}$  o calor específico da espécie  $i$ . O fluxo de calor  $q$  é modelado por:

$$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \sum_{i=1}^{N_s} h_i \rho Y_i U_i - R_u T \sum_{i=1}^N \frac{D_i^T}{X_i M_i} \frac{\partial X_i}{\partial x} \quad (2.39)$$

onde  $\lambda$  é a condutividade térmica da mistura. O primeiro termo do lado direito dessa equação representa a difusão de calor por gradientes de temperatura. O segundo termo representa a difusão de calor em função da difusão de massa das espécies. O fluxo de calor de segunda ordem devido ao gradiente de difusão (efeito Dufour) é representado pelo terceiro termo da equação [Bongers e de Goey, 2003].

#### 2.4.2 Estratégia computacional

As simulações numéricas do presente trabalho foram conduzidas utilizando o modelo de propagação livre, laminar e unidimensional do Chem1D [Somers, 1994]. O Chem1D é um software de simulação numérica de chamas unidimensionais laminares desenvolvido pelo grupo de estudos de combustão da Universidade Tecnológica de Eindhoven (TU/e) utilizado em diversos estudos [Bosschaart, 2002; Bosschaart e de Goey, 2004; Hermanns, 2007; Meuwissen, 2009; Goswami, 2014].

O Chem1D resolve as equações diferenciais apresentadas na seção anterior através do método de Newton modificado totalmente implícito [Somers, 1994]. No presente trabalho a abordagem matemática utiliza uma malha de referência que se move juntamente com a frente de chama. Assim, a vazão mássica,  $\rho_{nq} u_{nq}$ , imposta como condição de contorno é uma variável do problema e não um parâmetro fixo e, portanto, torna-se um autovalor do conjunto de equações diferenciais [Smooke et al., 1983].

Nas simulações, as recomendações de Bongers e de Goey, 2003, foram seguidas a fim de aumentar a precisão nas previsões das velocidades de queima: as propriedades de transporte foram avaliadas utilizando o modelo de transporte multicomponente, e a difusão térmica (efeito de Soret) foi incluída no cálculo devido a presença de hidrogênio nos reagentes. Nenhuma perda de calor por radiação foi considerada nas simulações pois as existentes no queimador não influenciam significativamente a  $S_L^0$  [Bosschaart et al., 2001; Hermanns, 2007; Li et al., 2011].

Uma malha adaptativa é utilizada a fim de aumentar o refino na frente de chama, onde ocorrem a maioria das reações de combustão. Essa malha posiciona a maioria dos pontos da malha (~80%) na região de maiores gradientes – frente de chama. Detalhes dos parâmetros de simulação utilizados podem ser observados na Tabela B.1 no Apêndice B.

O domínio computacional utilizado para as simulações vai de  $x = -0.5$  a  $x = 2$  cm com 300 pontos na malha. De acordo com Hermanns, 2007, essa quantidade de pontos na malha é suficiente para soluções estáveis quando utilizado um esquema de discretização exponencial (*Power-Law*). O ar foi modelado como uma mistura 21% O<sub>2</sub> e 79% N<sub>2</sub> em volume.

### 2.4.3 Mecanismos estudados

Os mecanismos avaliados pelo presente trabalho podem ser observados na Tabela 2.6. O Gri-Mech 3.0 [Smith et al., 1999] é um mecanismo desenvolvido para a combustão de gás natural (predominantemente metano) extensivamente validado a partir de experimentos envolvendo: atraso de ignição, perfis de espécies químicas e velocidades de queima; correspondendo a um intervalo de pressões de 0,01 a 10 atm e razões de equivalência de 0,1 a 5 em chamas pré-misturadas. Ele inclui reações envolvendo outros hidrocarbonetos leves e formação de NO<sub>x</sub> e, por isso, é bastante utilizado em estudos envolvendo metano [Bosschaart, 2002; Hermanns, 2007; Goswami, 2014], biogás [Kishore et al., 2008; Cardona e Amell, 2013] e syngas [Liu et al., 2010; He et al., 2014].

O mecanismo desenvolvido por Konnov, em 2005, é o mecanismo mais extenso estudado no presente trabalho com 127 espécies e 1027 reações e foi validado a partir de experimentos similares aos utilizados pelo Gri-Mech 3.0. Davis et al., 2005, desenvolveram um mecanismo para prever o comportamento da combustão de misturas H<sub>2</sub>-CO. Otimizado a partir de estudos similares aos utilizados pelo Gri-Mech 3.0, ele é utilizado em estudos da combustão do gás de síntese, principalmente quando ele é considerado uma mistura binária [Natarajan et al., 2007; Prathap et al., 2008].

O USC-Mech II, assim como o mecanismo de Davis et al., foi especialmente desenvolvido para a combustão de H<sub>2</sub> e CO, porém ainda inclui alguns hidrocarbonetos C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>. Ele foi desenvolvido a partir de diversos mecanismos e estudos [Davis e Law, 1999; Wang, 2001; Davis et al., 2005; Smallbone et al., 2009] e incorpora atualizações recentes de termodinâmica, cinética e transporte de espécies, relevantes na oxidação de hidrogênio, monóxido de carbono e hidrocarbonetos C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> a altas temperaturas, sendo utilizado em alguns estudos envolvendo *syngas* [Vu et al., 2009; He et al., 2014].

O mecanismo San Diego [Petrova e Williams, 2006] foi desenvolvido para autoignição, deflagração, detonação e chamas difusivas de diversos hidrocarbonetos. Ele se restringe a pressões inferiores a 100 atm e razões de equivalência inferiores a 3 para chamas pré-misturadas.

Tabela 2.6 – Mecanismos utilizados no presente trabalho em ordem de complexidade e suas características.

<b>Mecanismo</b>	<b>Referência</b>	$N_s$	$N_r^*$	$S_L^{0**}$ [cm/s]
<b>Davis</b>	Davis et al., 2005	14	38	36,63
<b>San Diego</b>	Petrova e Williams, 2006	37	177	34,41
<b>Gri-Mech 3.0</b>	Smith et al., 1999	53	325	36,63
<b>USC-Mech II</b>	Wang et al., 2001	111	784	34,88
<b>Konnov</b>	Konnov, 2005	127	1207	34,21

\*Número de reações.

\*\*Velocidades de queima para misturas de metano e ar a 298 K, 1 atm e  $\phi = 1$ .

## 3 RESULTADOS

### 3.1 Metano

Misturas de metano e ar são, possivelmente, as misturas mais estudadas na literatura devido a sua simplicidade e importância prática. Quando se trata de medições de velocidades de queima, essas misturas são amplamente utilizadas na validação de métodos [de Goey et al., 1993] e montagens experimentais [Boschaart, 2002; Qin e Ju, 2005; Kishore et al., 2008; Meuwissen, 2009; Li et al., 2011; Goswami 2014] para medição da velocidade de queima de misturas cuja participação de metano em sua composição é considerável, como é o caso do biogás. Elas também são utilizadas em estudos envolvendo a influência da pressão [Goswami et al, 2013], temperatura [Hermans et al., 2010] e diluentes [Lowry et al, 2011] na velocidade de queima. No presente trabalho a bancada experimental e o método utilizado são validados através de medições de misturas de metano e ar e comparação com a literatura, os quais são apresentados a seguir. As medições das velocidades de queima de misturas de metano e ar foram realizadas com a versão mais simples da bancada experimental, empregando apenas dois controladores de vazão (um para metano e um para o ar).

Devido à grande quantidade de dados disponível na literatura referente à velocidade de queima de misturas de metano e ar, a análise dos resultados obtidos no presente trabalho é realizada em etapas. Primeiramente, uma comparação entre os resultados do presente trabalho e medições mais recentes da literatura a 298 K e 1 atm é realizada. Em seguida, a comparação entre os resultados numéricos e experimentais do presente trabalho é apresentada de modo a avaliar a capacidade preditiva dos mecanismos estudados. Por fim, as incertezas obtidas são comentadas e justificadas.

Na Figura 3.1 dados recentes da literatura são comparados às medições do presente trabalho. Nota-se uma boa concordância entre os resultados de Hermans, 2007, Park, 2011 e Goswami, 2014 para  $0,8 \leq \phi \leq 1,1$ . Os resultados obtidos mostraram uma boa concordância geral com a literatura, ficando abaixo dos reportados por Hermans, 2007, Park, 2011 e Goswami, 2014 para  $0,7 \leq \phi \leq 1$  e se aproximando mais daqueles reportados por Boschaart, 2002, e Lowry et al., 2011, nessa região. Para  $\phi > 1$ , os resultados do presente trabalho ficaram dentro da dispersão existente na literatura. A velocidade de queima máxima encontrada (35,77 cm/s) ocorreu em  $\phi = 1,1$  como esperado. O valor encontrado para a  $S_L^0$  em  $\phi = 1$

(35,08 cm/s) apresentou uma diferença de 0,52 cm/s ( $\sim 1,5\%$ ) da média dos dados da literatura. Instabilidades na chama impediram medições precisas para  $\phi < 0,7$ .

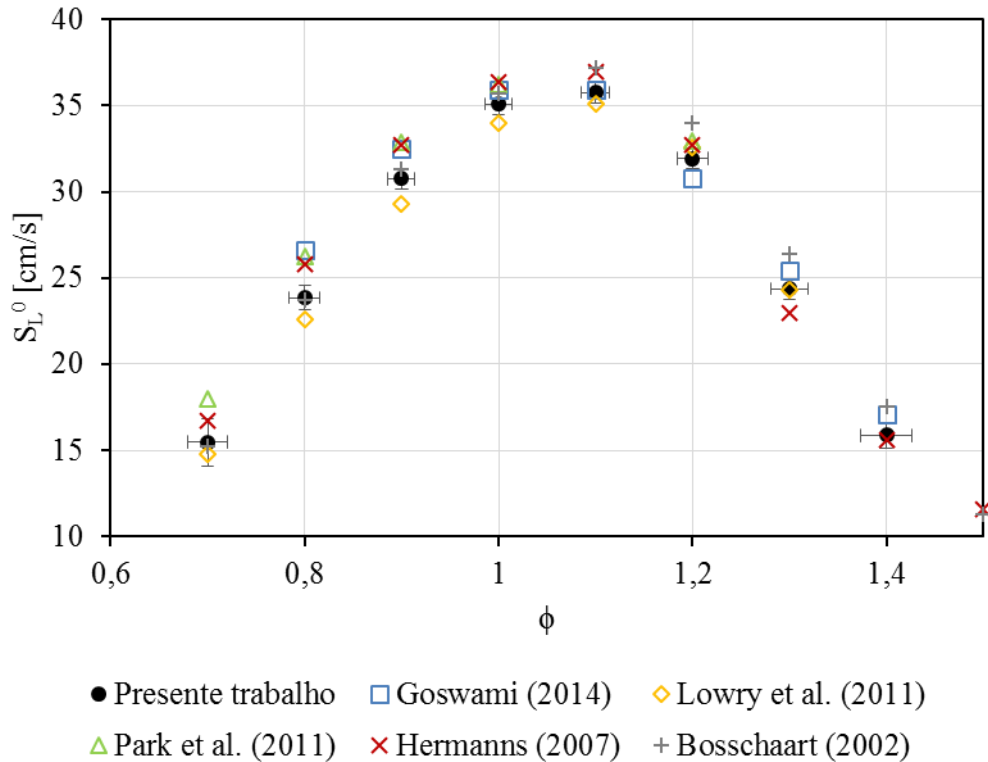


Figura 3.1 – Comparação entre os resultados experimentais do presente trabalho e dados recentes da literatura. O método do fluxo de calor foi utilizado por Goswami, 2014, Hermanns, 2007 e Bosschaart, 2002. Lowry et al., 2011, utilizou o método de chama de expansão esférica e Park et al., 2011, o método de jatos opostos.

A comparação entre os resultados experimentais e numéricos do presente trabalho pode ser observada na Figura 3.2. Os resultados experimentais apresentaram divergências em relação às previsões dos mecanismos estudados se encontrando abaixo das previsões médias para  $0,7 \leq \phi < 1$  e acima para  $1 < \phi \leq 1,4$ . Isso talvez seja causado por algum erro nos controladores de vazão o que poderia resultar em um erro sistemático da razão de equivalência.

O mecanismo com a melhor concordância geral foi o de Konnov com uma diferença média de 1,42 cm/s dos dados experimentais e um coeficiente de determinação de 0,9497 em relação aos dados experimentais, sendo seguido pelo mecanismo San Diego com  $R^2 = 0,9476$ . Mesmo apresentando a melhor previsão da velocidade de queima em  $\phi = 1$ , com uma diferença de apenas 0,17 cm/s dos resultados experimentais, o mecanismo USC II foi o que apresentou a

menor concordância geral, com uma diferença média de 1,92 cm/s e  $R^2 = 0,9054$ . Nota-se a total coincidência entre os resultados dos mecanismos GRI-Mech 3.0 e de Davis et al.

Dividindo-se a zona de comparação em três regiões distintas: pobre; rica e estequiométrica, pode-se observar que cada região apresenta um mecanismo que melhor previu os resultados experimentais. Na região pobre, compreendida entre  $0,7 \leq \phi < 1$ , o mecanismo que apresentou uma melhor concordância com os resultados experimentais foi o de Konnov, com uma diferença média de 0,62 cm/s e máxima de 1,19 cm/s e  $R^2 = 0,9890$ . O mecanismo San Diego apresentou a melhor previsão para a região rica, compreendida entre  $1,1 \leq \phi < 1,4$ , com uma diferença média de 1,45 cm/s e máxima de 1,77 cm/s e  $R^2 = 0,9629$ . Para  $\phi = 1$ , o mecanismo que apresentou uma melhor previsão do resultado experimental foi o USC Mech II, como já dito anteriormente. Adicionalmente, parece haver uma maior discordância entre os resultados dos mecanismos nas regiões pobre e estequiométrica e uma maior concordância na região rica.

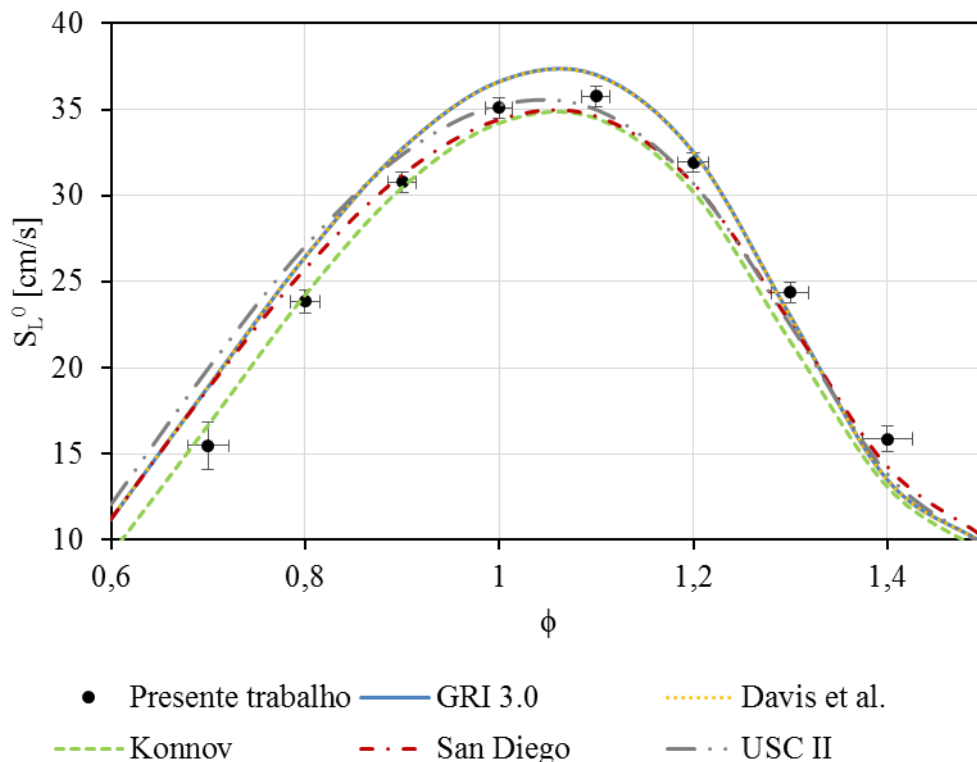


Figura 3.2 – Comparação entre resultados numéricos e experimentais do presente trabalho.

As incertezas encontradas foram inferiores mas se comportaram de forma similar às relatadas na literatura, com  $\delta\phi_{min} = 0,014$  em  $\phi = 1,0$  e  $\delta S_{L_{min}} = 0,57$  cm/s em  $\phi = 1,1$ .

As maiores incertezas foram encontradas nas regiões extremamente pobres e ricas, com  $\delta\phi_{m\acute{a}x} = 0,026$  em  $\phi = 1,4$  e  $\delta S_{Lm\acute{a}x} = 1,38 \text{ cm/s}$  em  $\phi = 0,7$ , mostrando o maior impacto de incertezas aleatórias nas medições de temperatura para regiões de menor velocidade de queima [Dyakov et al., 2001]. Para a região compreendida entre  $0,8 \leq \phi \leq 1,3$ , a incertezas relativas encontradas não passou dos 2,8%, classificando os resultados de misturas de metano e ar do presente trabalho, segundo Li et al., 2011, como úteis para o desenvolvimento de modelos. O resumo completo dos resultados experimentais e suas incertezas é apresentado na seção D.1.1 no Apêndice D.

### 3.2 H<sub>2</sub>/CO

Analogamente às misturas de metano e ar, uma mistura que vem sendo utilizada na literatura para a validação de montagens experimentais [Natarajan et al., 2007; Sun et al., 2007; He et al., 2014] na medição de misturas contendo grandes quantidades de CO – como é o caso do gás de síntese – é a medição da velocidade de queima uma mistura formada 5% por H<sub>2</sub> e 95% por CO, em volume. Adicionalmente, estudos realizados por Hermanns et al., 2007 e Goswami et al., 2014, concluíram que o método do fluxo de calor está apto a realizar medições em misturas contendo H<sub>2</sub> em sua composição com precisão. Assim, o presente trabalho realiza a validação de sua bancada experimental para a medição da velocidade de queima de *syngas* utilizando essa mesma metodologia. As medições das velocidades de queima dessa mistura foram realizadas empregando três controladores de vazão (um para o H<sub>2</sub>, um para o CO e um para o ar).

Na Figura 3.3 pode-se observar a comparação entre os resultados do presente trabalho e dados recentes da literatura para  $0,6 \leq \phi \leq 1$ . Essa faixa de medição é utilizada, tanto pelo presente trabalho quanto pela literatura, devido às altas velocidades de queima de misturas com razões de equivalência mais elevadas, as quais estão fora do limite de medição de alguns métodos (incluindo o método do fluxo de calor). De maneira similar aos resultados obtidos para a mistura de metano e ar, os resultados obtidos para a mistura 5% H<sub>2</sub>/95% CO foram inferiores aos presentes na literatura, com uma diferença média de 2,66 cm/s da média da literatura. Não obstante, as medições do presente trabalho apresentaram o mesmo comportamento de trabalhos mais recentes com um aumento da velocidade de queima similar, proporcionalmente, com um aumento no  $\phi$  [Natarajan, 2007; He et al., 2014].



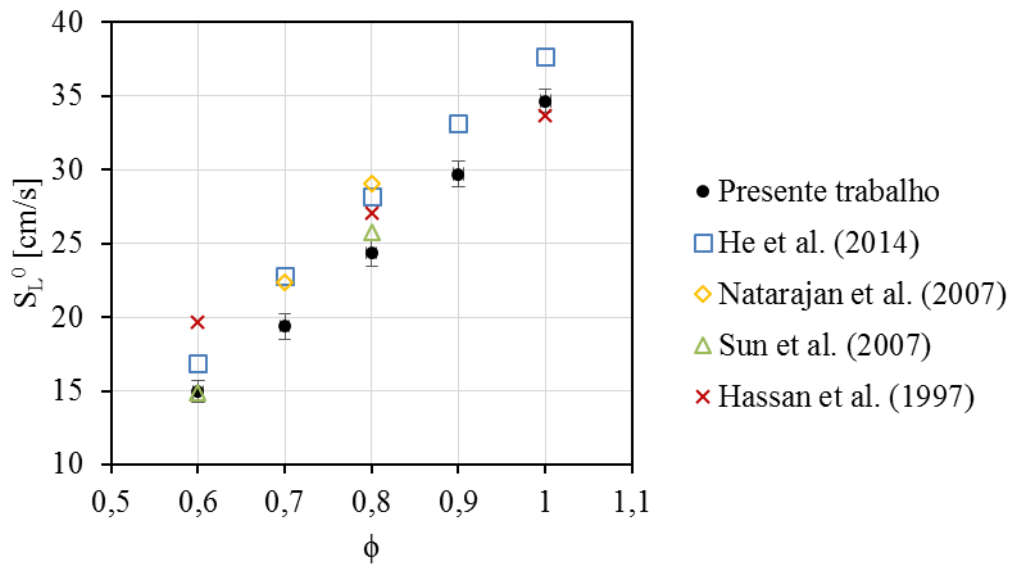


Figura 3.3 – Comparação entre resultados experimentais do presente trabalho e dados da literatura. He et al, 2014, e Natarajan et al., 2007, utilizaram o método do fluxo de calor e o do bico de Bunsen respectivamente. O método da chama esférica e expansão foi utilizado por Sun et al., 2007, e Hassan et al., 1997.

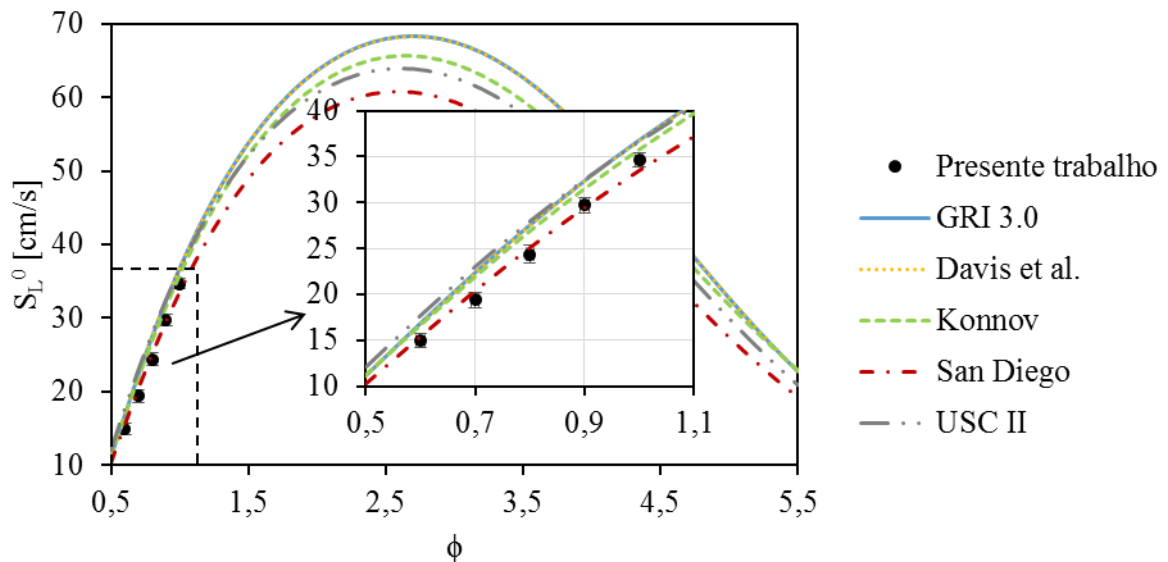


Figura 3.4 – Comparação entre resultados numéricos e experimentais do presente trabalho.

A comparação entre os resultados numéricos e experimentais é apresentada na Figura 3.4. Nela, o intervalo de medição em relação à curva das velocidades de queima obtidas numericamente pode ser melhor observada. Dos cinco mecanismos estudados, aquele que

apresentou melhor concordância com as medições foi o de San Diego, com uma divergência média de 0,7 cm/s e um  $R^2$  igual a 0,9867. Os demais mecanismos sobestimaram as velocidades de queima obtidas experimentalmente, com um destaque para o mecanismo USC Mech II com uma diferença média de 3,04 cm/s das medições. Adicionalmente, as discordâncias entre o mecanismo San Diego e os demais parecem aumentar com a razão de equivalência para a região estudada. As discrepâncias entre as previsões dos mecanismos são consideráveis e máximas na região próxima a velocidade de queima máxima.

As incertezas encontradas não foram maiores que 0,91 cm/s e a menor incerteza encontrada ocorreu em  $\phi = 0,6$  (0,74 cm/s). As incertezas na razão de equivalência encontradas foram consideravelmente menores que as obtidas para misturas de metano e ar devido à proporção estequiométrica da mistura  $H_2/CO$  ser quase quatro vezes menor. Diferente do ocorrido nos resultados apresentados na Figura 2.14, as incertezas encontradas para  $\phi = 0,6$  são inferiores às encontradas para  $\phi = 0,7$ . As incertezas parecem diminuir novamente ao se aproximar da região estequiométrica como pode ser observado na Figura 3.5. Isso se deve ao comportamento da sensibilidade  $\partial S_L^0 / \partial \zeta$  apresentado por essa mistura, sendo menor para  $\phi = 0,6$  e  $\phi = 1$  e maior para  $\phi = 0,8$ .

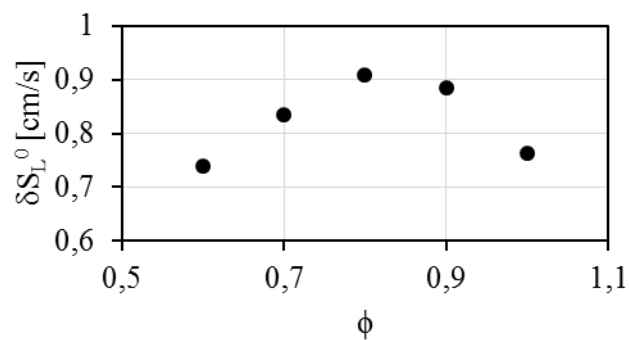


Figura 3.5 – Erros absolutos na  $S_L^0$  em função da razão de equivalência.

Durante os experimentos, uma chemi-luminescência (Figura 3.6) inesperada foi observada para todas as razões de equivalência estudadas – misturas pobres. Aparentemente, tal luminescência só ocorre em misturas contendo CO. Entretanto, nada foi relatado na literatura em estudos dessas misturas com o presente método e sua influência na velocidade de queima é incerta. Houve também uma deposição de material (pó avermelhado) na placa perfurada no decorrer dos experimentos (Figura 3.7). Por essa razão existem incertezas desconhecidas na medição da velocidade de queima de misturas contendo CO.

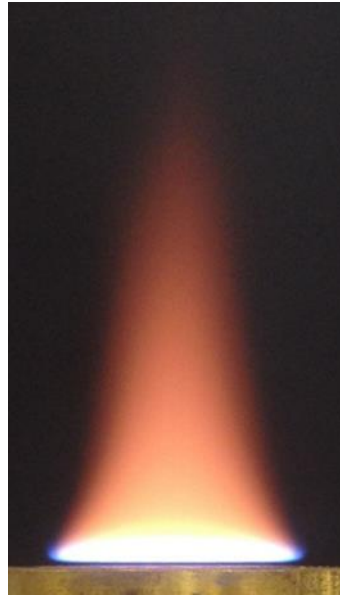


Figura 3.6 – Estranha chemi-luminescência observada nos experimentos de validação. Chama correspondente a uma mistura de  $\phi = 0,6$  com velocidade de escoamento de 14,99 cm/s.

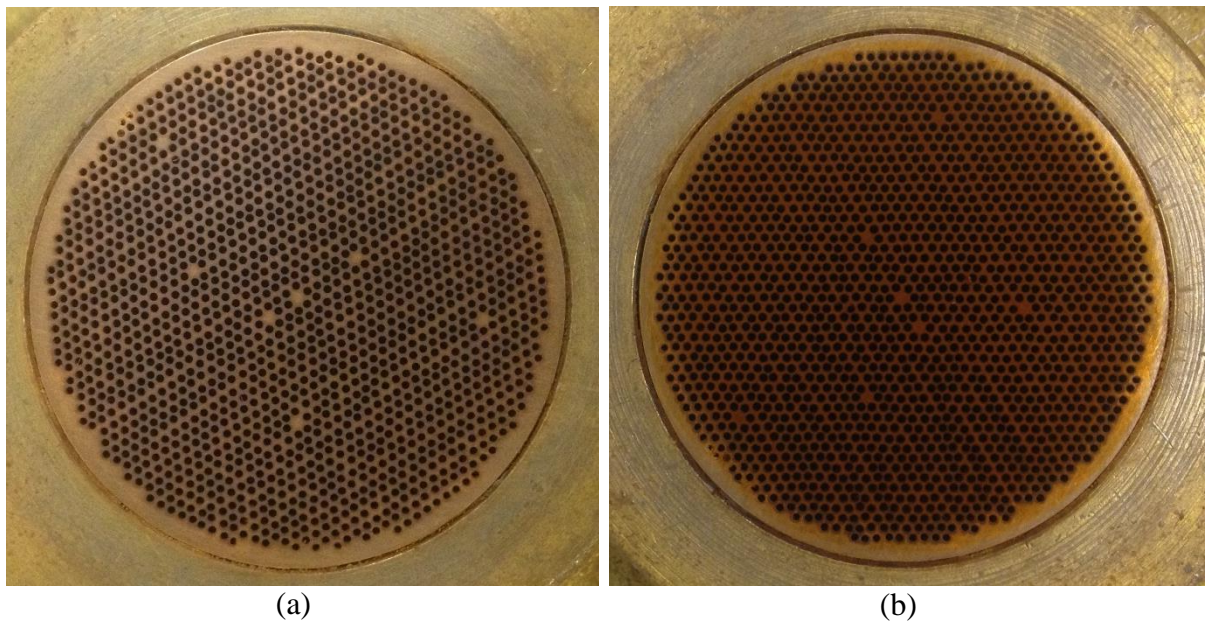


Figura 3.7 – Placa perfurada (a) antes e (b) depois dos experimentos. Observa-se um acúmulo de material na face superior da mesma.

### 3.3 Biogás

Como já dito anteriormente, apesar de existirem estudos envolvendo a velocidade de queima de misturas similares ao biogás na literatura [Kishore et al, 2008; Cardona e Amell, 2013; Hinton e Stone, 2014], a falta de padronização entre suas condições experimentais atrapalha a comparação entre seus resultados. O presente trabalho explora as mesmas condições padrão utilizadas para misturas de metano e ar (298 K e 1 atm) para a medição e comparação das velocidades de queima de misturas de biogás com diferentes níveis de CO<sub>2</sub> (de 10 a 50% em volume). As medições das velocidades de queima dessas misturas foram realizadas com dois controladores de vazão de capacidade 0,5 l/min em paralelo para o CO<sub>2</sub> a fim de aumentar a precisão do controle desse componente (10<sup>-3</sup> l/min de resolução). Essa configuração se fez necessária devido à demanda do gás em diluições mais elevadas (40 e 50%). Isso resultou na utilização de quatro controladores para as medições (um para o CH<sub>4</sub>, dois para o CO<sub>2</sub> e um para o ar).

Apesar da escassez de dados na literatura, a presente seção adota a mesma metodologia empregada na seção 3.1 para a análise dos resultados obtidos para misturas de biogás (metano e dióxido de carbono) e ar: comparação entre resultados experimentais e literatura, seguido pela comparação entre os resultados numéricos e experimentais e, por fim, a análise das incertezas encontradas.

Na Figura 3.8 pode-se observar a comparação entre dados recentes da literatura e as medições do presente trabalho para níveis de 20 e 40% de diluição com CO<sub>2</sub>. Infelizmente, os trabalhos encontrados na literatura foram realizados em condições diferentes das do presente trabalho, dificultando a comparação entre resultados obtidos. Os resultados do presente trabalho ficaram um pouco abaixo daqueles relatados por Kishore et al., 2008, realizados a uma temperatura maior (307 K). As divergências encontradas entre ambos são semelhantes às encontradas entre os resultados do presente trabalho e da literatura para metano. Uma comparação entre os resultados do presente trabalho e os apresentados por Cardona e Amell, 2013, não foi possível devido as diferenças consideráveis entre condições experimentais (0,828 atm e 34% de diluição em CO<sub>2</sub>).

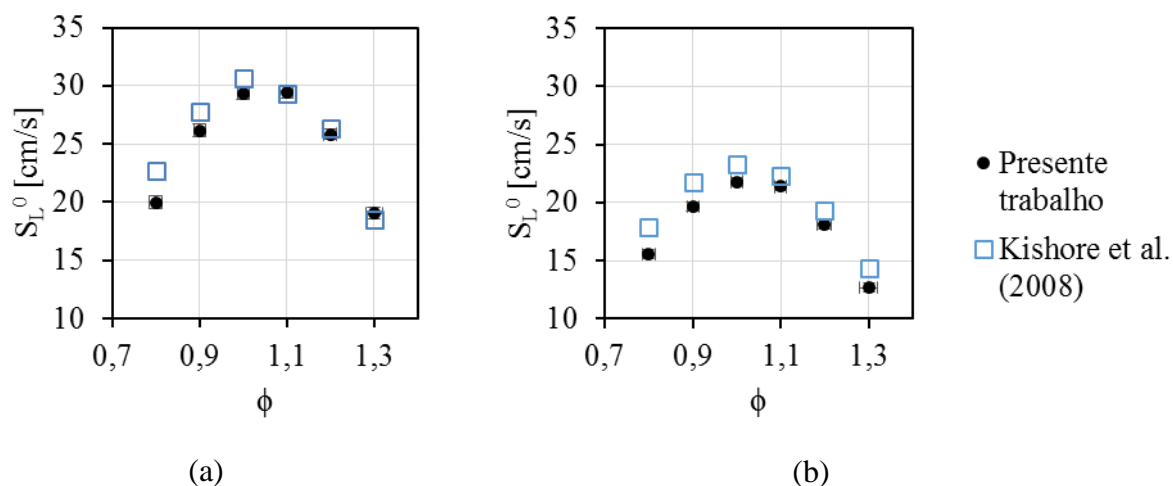


Figura 3.8 – Comparação entre resultados experimentais do presente trabalho e dados recentes da literatura para diluições de 20% (a) e 40% (b). As medições realizadas por Kishore et al., 2008, foram realizadas a 307 K e 1 atm.

A comparação entre os resultados numéricos e experimentais do presente trabalho pode ser observada na Figura 3.9. As medições se comportaram como esperado: uma maior presença de dióxido de carbono na mistura diminui a sua temperatura de chama uma vez que o  $\text{CO}_2$  absorve parte do calor gerado pela combustão devido ao seu elevado calor específico. Isso reduz as taxas das reações de oxidação de  $\text{CO}$  e  $\text{H}_2$  e, portanto, a velocidade de queima [Natarajan et al., 2007]. Para todos os níveis de diluição estudados, as maiores reduções na velocidade de queima foram observadas em  $\phi > 1$ . A redução média no intervalo estudado ( $0,8 < \phi < 1,3$ ) foi de 7,51% para 10% de diluição com  $\text{CO}_2$  e 51,89% para 50% de diluição. O resumo das reduções nas velocidades de queima para todas as diluições estudadas pode ser observado na Tabela E.8 no Apêndice D.

Os resultados experimentais apresentaram uma concordância razoável com os mecanismos estudados, com destaque para o mecanismo de San Diego para diluições de 10% com um coeficiente de determinação de 0,9514 e para o mecanismo de Konnov para diluições de 20% e superiores. A capacidade preditiva dos mecanismos estudados parece decair com o aumento do nível de diluição, principalmente para razões de equivalência inferiores a 1 (misturas pobres). Isso pode indicar a necessidade de otimização de tais mecanismos para condições de elevada diluição.

Os resultados numéricos seguiram a mesma tendência dos obtidos para misturas de metano e ar: uma maior discordância para as regiões pobre e estequiométrica e uma maior concordância para rica. Isso ocorreu em todas as composições de biogás estudadas. Para níveis

de diluição superiores a 30% observou-se uma superestimação geral das velocidades de queima para  $\phi \leq 1$ . Já para  $\phi > 1$  houve uma maior concordância entre os resultados numéricos e os resultados experimentais com o aumento dos níveis de diluição. Além disso, as previsões dos mecanismos GRI-Mech 3.0 e de Davis et al. coincidiram novamente, em todas as misturas estudadas.

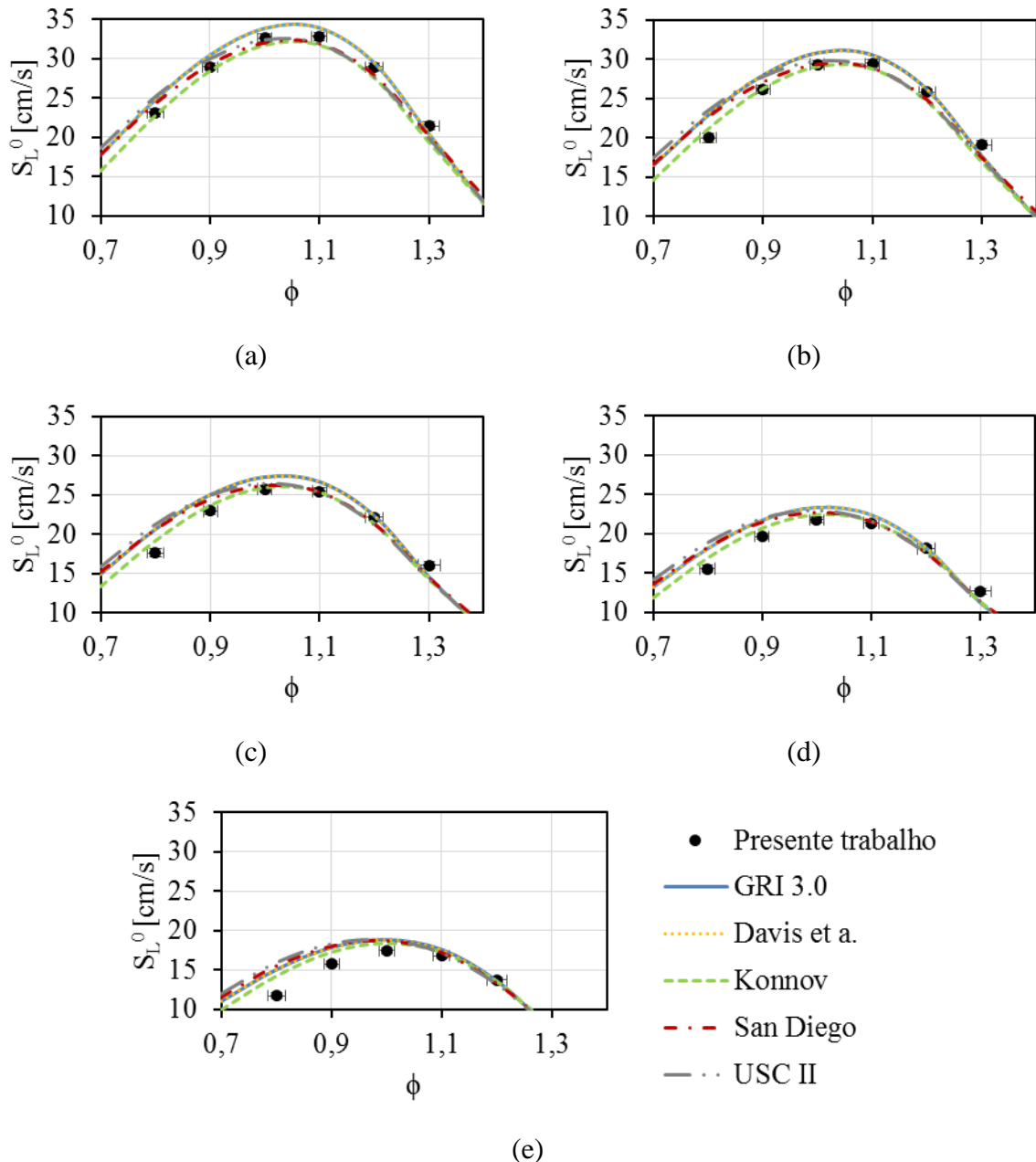


Figura 3.9 – Comparação entre os resultados numéricos e experimentais da velocidade de queima de misturas de biogás com diferentes níveis de  $\text{CO}_2$  – 10% (a), 20% (b), 30% (c), 40% (d) e 50% (e) – e ar para razões de equivalência de 0,8 a 1,3.

Outro ponto interessante observado é a mudança do ponto de máxima velocidade de queima com o aumento da presença de  $\text{CO}_2$ , também observada por Kishore et al., 2008, tanto nos resultados numéricos como experimentais. Isso pode ser observado comparando os gráficos (a) e (e) da Figura 3.9, correspondentes aos níveis de diluição de 10 e 50% respectivamente. No primeiro, nota-se que a velocidade de queima em  $\phi = 1,1$  é levemente superior à velocidade em  $\phi = 1$  e que o ponto de máxima velocidade está entre ambas razões de equivalência. Já no segundo, a velocidade de queima em  $\phi = 1,1$  é notavelmente inferior à velocidade em  $\phi = 1$ , deslocando o ponto de máxima em direção da região pobre do gráfico (esquerda). Esse fenômeno é justificado pela alteração do ponto de máxima temperatura devido à presença de um diluente ( $\text{CO}_2$ ) como pode ser observado na Figura 3.10. A diluição com  $\text{CO}_2$  altera a composição de equilíbrio dos produtos da combustão e conseqüentemente muda o calor específico da mistura. O resultado é o deslocamento verificado do ponto de máxima temperatura.

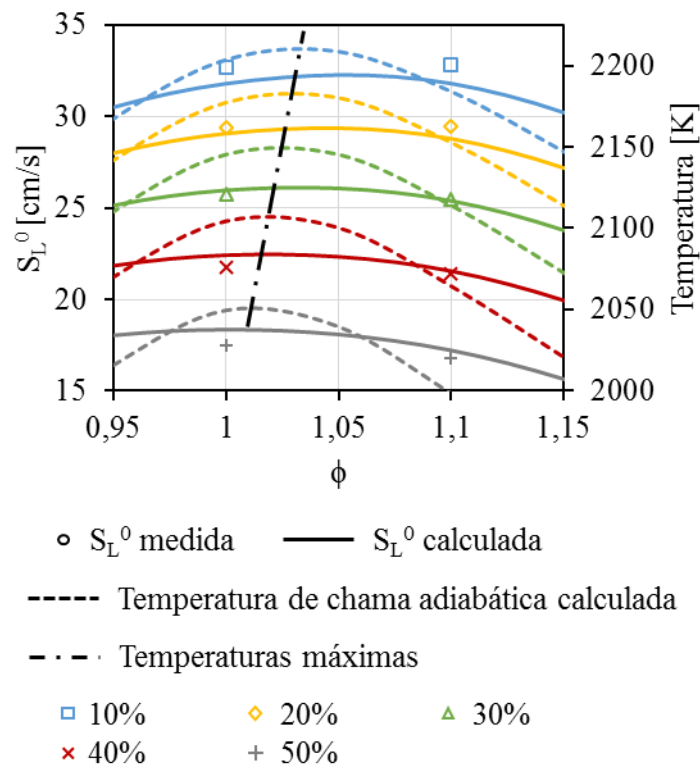


Figura 3.10 – Velocidade de queima medida, calculada e temperaturas de chama adiabática calculada para diferentes níveis de diluição de  $\text{CO}_2$ . O deslocamento da velocidade e temperatura máximas pode ser facilmente observado. O mecanismo utilizado para essa análise foi o de Konnov por apresentar um  $R^2$  médio mais próximo da unidade que os demais mecanismos.

Também observa-se um aumento nas incertezas de medição com o aumento de diluição, tanto na razão de equivalência na velocidade de queima (Tabela E.7). O aumento da incerteza na razão de equivalência deve-se ao fato de que velocidades de queima menores acarretam em vazões menores nos medidores de vazão. Isso aumenta a importância da incerteza de fundo de escala  $e$ , conseqüentemente, sua incerteza total. O aumento da incerteza na velocidade de queima é justificado por um aumento da sensibilidade  $\partial S_L^0 / \partial \zeta$  a qual é proporcional a incerteza na velocidade de queima. Houve também um pequeno aumento no desvio padrão dos termopares pós correção com o aumento da diluição em  $\text{CO}_2$ . O resumo completo dos resultados experimentais e suas incertezas é apresentado na seção D.2 no Apêndice D.

Uma correlação para a velocidade de queima adiabática de misturas de  $\text{CH}_4$  e  $\text{CO}_2$  foi encontrada seguindo a metodologia empregada por Coppens et al., 2007. Tais autores modificam a correlação proposta por Gülder, 1984, para incluir o efeito de um segundo componente no combustível:

$$S_L^0 = (1 + \varepsilon X_{\text{CO}_2}^\tau) W \phi^\eta e^{-\xi(\phi - \psi - \Omega X_{\text{CO}_2})^2} \quad (3.1)$$

na qual  $\varepsilon$ ,  $\tau$ ,  $W$ ,  $\eta$ ,  $\xi$ ,  $\psi$  e  $\Omega$  são parâmetro ajustados empiricamente. Os valores desses parâmetros ajustados aos resultados do presente trabalho podem ser observados na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 – Parâmetros da correlação (3.1) ajustados aos resultados do presente trabalho.

<b>Parâmetro</b>	<b>Valor</b>
$\varepsilon$	-1,2368
$\tau$	1,0916
$W$	111,5823
$\eta$	-5,7609
$\xi$	9,3973
$\psi$	1,3491
$\Omega$	-0,0442

A Figura 3.11 mostra os resultados experimentais do presente trabalho em comparação com as previsões da correlação proposta. Nota-se um aumento das discordâncias entre as medições experimentais e as previsões da correlação na região pobre com o aumento do nível de diluição com  $\text{CO}_2$ . Não obstante, as previsões apresentaram uma boa concordância com os



resultados experimentais do presente trabalho apresentando diferenças inferiores a 0,7 cm/s e menores que 6%.

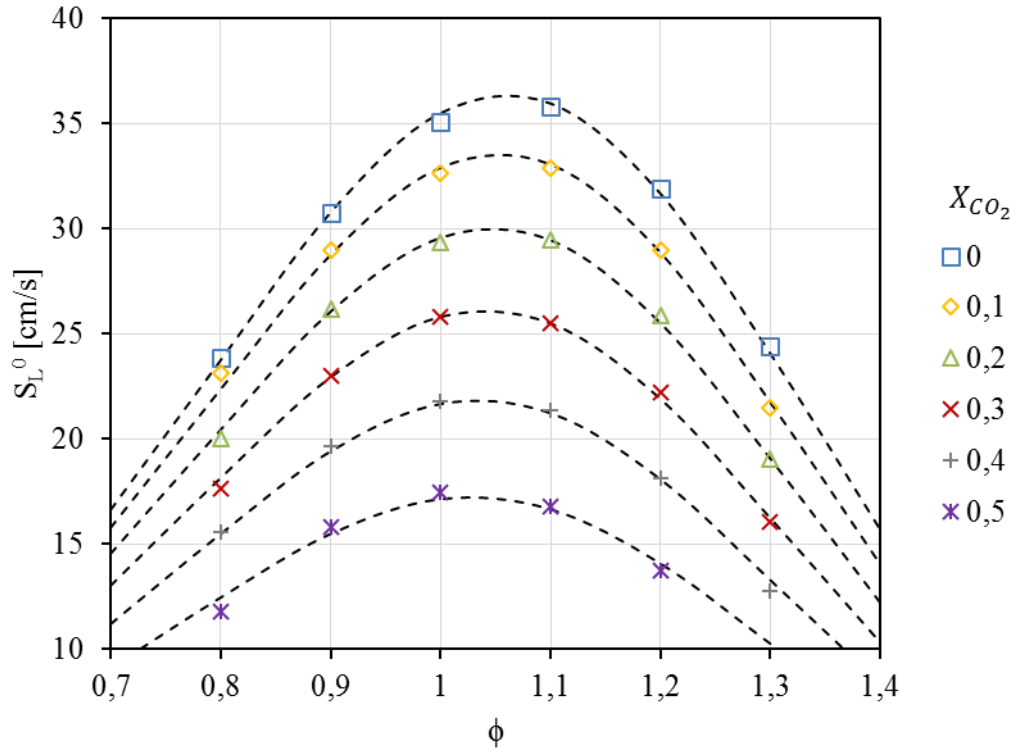


Figura 3.11 – Comparação entre os resultados experimentais e as previsões da correlação do presente trabalho para diferentes níveis de diluição.

### 3.4 Gás de síntese

Diversos estudos envolvendo a velocidade de queima do gás de síntese são relatados na literatura [Prathap et al., 2008; Monteiro et al., 2010; Bouvet et al., 2011; Yepes e Amell, 2013]. Entretanto, poucos são os estudos envolvendo a velocidade de queima de misturas reais de gás de síntese [Monteiro et al., 2010; He et al., 2012] e uma comparação entre os resultados destes mostra-se complicada pela diferença entre as composições de gás de síntese estudadas.

A mistura escolhida para o estudo foi uma das adotadas por Monteiro et al., 2010, a qual pode ser observada na Tabela 3.2. Esse gás de síntese é produzido pelo processo de gaseificação a ar de biomassa utilizando gaseificadores do tipo leito fixo.

Tabela 3.2 – Composição do gás de síntese estudado.

Composição (% em volume)					PCI
H2	CO	CO2	CH4	N2	[MJ/m <sup>3</sup> ]
11	24	9	3	53	5.5*

\*Bridgwater, 1995.

As medições das velocidades de queima dessa mistura foram realizadas com a versão mais complexa da bancada experimental, empregando seis controladores de vazão (um para cada componente da mistura). Isso traduz-se num possível aumento das incertezas devido ao número elevado de controladores utilizados.

A Figura 3.12 mostra a comparação entre os resultados experimentais, numéricos e da literatura para a mistura de gás de síntese estudada. Como pode ser observado, as diferenças entre as velocidades de queima encontradas pelo presente trabalho e as reletadas por Monteiro et al., 2010, foram consideráveis. Para a região pobre ( $0,6 < \phi < 1$ ), os resultados da literatura se comportaram de maneira similar ao observado no estudo de validação: mostraram-se superiores aos encontrados no presente trabalho e apresentam uma concordância maior com as previsões dos mecanismos estudados. Entretanto, a diferença apresentada em  $\phi = 1,2$  tornam questionáveis os resultados relatados na literatura, principalmente para misturas ricas. Medições do presente trabalho para o intervalo compreendido entre  $1,2 < \phi < 1,5$  não foram possíveis devido a vazão necessária ser superior a capacidade de alguns dos controladores.

As velocidades de queima obtidas experimentalmente foram inferiores às obtidas numericamente para todas as razões de equivalência estudadas, com uma diferença média de 3,54 cm/s. O melhor coeficiente de determinação obtido foi o do mecanismo USC II (apenas 0,7340), os demais mecanismos apresentaram  $R^2$  inferiores a 0,63. Adicionalmente os mecanismos parecem apresentar uma concordância razoável entre si para misturas pobres. Porém, para misturas ricas essa concordância cai, aumentando a diferença entre suas previsões. Uma vez mais, as previsões dos mecanismos GRI-Mech 3.0 e de Davis et al. coincidiram em todas as misturas estudadas.

As incertezas encontradas apresentaram um comportamento similar as da mistura de metano e ar com  $\delta S_{L_{min}} = 0,57 \text{ cm/s}$  em  $\phi = 0,95$  e  $\delta S_{L_{max}} = 1,34 \text{ cm/s}$  em  $\phi = 1,7$ . Uma chemi-luminescência similar a observada na validação da bancada foi observada nas chamas da mistura estudada, porém em menor intensidade (Figura 3.13). Isso corrobora a suspeita de que o CO utilizado tenha algum contaminante. Os resultados experimentais completos e suas incertezas são apresentados na seção D.3 no Apêndice D.

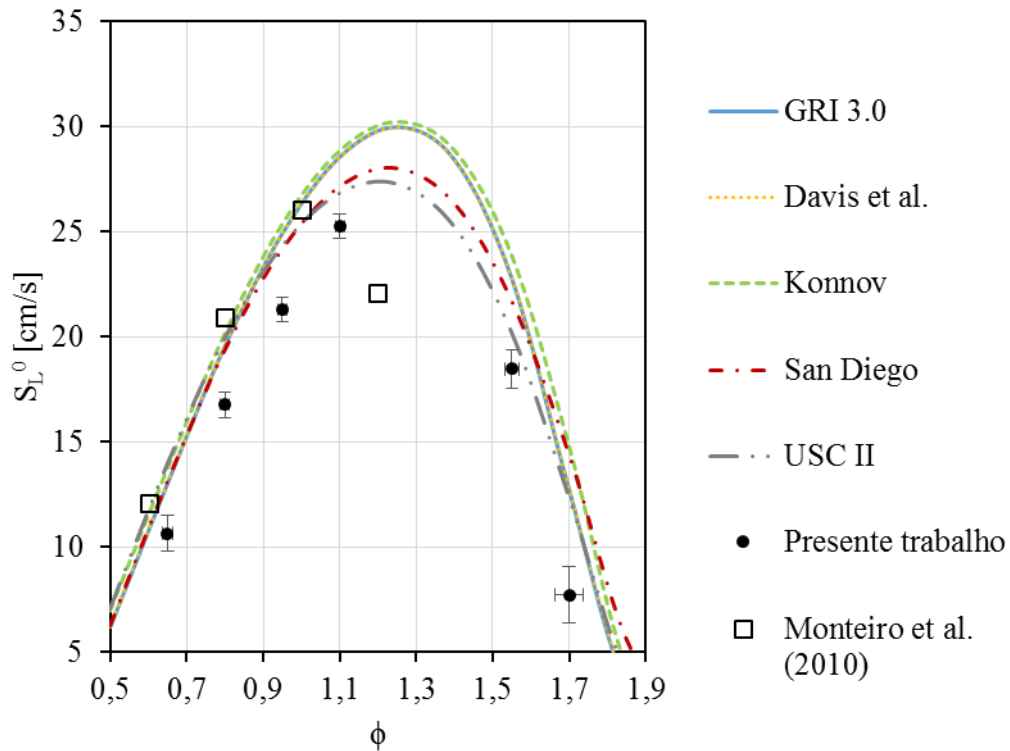


Figura 3.12 – Comparação entre resultados experimentais, numéricos e da literatura para o gás de síntese estudado. Monteiro et al., 2010, utilizou o método da chama esférica em expansão a 293 K e 1 atm.

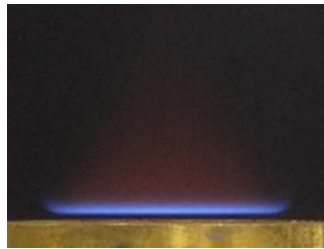


Figura 3.13 – Chemi-luminescência observada nas chamas da mistura de syngas estudada. Chama de uma mistura com  $\phi = 0,65$  e velocidade de escoamento de 10,73 cm/s.

### 3.5 Discussões acerca do método

Nessa seção, algumas questões importantes sobre o método do fluxo de calor serão abordadas e estudadas. Primeiramente é levantada uma discussão acerca da área perfurada utilizada no cálculo da velocidade de escoamento na placa. Em seguida a influência da

temperatura do banho quente será estudada estendendo o estudo realizado por Hermanns, 2007. Depois, a diferença entre a temperatura da mistura dentro do *plenum* e a camisa d'água fria será abordada e, por fim, a nova análise de incertezas do método, proposta pelo presente trabalho, será apresentada.

### 3.5.1 Área perfurada da placa

Uma dificuldade encontrada foi a determinação da área perfurada da placa para o cálculo da velocidade de escoamento,  $S_L$ , da mistura. Similarmente a trabalhos da literatura, a área perfurada utilizada no restante deste trabalho é a área descrita pelo bocal do queimador, de diâmetro 30 mm, anterior à placa perfurada. Entretanto, observando-se a Figura 3.14, nota-se que a região verdadeiramente perfurada da placa utilizada no presente trabalho parece ser, na média, inferior aos 30 mm devido à acomodação dos furos em algumas regiões da periferia. Isso resultaria em uma redução da área perfurada e conseqüente aumento da velocidade média do escoamento.

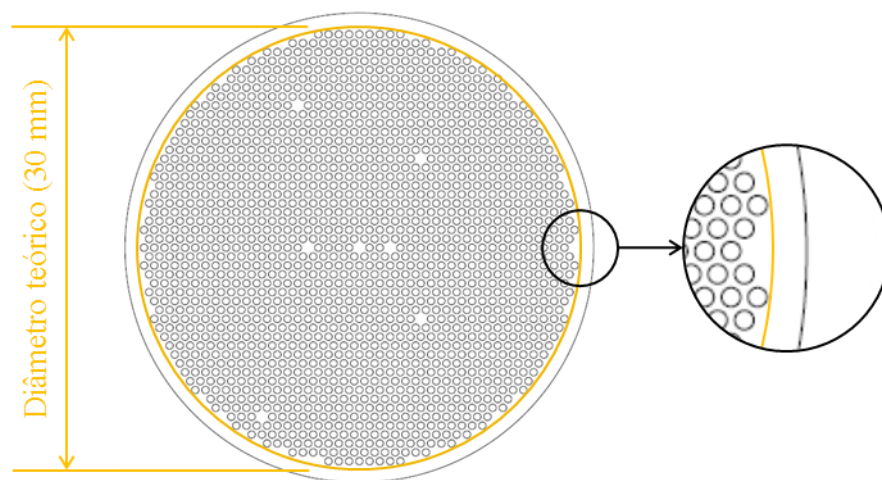


Figura 3.14 – Diferença entre área perfurada real e teórica.

Nessa seção, uma nova análise de dados e incertezas é realizada utilizando o diâmetro médio descrito pelos furos mais externos da placa perfurada (29,55 mm) para o cálculo da área perfurada. O diâmetro individual descrito por cada furo é obtido ajustando-se uma circunferência concêntrica à placa e tangente ao furo em questão. O desvio padrão do diâmetro também foi calculado (0,3908 mm) e é utilizado na análise de incertezas.

A Figura 3.15 mostra a comparação entre as velocidades de queima obtidas utilizando  $d_A = 29,55$  mm e  $d_A = 30$  mm. Como esperado, utilizando um diâmetro menor da área perfurada os valores de  $S_L^0$  aumentam, principalmente para a região próxima do ponto estequiométrico. O aumento nas incertezas também é significativo.

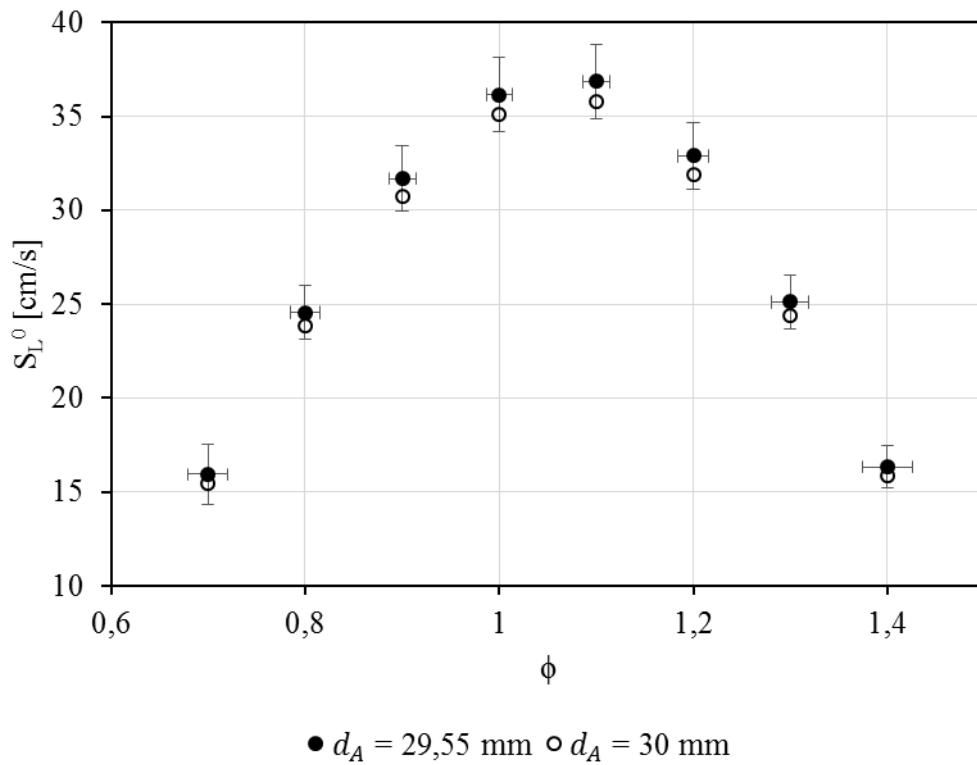


Figura 3.15 – Comparação entre as velocidades de queima obtidas para  $d_A = 29,55$  mm e  $d_A = 30$  mm.

Tabela 3.3 – Comparação entre as fontes de incertezas na  $S_L^0$  para  $d_A = 29,55$  mm.

$\phi$	$\delta S_{L^0 A}$	$\delta S_{L^0 \dot{Q}}$	$\delta S_{L^0 \zeta}$	$\delta S_{L^0}$
<b>0,7</b>	0,81	0,11	1,41	1,63
<b>0,8</b>	1,29	0,15	0,64	1,45
<b>0,9</b>	1,65	0,18	0,47	1,73
<b>1</b>	1,91	0,20	0,40	1,96
<b>1,1</b>	1,92	0,20	0,39	1,97
<b>1,2</b>	1,73	0,19	0,42	1,79
<b>1,3</b>	1,32	0,15	0,51	1,42
<b>1,4</b>	0,86	0,11	0,76	1,15

De fato, um desvio padrão de 0,3908 mm no diâmetro da área perfurada resulta em incertezas consideráveis na velocidade de queima obtida de modo que as demais incertezas (causadas pela dispersão dos termopares e pela incerteza nos controladores de vazão) tornam-se desprezíveis, exceto para  $\phi = 0,7$  (Tabela 3.3), demonstrando a importância de tal parâmetro para uma correta medição da velocidade de queima.

### 3.5.2 Temperatura da mistura dentro do *plenum*

Termopares foram inseridos dentro do *plenum* logo abaixo da placa isolante para mensurar a temperatura da mistura. Notou-se que, além de indicarem temperaturas superiores aos 298 K (para uma temperatura de 298 K da camisa de resfriamento), ambos indicaram temperaturas levemente diferentes, com uma diferença superior às suas incertezas. Apesar de não poder garantir o posicionamento desses termopares, essas diferenças corroboram o aquecimento indesejável da mistura próximo a saída do queimador. A fim de compensar esse aquecimento, reduziu-se a temperatura da camisa de resfriamento até que a média das temperaturas indicadas pelos termopares se igualasse a 289 K. A comparação entre as medições de metano e ar empregando o método tradicional e as medições empregando essa metodologia pode ser observada na Figura 3.16.

Para alcançar uma temperatura de 298 K nos termopares instalados dentro do *plenum*, a temperatura do banho frio foi reduzida para uma média em torno de 293 K. Pequenas mudanças na temperatura do banho tiveram de ser feitas a cada razão de equivalência medida. Notou-se também um aumento da diferença entre as temperaturas indicadas por ambos termopares com uma redução da vazão.

Os resultados obtidos com essa metodologia foram levemente inferiores aos tradicionais para  $\phi \leq 1$  e levemente superiores para  $\phi > 1,1$ , não havendo alteração alguma para misturas levemente ricas ( $\phi = 1,1$ ), acentuando a tendência observada nas demais medições. Uma comparação quantitativa entre essas diferenças pode ser observada na Tabela 3.4.

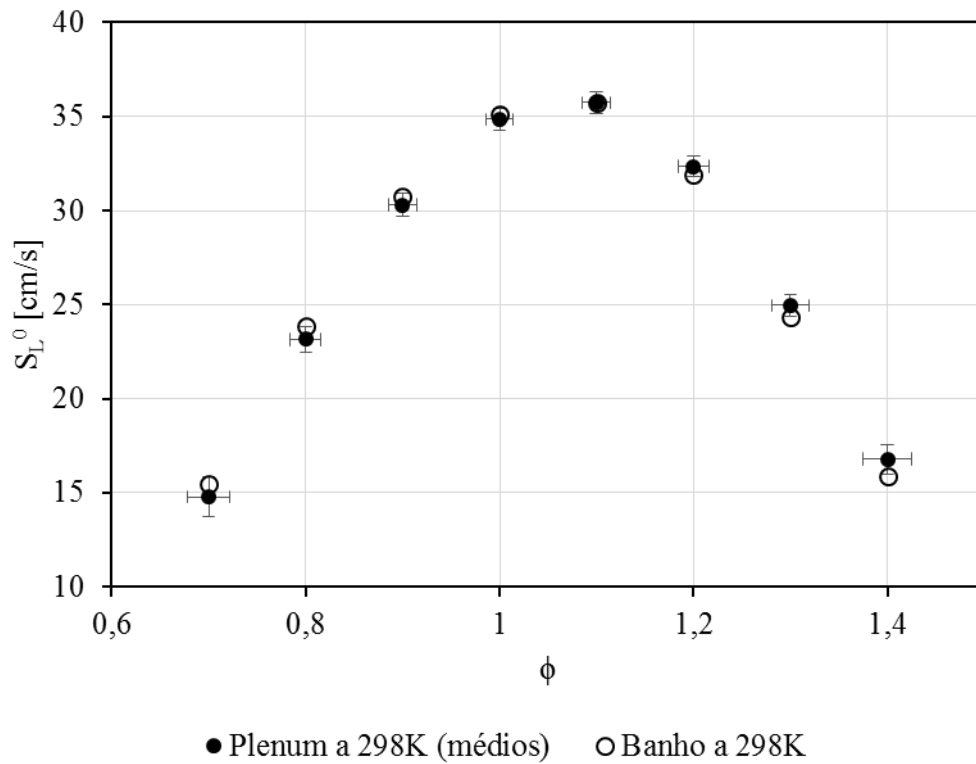


Figura 3.16 – Comparação qualitativa entre as velocidades de queima obtidas controlando a temperatura da mistura através dos termopares e do banho frio.

Tabela 3.4 – Comparação quantitativa entre as velocidades de queima obtidas controlando a temperatura da mistura através dos termopares e do banho frio.

$\phi$	$S_{L_B}^0$ *	$S_{L_P}^0$ **
	[cm/s]	[cm/s]
<b>0,7</b>	15,48	14,77
<b>0,8</b>	23,85	23,16
<b>0,9</b>	30,76	30,30
<b>q</b>	35,09	34,85
<b>1,1</b>	35,76	35,75
<b>1,2</b>	31,93	32,34
<b>1,3</b>	24,37	24,97
<b>1,4</b>	15,87	16,79

\* $S_L^0$  com banho frio a 298 K.

\*\* $S_L^0$  com *plenum* a 298 K.

### 3.5.3 Influência da temperatura da camisa de aquecimento

Segundo o método, a temperatura do banho quente, e portanto a temperatura da periferia da placa é irrelevante na obtenção da  $S_L^0$ , devendo apenas ser suficientemente elevada para assegurar uma boa estabilidade e evitar extinção parcial da chama [van Maaren et al., 1994; Bosschaart e de Goey, 2003]. Temperaturas muito elevadas do banho quente, entretanto, podem gerar gradientes de temperatura elevados entre as paredes internas do cabeçote e a mistura não queimada a montante da placa perfurada. Isso pode se traduzir em um aquecimento não desejado da periferia da mistura e, portanto, um perfil de temperaturas não uniforme.

Hermanns, 2007, estudou a influência da temperatura do banho quente na  $S_L^0$  estequiométrica e concluiu que uma diferença mínima de 30 K entre o banho quente e a mistura não queimada é suficiente para manter a precisão do método. O presente trabalho apresenta um estudo similar expandido também para  $\phi = 1,1$ , onde ocorre a  $S_L^0$  máxima.

Nesse estudo, a temperatura do banho quente foi variada de 336 K a 366 K em passos de 10 K. Medições da velocidade de queima para  $\phi = 1$  e  $\phi = 1,1$  foram realizadas a cada variação dessa temperatura. A fim de desconsiderar a influência do aquecimento da mistura, a temperatura da camisa d'água fria foi controlada através das temperaturas indicada pelos termopares dentro do *plenum*, de modo a manter a temperatura destes sempre em 298 K. O *setup* experimental e a metodologia de determinação da  $S_L^0$  utilizados nesse estudo são idênticos aos utilizados na medição da velocidade de queima de misturas de metano e ar do presente trabalho. Os resultados podem ser observados na Figura 3.17.

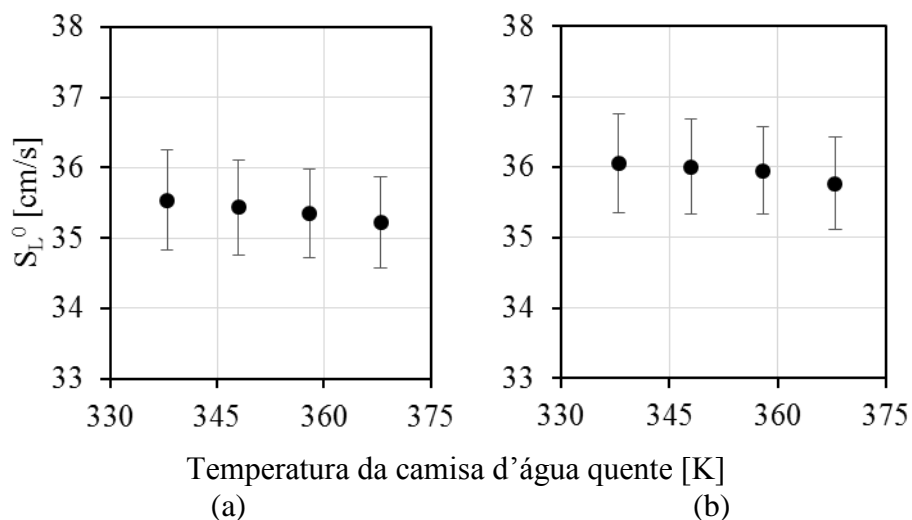


Figura 3.17 – Efeito da temperatura do banho quente na velocidade de queima de uma mistura de metano e ar para (a)  $\phi = 1$  e (b)  $\phi = 1,1$  a 298 K e 1 atm.



Diferentemente dos resultados de Hermanns, 2007, observa-se que, mesmo com uma diferença de temperatura entre a mistura e a camisa d'água superior a 30 K, uma certa tendência de queda pode ainda ser observada nas velocidades de queima com um aumento da temperatura da camisa d'água. Essa tendência, no entanto, foi inferior às incertezas de medição, significando que, possivelmente, ela faça parte da dispersão normal do método. Um estudo em um intervalo maior de temperaturas possivelmente traria resultados conclusivos quanto ao assunto.

#### 3.5.4 Nova análise de incertezas

Quatro pontos chamam a atenção na análise de incertezas utilizada até então pelo método do fluxo de calor. O primeiro deles é a utilização da pior situação possível, estatisticamente improvável, como base para a análise de incertezas em  $\zeta$  (Equação (2.29)). Isso é uma abordagem que superestima consideravelmente as incertezas esperadas de uma medição e não é considerada adequada para resultados experimentais.

O segundo ponto é a desconsideração das incertezas das temperaturas indicadas pelos termopares. Essas incertezas são aquelas não causadas pelo posicionamento incorreto mas sim por erros inerentes ao processo de fabricação dos mesmos ou do equipamento de aquisição de dados. Não foi encontrado na literatura qualquer informação acerca da insignificância dessas incertezas no erro final da velocidade de queima. Assim, sua desconsideração não é justificada.

O terceiro é a desconsideração da influência dos quatro termopares existentes entre o termopar central e o periférico na probabilidade de ocorrência do pior caso. Isso também superestima as incertezas das medições pois aumenta a probabilidade de ocorrência do pior caso.

O quarto e último é a própria correção para o posicionamento irregular dos termopares. Observando os residuais do termopar 4 na Figura 2.10, nota-se que eles invertem de sinal no intervalo considerado. Isso significa que hora esse termopar estaria acima e hora abaixo da temperatura correta. O que não parece fisicamente possível. Tal situação também é verificada nos trabalhos de Bosschaart, 2002, Bosschaart e de Goey, 2003, e Hermanns, 2007.

Assim, uma nova análise de incertezas para o método é proposta pelo presente trabalho a fim de incluir essas considerações na análise de incertezas do método. Essa nova metodologia é baseada naquela descrita por Liao, 2012, para a propagação de incertezas em curvas ajustadas e será descrita nas próximas seções.

### 3.5.4.1 Incerteza no coeficiente parabólico

A incerteza na temperatura indicada por um termopar qualquer  $i$ ,  $\delta T_i$ , pode ser estimada a partir da incerteza do próprio termopar,  $\delta T_{i_{tp}}$ , oriunda de seu processo de fabricação e da incerteza da unidade de aquisição de dados,  $\delta T_{ad}$ . Assim:

$$\delta T_i = \sqrt{(\delta T_{i_{tp}})^2 + (\delta T_{ad})^2} \quad (3.2)$$

Como todos os termopares são idênticos,  $\delta T_{i_{tp}} = \delta T_{tp}$  e, sabendo-se que  $\delta T_{tp}$  e  $\delta T_{ad}$  são iguais a 1 K, tem-se que  $\delta T = \sqrt{2}$  K.

Estimada a incerteza individual de cada termopar, deve-se agora calcular a propagação dessas incertezas para a curva teórica ajustada às medidas experimentais, ou seja, para os termos da Equação (2.8).

Os termos da Equação (2.8) são obtidos através do ajuste do perfil teórico de temperaturas – descrito pela mesma equação – ao perfil de temperaturas experimental, descrito pelas temperaturas indicadas pelos  $n$  termopares utilizados na medição. Assim, pode-se dizer que os mesmos termos são dependentes das temperaturas dos termopares, ou seja:

$$T_c = f(T_{tp_1}, T_{tp_2}, \dots, T_{tp_n}) \quad (3.3)$$

e:

$$\zeta = f(T_{tp_1}, T_{tp_2}, \dots, T_{tp_n}) \quad (3.4)$$

A incerteza de cada um desses termos causada pela incerteza de cada um dos termopares é calculada acrescentando-se a incerteza  $\delta T$  a temperatura do termopar  $tp_i$  e realizando um novo ajuste de curva. A incerteza do coeficiente parabólico  $\zeta$ , por exemplo, devido à incerteza do termopar  $i$  é dada pela diferença entre o coeficiente parabólico da curva antiga  $\zeta(T_{tp_1})$  e da nova curva ajustada  $\zeta(T_{tp_1} + \delta T)$ . Assim:

$$\delta \zeta_{tp_1} = \zeta(T_{tp_1} + \delta T) - \zeta(T_{tp_1}) \quad (3.5)$$

O efeito combinado da incerteza dos  $n$  termopares é dado pela raiz da soma dos quadrados dos efeitos individuais de cada termopar:

$$\delta\zeta_{tp} = \sqrt{\sum_{i=1}^n [\zeta(T_{tp_i} + \delta T) - \zeta(T_{tp_i})]^2} \quad (3.6)$$

A incerteza no coeficiente parabólico devido aos desvios remanescentes dos termopares pós correção,  $\delta\zeta_{\sigma tp}$ , pode ser calculada de maneira similar. Adiciona-se duas vezes o desvio padrão remanescente do termopar  $i$  (95% de confiabilidade),  $2\sigma_{tp_i}$ , a temperatura corrigida do mesmo,  $T_{tp_i}$ , e reajusta-se a curva teórica descrita pela Equação (2.8). O desvio padrão é aquele para a razão de equivalência em questão. A incerteza em  $\zeta$  causada pelo desvio remanescente do termopar  $i$  é então dada por:

$$\delta\zeta_{\sigma tp_i} = \zeta(T_{tp_i} + 2\sigma_{tp_i}) - \zeta(T_{tp_i}) \quad (3.7)$$

e a incerteza causada pelo efeito combinado dos desvios remanescentes dos  $n$  termopares é dada por:

$$\delta\zeta_{\sigma tp} = \sqrt{\sum_{i=1}^n [\zeta(T_{tp_i} + 2\sigma_{tp_i}) - \zeta(T_{tp_i})]^2} \quad (3.8)$$

Lembrando que  $\delta\zeta_{\sigma tp}$  varia a cada razão de equivalência pois  $\sigma_{tp_i}$  é diferente para cada  $\phi$ . O efeito combinado de  $\delta\zeta_{tp}$  e  $\delta\zeta_{\sigma tp}$  é encontrado de maneira análoga:

$$\delta\zeta = \sqrt{\delta\zeta_{tp}^2 + \delta\zeta_{\sigma tp}^2} \quad (3.9)$$

#### 3.5.4.2 Incerteza na velocidade de queima

A velocidade de queima é obtida a partir das raízes do polinômio de terceira ordem ajustado aos coeficientes parabólicos  $\zeta$  obtidos. Assim, sua incerteza é estimada a partir das incerteza individual de cada  $\zeta$ :

$$\delta S_L^0 \zeta = \sqrt{\sum_{i=1}^n [S_L^0(\zeta_i + \delta\zeta_i) - S_L^0(\zeta_i)]^2} \quad (3.10)$$

onde  $\zeta_i$  é o  $i$ -ésimo coeficiente parabólico utilizado no ajuste do polinômio,  $\delta\zeta_i$  sua incerteza e  $n$  o número de coeficientes parabólicos utilizados na interpolação.

### 3.5.4.3 Resultados

Essa nova metodologia foi aplicada em dois casos: no primeiro a correção do posicionamento irregular dos termopares proposta por Bosschaart e de Goey, 2003, foi aplicada. No segundo essa correção não é utilizada. Nesse caso, o desvio padrão utilizado em  $\delta\zeta_{\sigma tp}$  (remanescente do termopar pós correção) é substituído pelo desvio padrão do termopar em relação ao perfil teórico sem correção. As incertezas de ambos os casos são estimadas pelo método tradicional e pelo novo proposto no presente trabalho e os resultados apresentados a seguir.

Para o primeiro caso, houve uma redução média de 34,2% nas incertezas do método com uma maior redução em  $\phi = 0,7$  (Tabela 3.5). O comportamento das novas incertezas seguiu o mesmo das antigas, com menores incertezas para a região próxima a  $\phi = 1$  e maiores para os extremos pobre e rico (Figura 3.18). Houve também um pico em  $\phi = 1,2$  sugerindo uma maior sensibilidade das incertezas no coeficiente parabólico nessa razão de equivalência quando comparado com as suas regiões vizinhas. A menor incerteza encontrada (0,38 cm/s) ocorreu em  $\phi = 1,1$  e a máxima (0,72 cm/s) em  $\phi = 0,7$ , similarmente às incertezas antigas. Isso, entretanto, não prova que as incertezas indicadas pela análise tradicional estão incorretas, mas sim que são improváveis de ocorrer para um intervalo de 95% de confiabilidade.

Para o segundo caso, houveram reduções significativas nas incertezas do método com uma redução média de 72,8% onde a maior redução ocorreu também em  $\phi = 0,7$  (Tabela 3.6). Essa redução considerável corrobora mais uma vez para a superestimação das incertezas do método pela análise tradicional. O comportamento e o pico em  $\phi = 1,2$  foram iguais ao do primeiro caso. A menor incerteza encontrada (0,64 cm/s) ocorreu em  $\phi = 1,1$  e a máxima (1,03 cm/s) em  $\phi = 0,7$ . Observa-se que a ordem de grandeza das incertezas encontradas pela nova metodologia sem as correções do termopares é a mesma das incertezas encontradas pelo método tradicional com as correções.

Tabela 3.5 – Comparação quantitativa entre a análise de incerteza padrão do método,  $\delta S_L^0$ , e alternativa,  $\delta S_{L_a}^0$  para o caso com correções nos termopares.

$\phi$	$\delta S_L^0$ [cm/s]	$\delta S_{L_a}^0$ [cm/s]	Redução [%]
<b>0,7</b>	1,38	0,72	48,14%
<b>0,8</b>	0,66	0,42	36,41%
<b>0,9</b>	0,53	0,37	29,83%
<b>1</b>	0,50	0,38	22,84%
<b>1,1</b>	0,49	0,38	21,63%
<b>1,2</b>	0,49	0,43	13,30%
<b>1,3</b>	0,54	0,38	29,15%
<b>1,4</b>	0,75	0,47	36,88%

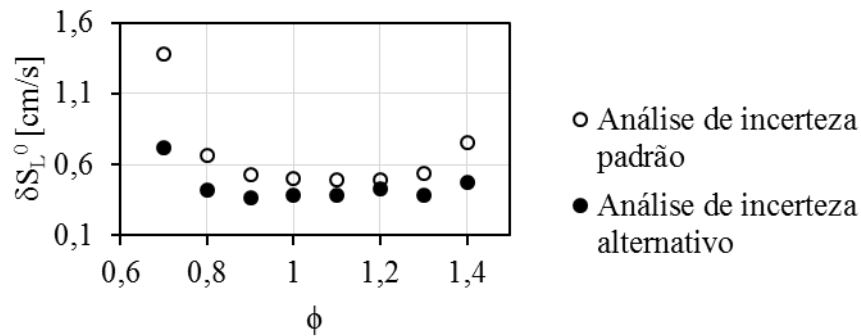


Figura 3.18 – Comparação entre as incertezas calculadas pelo método padrão e pelo método proposto no presente trabalho.

Tabela 3.6 - Comparação quantitativa entre a análise de incerteza padrão do método,  $\delta S_{L_{sc}}^0$ , e alternativa,  $\delta S_{L_{a,sc}}^0$  para o segundo caso estudado (sem correções).

$\phi$	$\delta S_{L_{sc}}^0$ [cm/s]	$\delta S_{L_{a,sc}}^0$ [cm/s]	Redução [%]
<b>0,7</b>	6,79	1,03	84,89%
<b>0,8</b>	3,11	0,68	78,09%
<b>0,9</b>	2,27	0,63	72,15%
<b>1</b>	1,99	0,66	66,72%
<b>1,1</b>	1,93	0,64	66,52%
<b>1,2</b>	2,04	0,73	64,26%
<b>1,3</b>	2,44	0,66	72,75%
<b>1,4</b>	3,63	0,83	77,07%

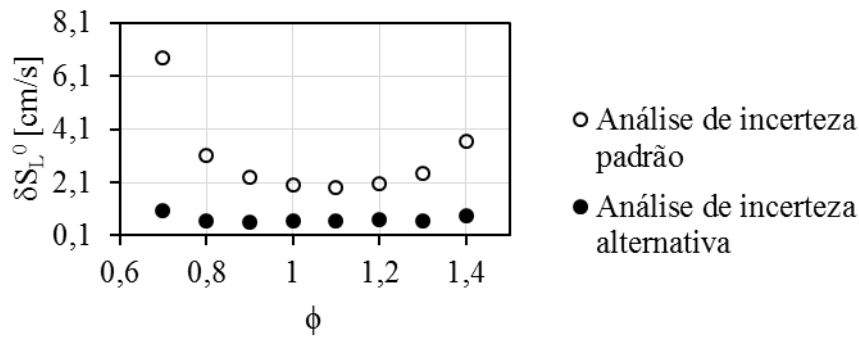


Figura 3.19 – Comparação entre as incertezas calculadas pelo método padrão e pelo método proposto no presente trabalho.

A Tabela 3.7 mostra uma comparação entre a análise de incerteza padrão do método com correções e a análise alternativa sem correções proposta no presente trabalho. Nota-se que ambos apresentam o mesmo comportamento (maiores valores para misturas ricas e pobres e menores para misturas próximas à estequiométrica) e ordem de grandeza similar.

Tabela 3.7 – Comparação quantitativa entre a análise de incerteza padrão do método com correções,  $\delta S_L^0$ , e a alternativa sem correções  $\delta S_{L,a,sc}^0$ .

$\phi$	$\delta S_L^0$ [cm/s]	$\delta S_{L,a,sc}^0$ [cm/s]
<b>0.7</b>	1.38	1.03
<b>0.8</b>	0.66	0.68
<b>0.9</b>	0.53	0.63
<b>1</b>	0.50	0.66
<b>1.1</b>	0.49	0.64
<b>1.2</b>	0.49	0.73
<b>1.3</b>	0.54	0.66
<b>1.4</b>	0.75	0.83

As diversas questões levantadas sobre o método nessa seção mostram que ainda há muito o que se avançar para melhorar a qualidade dos resultados experimentais. Por outro lado, essas questões estão relacionadas a incertezas ou variações em parâmetros que são quantificáveis, o que pode servir de guia para o aprimoramento da técnica.

## 4 CONCLUSÕES

No presente trabalho, medições da velocidade de queima laminar adiabática de misturas de biogás/ar e gás de síntese/ar foram realizadas em condições atmosféricas (298 K e 1 atm) e seus resultados comparados com a previsão de cinco diferentes mecanismos cinéticos (Gri-Mech 3.0, Davis et al., Konnov, San Diego e USC Mech II). O método de medição utilizado foi o método do fluxo de calor pela simplicidade e precisão. A bancada experimental utilizada foi antes validada através da medição da velocidade de queima de misturas de metano/ar e de uma mistura H<sub>2</sub>-CO/ar e comparação com a literatura.

Os resultados experimentais da velocidade de queima laminar de misturas de metano e ar mostraram uma boa concordância geral com a literatura, com  $S_L^0 = 35,08$  cm/s em  $\phi = 1$  e uma diferença de ~1,5% da média da literatura consultada ficando, entretanto, sistematicamente abaixo dos resultados dos demais trabalhos recentes que utilizaram o método do fluxo de calor para  $0,7 \leq \phi \leq 1$ . Dos cinco mecanismos avaliados, o que apresentou uma melhor concordância com os resultados experimentais foi o de Konnov, com um coeficiente de determinação igual a 0,9497. As incertezas encontradas se mostraram similares à média de trabalhos mais recentes da literatura com  $\delta S_{L_{min}} = 0,57$  m/s em  $\phi = 1,1$ .

Para a mistura 5% H<sub>2</sub> / 95% CO, houve discrepâncias sistemáticas entre os resultados experimentais e os dados da literatura e resultados numéricos, possivelmente causadas por impurezas no CO utilizado as quais geraram uma chemi-luminescência não esperada em chamas desse combustível. Entretanto, as velocidades encontradas apresentam o mesmo comportamento das disponíveis na literatura, possibilitando ao menos um estudo qualitativo. Dos mecanismos estudados, o que apresentou uma melhor concordância com as velocidades de queima medidas foi o de San Diego com um coeficiente de determinação igual a 0,9867 e uma diferença média de 0,7 cm/s. Os demais mecanismos superestimaram os resultados experimentais, apresentando uma melhor concordância com outros dados experimentais da literatura. As incertezas encontradas apresentaram um comportamento inesperado, sendo máximas para razões de equivalência levemente pobres.

As velocidades de queima de misturas de metano e dióxido de carbono (biogás) e ar obtidas experimentalmente se comportaram conforme o esperado com uma queda na velocidade de queima com o aumento do nível de diluição. Infelizmente uma comparação entre os resultados experimentais e a literatura não foi possível devido à falta de padronização das condições experimentais. A velocidade de queima de misturas ricas apresenta uma

sensibilidade maior ao nível de diluição do que a velocidade de queima de misturas pobres. Os resultados numéricos apresentaram uma boa concordância com os experimentais com um destaque para o mecanismo de San Diego para diluições de 10% e para o mecanismo de Konnov para diluições superiores. As incertezas aumentaram juntamente com o nível de diluição. Observou-se também a mesma mudança da velocidade de queima laminar máxima em direção a  $\phi = 1$  com o aumento da diluição em  $\text{CO}_2$  observado por Kishore et al., 2008, justificado pela mudança do pico de temperatura de chama adiabática da mistura. Adicionalmente, uma correlação empírica com divergências inferiores a 5% dos resultados experimentais foi proposta.

Os resultados experimentais e numéricos das velocidades de queima do gás de síntese apresentaram diferenças consideráveis dos dados relatados na literatura. Para a região pobre da curva os dados da literatura foram maiores que os resultados experimentais e numéricos do presente trabalho. Já para  $\phi = 1,2$  (única mistura rica cuja velocidade de queima foi reletada na literatura) a literatura apresenta valores consideravelmente inferiores aos resultados deste trabalho. Os resultados experimentais obtidos ficaram sistematicamente abaixo dos resultados numéricos, porém, apresentaram um comportamento similar às previsões dos mecanismos. O mecanismo com a melhor concordância (USC Mech II) apresentou um coeficiente de determinação de apenas 0,7340. A mesma chemi-luminescência observada em chamas de misturas de  $\text{H}_2/\text{CO}$  foi também observada em chamas do gás de síntese estudado, porém, em menor intensidade.

As incertezas do método obtidas pela análise alternativa, proposta no presente trabalho, foram significativamente inferiores às apresentadas pela análise padrão do método. Os resultados da análise alternativa sem correções apresentaram valores levemente maiores e comportamento similar aos da análise padrão do método (com correções)

Como sugestões para trabalhos futuros pode-se citar:

- Avaliação detalhada do efeito da temperatura da camisa d'água sobre  $S_L^0$ ;
- Novo projeto do queimador com um melhor isolamento entre a camisa d'água quente e suas demais partes a fim de evitar o pré-aquecimento indesejado da mistura;
- Reprojetado da placa perfurada para garantir que a furação cubra toda a região de interesse;
- Estudo de uma ampla gama de misturas relevantes de gás de síntese.



## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Ahmed, S.; Lee, S.H.D.; Ferrandon, M.S. Catalytic steam reforming of biogas – Effects of feed composition and operating conditions, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 40, p. 1005-1015, 2015.

Avraam, D.G.; Halkides, T.I.; Liguras, D.K.; Bereketidou, O.A.; Goula, M.A. An experimental and theoretical approach for the biogas steam reforming reaction, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 35, p. 9818-9827, 2010.

Baciocchi, R.; Carnevale, E.; Costa, G.; Gavasci, R.; Lombardi, L.; Olivieri, T.; Zanchi, L.; Zingaretti, D. Performance of biogas upgrading process based in alkani absorption with regeneration using air pollution control residues, **Waste Management**, v. 33, p. 2694-2705, 2013.

Beeckmann, J.; Cai, L.; Pitsch, H. Experimental investigation of the laminar burning velocities of methanol, ethanol, n-propanol, and n-butanol at high pressure, **Fuel**, v. 117, p. 340-350, 2014.

Bongers, H.; de Goey, P.H. The Effect of Simplified Transport Modeling on the Burning Velocity of Laminar Premixed Flames, **Combustion Science and Technology**, v. 175, p. 1915-1928, 2003.

Bora, B.J.; Saha, U.K.; Chatterjee, S.; Veer, V. Effect of compression ratio on performance, combustion and emission characteristics of a dual fuel engine run on raw biogas, **Energy Conversion and Management**, v. 87, p. 1000-1009, 2014.

Bosschaart, K.L. **Analysis of the Heat Flux Method for Measuring Burning Velocities**, Ph. D Thesis, Eindhoven Technische Universiteit, Netherlands, 2002.

Bosschaart, K.J.; de Goey, L.P.H. Detailed analysis of the heat flux method for measuring burning velocities, **Combustion and Flame**, v. 132, p. 170-180, 2003.

Bosschaart, K.J.; de Goey, L.P.H. The laminar burning velocity of flames propagating in mixtures of hydrocarbons and air measured with the heat flux method, **Combustion and Flame**, v. 136, p. 261-269, 2004.

Bosschaart, K.J.; Versluis, M.; Knikker, R.; Vandermeer, Th.H; Schreel, K.R.A.M.; de Goey, L.P.H.; Steenhoven, A.A. The Heat Flux Method for Producing Burner Stabilized Adiabatic Flames: An Evaluation with CARS Thermometry, **Combustion Science and Technology**, v. 169, p. 69-87, 2001.

Botha, J.P.; Spalding, D.B. The laminar flame speed of propane/air mixtures with heat extraction from the flame, **Proceedings of the Royal Society**, v. 225, p. 71-95, 1954.

Bouvet, N.; Chauveau, C.; Gökalp, I.; Halter, F. Experimental studies of the fundamental flame speeds of syngas (H<sub>2</sub>/CO)/air mixtures, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 33, p. 913-920, 2011.

Bridgwater, A.V. The technical and economic feasibility of biomass gasification for power generation, **Fuel**, v. 74, p. 631-653, 1995.

Bronkhorst. **General instructions for digital mass flow/pressures instruments.** Disponível em: [http://www.bronkhorst.com/files/downloads/manuals\\_english/917022\\_general\\_manual\\_digital\\_instruments.pdf](http://www.bronkhorst.com/files/downloads/manuals_english/917022_general_manual_digital_instruments.pdf). Acessado em: 21 de dezembro de 2014.

Cardona, C.A.; Amell, A.A. Laminar burning velocity and interchangeability analysis of biogas/C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>/H<sub>2</sub> with normal and oxygen-enriched air, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 38, p. 7994-8002, 2013.

Chen, Y.; Hu, W.; Feng, Y.; Sweeney, S. Status and prospects of rural biogas development in China, **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 39, p. 679-685, 2014.

Cheolsoo, L.; Daigon, K.; Changkeun, S.; Jeongsoo, K.; Jinseok, H.; Jun-Seok, C. Performance and emission characteristics of a vehicle fueled with enriched biogas and natural gases, **Applied Energy**, v. 139, p. 17-29, 2015.

Coelho, F.J.V.S. **Medição da velocidade de chama plana laminar de misturas metano/ar e gás natural/ar utilizando o método do fluxo de calor**. Dissertação de mestrado, Porto Alegre, Brasil, 2014.

Coelho, P.; Costa, M. **Combustão**, Orion, Brazil, 2007.

Coppens, F.H.V.; de Ruyck, J.; Konnov, A.A. Effects of hydrogen enrichment on adiabatic burning velocity and NO formation in methane+air flames, **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 31, p. 437-444, 2007.

Davis, S.G.; Law, C.K.; Wang, H. Propene Pyrolysis and Oxidation Kinetics in a Flow Reactor and Laminar Flames, **Combustion and Flame**, v. 119, p. 375-399, 1999.

Davis, S.G.; Joshi, A.V.; Wang, H.; Egolfopoulos, F. An optimized kinetic model of H<sub>2</sub>/CO combustion, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 30, p. 1283-1292, 2005.

de Goey, L.P.H.; van Maaren, A.; Quax, R.M. Stabilization of adiabatic premixed laminar flames on a flat flame burner, **Combustion Science and Technology**, v. 92, p. 201-207, 1993.

de Goey, L.P.H.; Somers, L.M.T.; Bosch, W.M.M.L.; Mallens, R.M.M. Modeling of the Small Scale Structure of Flat Burner-Stabilized Flames, **Combustion Science and Technology**, v. 104, p. 387-400, 1995.

Dixon, M.J.; Schoegl, I.; Hull, C.B.; Ellzey, J.L. Experimental and numerical conversion of liquid heptane to syngas through combustion in porous media, **Combustion and Flame**, v. 154, p. 217-231, 2008.

Dong, C.; Zhou, Q.; Zhao, Q.; Zhang, Y.; Xu, T.; Hui, S. Experimental Study on the laminar flame speed of hydrogen/carbon monoxide/air mixtures, **Fuel**, v. 88, p. 1858-1863, 2009.

Draper, N.R.; Smith, H. **Applied regression analysis**, 3<sup>rd</sup> edition. John Wiley & Sons, US, 1998.

Dunn, S. Hydrogen futures: toward a sustainable energy system, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 27, p. 235-264, 2002.

Dyakov, I.V.; Konnov, A.A.; De Ruyck, J.; Bosschaart, K.J.; Brock, E.C.M.; de Goey, L.P.H. Measurement of Adiabatic Burning Velocity in Methane-Oxygen-Nitrogen Mixtures, **Combustion Science and Technology**, v. 172, p. 81-96, 2001.

Egolfopoulos, F.N.; Hansen, N.; Ju, Y.; Kohse-Höinghaus, K.; Law, C.K.; Qi, F. Advances and challenges in laminar flame experiments and implications for combustion chemistry, **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 43, p. 36-67, 2014.

Empresa de Pesquisa Energética (EPE). **Balço Energético Nacional – Relatório Síntese, ano base 2013**, Rio de Janeiro, 2014.

Francisco, R.W.Jr. **Desenvolvimento de método de medição simultâneo de velocidade de chama laminar e energia de ativação aparente e aplicação em misturas combustíveis com baixo poder calorífico**, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil, 2014.

Gobbato, P.; Masi, M.; Toffolo, A.; Lazzaretto, A. Numerical simulation of a hydrogen fuelled gas turbine combustor, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 36, p. 7993-8002, 2011.

Gomes, S.R.; Bion, N.; Blanchard, G.; Rousseau, S.; Bellière-Baca, V.; Harlè, V.; Duprez, D.; Epron, F. Thermodynamic and experimental studies of catalytic reforming of exhaust gas recirculation in gasoline engines, **Applied Catalysis B: Environmental**, v. 102, p. 44-53, 2011.

Goswami, M. **Laminar Burning Velocities at Elevated Pressures using the Heat Flux Method**, Ph. D Thesis, Eindhoven Technische Universiteit, Netherlands, 2014.

Goswami, M.; Derks, S.C.R.; Coumans, K.; Slikker, W.J.; Oliveira, M.H.A.; Bastiaans, R.J.M.; Luijten, C.C.M.; de Goey, L.P.H. The effect of elevated pressures on the laminar burning velocity of methane + air mixtures, **Combustion and Flame**, v. 160, p. 1627-1635, 2013.

Gu, X.J.; Haq, M.Z.; Lawes, M.; Woolley, R. Laminar burning velocity and markstein lengths of methane-air mixtures, **Combustion and Flame**, v. 121, p. 41-58, 2000.

Gülder, Ö.L. Correlations of laminar combustion data for alternative S.I. engine fuels, **SAE Technical Paper SAE 841000**, 1984.

Habib, M.A.; Mokheimer, E.M.A.; Sanusi, S.Y.; Nemitallah, M.A. Numerical investigations of combustion and emissions of syngas as compared to methane in a 200 MW package boiler, **Energy Conversion and Management**, v. 83, p. 296-305, 2014.

Hagos, F.Y.; Aziz, A.R.; Sulaiman, S.A. Syngas (H<sub>2</sub>/CO) in a spark-ignition direct-injection engine. Part 1: Combustion, performance and emissions comparison with CNG, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 39, p. 17884-17895, 2014.

Hassan, M.I.; Aung, K.T.; Faeth, G.M. Properties of laminar premixed CO/H<sub>2</sub>/Air flames at various pressures. **Journal of Propulsion and Power**, v. 13, p. 239-245, 1997.

He, Y.; Wang, Z.; Yang, L.; Whiddon, R.; Li, Z.; Zhou, J.; Cen, K. Investigation of laminar flame speeds of typical syngas using laser based Bunsen method and kinetic simulation, **Fuel**, v. 95, p. 206-213, 2012.

He, Y.; Wang, Z.; Weng, W.; Zhu, Y.; Zhou, J.; Cen, K. Effects of CO content on laminar burning velocity of typical syngas by heat flux method and kinetic modeling, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 39, p. 9534-9544, 2014.

Hermanns, R.T.E. **Laminar Burning Velocities of Methane-Hydrogen-Air Mixtures**, Ph. D Thesis, Eindhoven Technische Universiteit, Holanda, 2007.

Hermanns, R.T.E.; Konnov, A.A.; Bastianns, R.J.M.; de Goey, L.P.H.; Lucka, K.; Köhne, H. Effects of temperature and composition on the laminar burning velocity of  $\text{CH}_4+\text{H}_2+\text{O}_2+\text{N}_2$  flames, **Fuel**, v. 89, p. 114-121, 2010.

Hinton, N.; Stone, R. Laminar burning velocity measurements of methane and carbon dioxide mixtures (biogas) over wide ranging temperatures and pressures, **Fuel**, v. 116, p. 743-750, 2014.

Hoerlle, C.A. **Estudo numérico de chamas laminares difusivas de  $\text{CH}_4$  diluído com  $\text{CO}_2$  empregando mecanismos cinéticos globais e a técnica *flamelet-generated manifold***, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil, 2015.

Holthuis & Associates. **McKenna Burner Manufacturer**, 2015.

Huang, Z.; Liu, B.; Zeng, K.; Huang, Y.; Jiang, D.; Wang, X.; Miao, H. Experimental study on engine performance and emissions for an engine fueled with natural gas-hydrogen mixtures, **Energy & Fuels**, v. 20, p. 2131-2136, 2006.

International Energy Agency (IEA). **Key World Energy Statistics 2014**, França, 2014.

Ji, C.; Dai, X.; Wang, S.; Liang, C.; Ju, B.; Liu, X. Experimental study on combustion and emissions performance of a hybrid syngas-gasoline engine, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 38, p. 11169-11173, 2013.

Ju, Y.; Masuya, G.; Ronney, P.D. Effects of radiative emission and absorption on the propagation and extinction of premixed gas flames, **The Combustion Institute**, v. 27, p. 2619-2626, 1998.

Keysight. **34970A Data acquisition technical overview**. Disponível em: <http://literature.cdn.keysight.com/litweb/pdf/5965-5290EN.pdf>. Acessado em: 12 de dezembro de 2014.

Khalil, A.E.E.; Gupta, A.K. Distributed swirl combustion for gas turbine application, **Applied Energy**, v. 88, p. 4898-4907, 2011.

Kishore, V.R.; Duhan, N.; Ravi, M.R.; Ray, A. Measurement of adiabatic burning velocity in natural gas-like mixtures, **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 33, p. 10-16, 2008.

Kishore, V.R.; Ravi, M.R.; Ray, A. Adiabatic burning velocity and cellular flame characteristics of H<sub>2</sub>-CO-CO<sub>2</sub>-air mixtures, **Combustion and Flame**, v. 158, p. 2149-2164, 2011.

Kohn, M.P.; Lee, J.; Basinger, M.L.; Castaldi, M.J. Performance of an internal combustion engine operating on landfill gas and the effect of syngas addition, **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 50, p. 3570-3579, 2011.

Konnov, A.A. **Detailed Reaction Mechanism for Small Hydrocarbons Combustion**, Release 0.5, 2000. Disponível em: <<http://homepages.vub.ac.be/~akonnov/>>.

Konnov, A.A.; Riemeijer, R.; Komilov, V.N.; de Goey, L.P.H. 2D effects in laminar premixed flames stabilized on a flat flame burner, **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 47, p. 213-223, 2013.

Kuo, K.K. **Principles of Combustion**, John Wiley & Sons Inc., Hoboken, Nova Jersey, 2005.

Lau, C.S.; Tsolakis, A.; Wyszynski, M.L. Biogas upgrade to syngas (H<sub>2</sub>-CO) via dry and oxidative reforming, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 36, p. 397-404, 2011.

Law, C.K. **Combustion Physics**, Cambridge University Press, Nova York, 2006.

Lee, C.; Hwang, C. An experimental study on the flame stability of LFG and LFG-mixed fuels, **Fuel**, v. 86, p. 649-655, 2007.

Lee, K.; Kim, T.; Cha, H.; Song, S.; Chun, K.M. Generating efficiency and NO<sub>x</sub> emissions of a gas engine generator fueled with biogas-hydrogen blend and using an exhaust

gas recirculation system, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 35, p. 5723-5730, 2010.

Lee, M.C.; Seo, S.B.; Chung, J.H.; Kim, S.M.; Joo, Y.J.; Ahn, D.H. Gas turbine combustion performance test of hydrogen and carbon monoxide synthetic gas, **Fuel**, v. 89, p. 1485-1491, 2010.

Li, B.; Lindén, J.; Li, Z.S.; Konnov, A.A.; Aldén, M.; de Goey, L.P.H.; Accurate measurements of laminar burning velocity using the Heat Flux method and thermographic phosphor technique, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 33, p. 939-946, 2011.

Liao, D. **Uncertainty propagation: sample variance curve fitting**. Disponível em: <http://qbio.lookatphysics.com/>. Acessado em: 12 de dezembro de 2014.

Liu, C.; Yan, B.; Chen, G.; Bai, X.S. Structures and burning velocity of biomass derived gas flames, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 35, p. 540-555, 2010.

Lowry, W.; de Vries, J.; Krejci, M.; Peterson, E.; Serinyel, Z.; Metcalfe, W.; Curran, H.; Bourque, G. Laminar flame speed measurements and modeling of pure alkanes and alkane blends at elevated pressures, **Journal of Engineering for Gas Turbines and Power**, v. 133, 2011.

Metghalich, M.; Keck, J.C. Burning velocities of mixtures of air with methanol, isooctane, and indolene at high pressure and temperature, **Combustion and Flame**, v. 48, p. 191-210, 1982.

Meuwissen, R.J. **Extension of the heat flux method to liquid (bio-)fuels**, Ph. D Thesis, Eindhoven Technische Universiteit, Netherlands, 2009.

Moffat, R.J. Describing the uncertainties in experimental results, **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 1, p. 3-17, 1988.

Monteiro, E.; Bellenoue, M.; Sotton, J.; Moreira, N.A.; Malheiro, S. Laminar burning velocities and Makstein numbers of syngas-air mixtures, **Fuel**, v. 89, p. 1985-1991, 2010.



Nakahara, M.; Abe, F., Tokunaga, K.; Ishihara, A. Effect of dilution gas on burning velocity of hydrogen-premixed meso-scale spherical laminar flames, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 35, p. 639-646, 2015.

Natrajan, J.; Lieuwen, T.; Seitzman, J. Laminar flame speeds of H<sub>2</sub>/CO mixtures: effect of CO<sub>2</sub> dilutions, preheat temperature, and pressure, **Combustion and Flame**, v. 151, p. 104-119, 2007.

Olsson, L.; Fallde, M. Waste(d) potential: a socio-technical analysis of biogas production and use in Sweden, **Journal of Cleaner Production**, in press , p. 1-9, 2014.

Omega. **T type thermocouples reference tables**. Disponível em: [http://www.omega.com/toc\\_asp/frameset.html?book=Temperature&file=tc\\_colorcodes](http://www.omega.com/toc_asp/frameset.html?book=Temperature&file=tc_colorcodes). Acessado em: 8 de janeiro de 2015.

Park, C.; Choi, Y.; Kim, C.; Oh, S.; Lim, G.; Moriyoshi, Y. Performance and exhaust emissions characteristic of a spark ignition engine using ethanol and ethanol-reformed gas, **Fuel**, v. 89, p. 2118-2125, 2010.

Park, O.; Veloo, P.S; Liu, N.; Egolfopoulos, F.N. Combustion characteristics of alternative gaseous fuels, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 33, p. 887-894, 2011.

Park, C.; Park, S.; Lee, Y.; Kim, C.; Lee, S.; Moriyoshi, Y. Performance and emission characteristics of a SI engine fueled by low calorific biogas blended with hydrogen, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 36, p. 10080-10088. 2011.

Petrova, M.V.; Williams, F.A. A small detailed chemical-kinetic mechanism for hydrocarbon combustion, **Combustion and Flame**, v. 144, p. 526-544, 2006.

Porpatham, E.; Ramesh, A.; Nagalingam, B. Effect of hydrogen addition on the performance of a biogas fuelled spark ignition engine, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 32, p. 2057-2065, 2007.

Porpatham, E.; Ramesh, A.; Nagalingam, B. Investigation on the effect of concentration of methane in biogas when used as a fuel for spark ignition engine, **Fuel**, v. 87, p. 1651-1659, 2008.

Prathap, C.; Ray, A.; Ravi, M.R. Investigation of nitrogen dilution effects on the laminar burning velocity and flame stability of syngas fuel at atmospheric condition, **Combustion and Flame**, v. 155, p. 145-160, 2008.

Prathap, C.; Ray, A.; Ravi, M.R. Effects of dilution with carbon dioxide on the laminar burning velocity and flame stability of H<sub>2</sub>-CO mixtures at atmospheric condition, **Combustion and Flame**, v. 159, p. 482-492, 2012.

Qin, X.; Ju, Y. Measurement of burning velocities of dimethyl ether and air premixed flames at elevated pressures, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 30, p. 233-240, 2005.

Rook, R. **Acoustics in burner-stabilised flames**. Ph. D Thesis, Eindhoven Technische Universiteit, Eindhoven, Holanda, 2001.

Rostrup-Nielsen, J.R. Syngas in perspective, **Catalysis Today**, v. 71, p. 243-247, 2002.

Salimi, F.; Shamekhi, A.H.; Pourkhesalian, A.M.; Role of mixture richness, spark and valve timing in hydrogen-fuelled engine performance and emission, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 34, p. 3922-3929, 2009.

Sánchez, D.; Chacartegui, R.; Muñoz, A.; Sánchez, T. Performance analysis of a heavy duty combined cycle power plant burning various syngas fuels, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 35, p. 337-345, 2010.

Shah, A.; Srinivasan, R.; To, S.D.F., Columbus, E.P. Performance and emissions of a spark-ignited engine driven generator on biomass based syngas, **Bioresource Technology**, v. 101, p. 4656-4661, 2010.

Smallbone, A.J.; Liu, W.; Law, C.K.; You, X.Q.; Wang, H. Experimental and modeling study of laminar flame speed and non-premixed counterflow ignition of n-heptane, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 32, p. 1245-1252, 2009.

Smith, G.P., Golden, D.M., Frenklach, M., Moriarty, N.W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C.T., Hanson, R.K., Song, S., Gardiner, W.C., Jr., Lissianski, V.V. and Qin, Z. **Gri-Mech 3.0**, 1999. Disponível em: <[http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)>.

Smooke, D.M.; Miller, J.A.; Kee, R.J. Determination of adiabatic flame speeds by boundary value methods, **Combustion Science and Technology**, v. 34, p. 79-90, 1983.

Somers, B. **The simulation of flat flames with detailed and reduced chemical models**, Ph. D Thesis, Eindhoven Technische Univesiteit, Eindhoven, Holanda, 1994.

Subramanian, K.A.; Mathad, V.C.; Vijay, V.K.; Subbarao, P.M.V. Comparative evaluation of emissions and fuel economy of an automotive spark ignition vehicle fuelled with methane enriched biogas and CNG using chassis dynamometer, **Applied Energy**, v. 105, p. 17-29, 2013.

Sun, H.; Yang, S.I.; Jomaas, G.; Law, C.K. High-pressure laminar flame speeds and kinetic modeling of carbon monoxide/hydrogen combustion, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 31, p. 349-446, 2007.

Uusitalo, V.; Soukka, R.; Horttanainen, M.; Niskanen, A.; Havukainen, J. Economics and greenhouse gas balance of biogás use systems in the Finnish transportation sector, **Renewable Energy**, v. 51, p. 132-140, 2013.

van Maaren, A. **One-step chemical reaction parameters for premixed laminar flames**, Ph. D Thesis, Eindhoven Technische Universiteit, Netherlands, 1994.

van Maaren, A.; de Goey, L.P.H. Laser Doppler Thermometry in Flat Flames, **Combustion Science and Technology**, v. 99, p. 105-118, 1994.

van Maaren, A.; de Goey, L.P.H. Stretch and The Adiabatic Burning Velocity of Methane- and Propane-Air Flames, **Combustion Science and Technology**, v. 102, p. 309-314, 1994.

van Maaren, A.; Thung, D.S.; de Goey, L.P.H. Measurement of Flame Temperature and Adiabatic Burning Velocity of Methane/Air Mixtures, **Combustion Science and Technology**, v. 96, p. 327-344, 1994.

Varea, E.; Modica, V.; Renou, B; Boukhalfa, A.M. Pressure effects on laminar burning velocities and markstein lengths for isooctane-ethanol-air mixtures, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 34, p. 735-744, 2013.

Veziroglu, T.N.; Barbir, F. Hydrogen: the wonder fuel, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 17, p. 391-404, 1992.

Vikram, R.; Purnanand, V.B. Experimental Investigation on biogas reforming for syngas production over an alumina based nickel catalyst, **Energy Procedia**, v. 54, p. 236-245, 2014.

Von Mitzlaff, K. **Engines for biogas**, Lengericher Handelsdruckerei, Germany, 1988.

Vu, T.M.; Park, J.; Kwon, O.B.; Kim, J.S. Effects of hydrocarbon addition on cellular instabilities on expanding syngas-air spherical premixed flames, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 34, p. 6961-6969, 2009.

Wang, H. A new mechanism for initiation of free-radical chain reactions during high-temperature, homogeneous oxidations of unsaturated hydrocarbons: ethylene, propyne, and allene, **International Journal of Chemical Kinetics**, v. 33, p. 698-706, 2001.

Wang, H.; You, X.; Joshi, A.V.; Davis, S.G.; Laskin, A.; Egolfopoulos, F.; Law; C.K. **USC Mech Version II – High-temperature combustion reaction model of H<sub>2</sub>/CO/C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> compounds**, 2007. Disponível em: [http://ignis.usc.edu/USC\\_Mech\\_II.htm](http://ignis.usc.edu/USC_Mech_II.htm).

Weiland, P. Biogas production: current state and perspectives, **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 85, p. 849-860, 2010.

Wu, C.K.; Law, C.K. On the determination of laminar flame speeds from stretched flames, **The Combustion Institute**, v. 20, p. 1941-1949, 1984.

Yepes, H.A.; Amell, A.A. Laminar burning velocity with oxygen-enriched air of syngas produced from biomass gasification, **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 38, p. 7519-7527, 2013.

## APÊNDICE A – Métodos de medição da velocidade de queima

Para se medir a  $S_L^0$ , necessita-se uma chama adiabática e sem estiramentos, algo de difícil reprodução experimental. Estiramentos de chama ocorrem quando há distorções na frente de chama causadas por não uniformidades do campo de velocidades ou do processo de combustão que, segundo Wu e Law, 1984, causam alterações na velocidade de queima. Além disso, a  $S_L^0$  também sofre influência da pressão, temperatura, composição do combustível, composição do oxidante e proporção entre ambos (geralmente expressa pela razão de equivalência). Todos esses fatores dificultam medições precisas da velocidade de queima laminar adiabática.

Ao longo dos anos, diversos métodos foram desenvolvidos a fim de fornecer medições confiáveis desse parâmetro. Alguns desses métodos, os mais utilizados atualmente, serão brevemente descritos a seguir.

### A.2 Método do Bico de Bunsen

Provavelmente o método mais simples empregado na medição da velocidade de queima pois não necessita de dispositivos nem equipamentos de grande complexidade. Nele, a determinação da velocidade de queima é realizada a partir de chamas cônicas estabilizadas no conhecido queimador tipo Bico de Bunsen. Entretanto, devido a efeitos de estiramento e perdas de calor presentes na chama estabilizada nesse tipo de queimador, esse talvez seja também o método menos preciso utilizado atualmente.

Nesse método, a velocidade de queima é encontrada dividindo-se a vazão da mistura pela área da chama. Para tal, assume-se que a velocidade de propagação da chama é constante ao longo da mesma [Law, 2006]. Além disso, a chama sofre perda de calor para o queimador em sua base e efeitos de curvatura em seu topo que deformam consideravelmente a chama, alterando sua área total.

A determinação da área do cone é geralmente realizada com o auxílio de técnicas de análise de imagem como, por exemplo, *shadowgraph*, *schlieren* e, mais recentemente, *laser doppler velocimetry*, que revelam não-uniformidades em meios transparentes, melhor definindo a frente de chama. Entretanto, mesmo assim, existe uma grande dificuldade em se obter resultados precisos a partir desse método uma vez que, conforme demonstrado por Kuo, 2005,

medições da área da chama podem variar até 10% dependendo da técnica de medição empregada.

### A.3 Método da chama estabilizada em um escoamento

Esse método foi desenvolvido na década de 50 para estudar a estrutura, estabilidade e extinção de chamas. Nele, uma chama plana é estabilizada em um campo de velocidades divergentes em relação a um ponto de estagnação. Tal campo de velocidades pode ser gerado por um jato direcionado contra uma superfície líquida ou sólida ou pelo contra posicionamento de dois jatos idênticos (*counterflow*).

Três décadas depois, Wu e Law, 1984, propuseram esse método em sua configuração *counterflow* para a medição da  $S_L^0$  (Figura A.1). Nessa configuração, duas chamas planas laminares podem ser estabilizadas simultaneamente em estado quase adiabático e a velocidade de queima é obtida através de técnicas ópticas para a medição da velocidade do escoamento. No entanto, essa configuração também gera estiramentos na chama pela não perpendicularidade entre as linhas de corrente e a frente de chama.

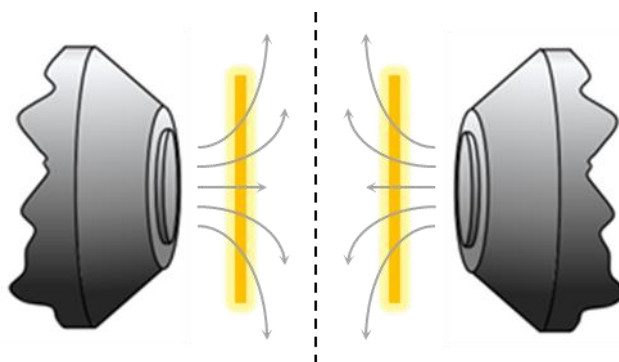


Figura A.1 – Configuração *counterflow* proposta por Wu e Law, 1984, para a medição da  $S_L^0$ .

Fonte: adaptado de Hoerlle, 2015.

Alterando-se a distância entre os bocais e/ou a velocidade dos jatos, o estiramento da chama pode ser controlado. Assim, uma correlação entre a velocidade de queima e a taxa de estiramento pode ser obtida repetindo-se o experimento para diferentes estiramentos de chama. A  $S_L^0$  é então determinada através de extrapolação para estiramento nulo, podendo esta ser linear ou não. As incertezas desse método foram estimadas em 5% [Egolfopoulos et al., 2014].

#### A.4 Método da chama de expansão esférica

Método amplamente utilizado para medição da  $S_L^0$ , principalmente para pressões elevadas [Qin e Ju, 2005; Varea et al., 2013; Beeckmann et al. 2014; Hinton e Stone, 2014; Nakaraha et al., 2015]. Ele consiste na produção de uma frente de chama que se propaga em todas as direções (esférica) dentro de um ambiente controlado. O fenômeno de propagação dessa chama é registrado através de sensores de pressão e temperatura e câmeras de alta velocidade, como pode ser observado na Figura A.2. Diferentemente de outros métodos, a chama de expansão esférica cria chamas transientes, uma vez que o processo de combustão se dá em um recipiente fechado. Isso se traduz em um curto espaço de tempo para a aquisição de dados, pois os reagentes são rapidamente consumidos pelo processo de combustão.

Nesse método, efeitos transientes e de curvatura submetem a chama a taxas de estiramento variáveis com o tempo e a determinação da  $S_L^0$  é feita a partir da velocidade de expansão da chama e extrapolação para uma situação de estiramento nulo [Gu et al., 2000]. Essas extrapolações podem ser lineares ou não lineares (baseadas em modelos fenomenológicos). Adicionalmente, correções para o aumento de pressão e temperatura durante a expansão da chama devem ser feitas. Egolfopoulos et al., 2014, estimou as incertezas para os dados não tratados desse método em 3%.

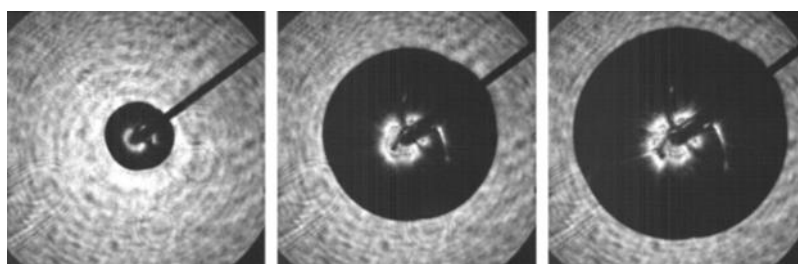


Figura A.2 – Processo de expansão de uma frente de chama esférica. Fonte: adaptado de Beeckmann et al., 2014.

#### A.5 Método da chama plana

Esse método consiste na estabilização de uma chama plana (sem estiramento) sobre um meio poroso ou placa perfurada. Botha e Spalding, 1954, foram os primeiros a utilizar esse método para a medição da  $S_L^0$  ao notar que o calor perdido pela chama para o queimador varia com a velocidade da mistura que alimenta a chama. Na variação desse método criada por eles,



a perda de calor da chama para o queimador é quantificada e a  $S_L^0$  obtida por extrapolação até a condição adiabática. O queimador mais recente utilizado nessa variação é o queimador McKenna (Figura A.3), no qual a perda de calor da chama é quantificada pela mudança de temperatura do fluido que passa pela serpentina dentro do meio poroso.

A fim de eliminar a necessidade de extrapolação causada pela perda de calor, de Goey et al., 1993, propuseram uma outra variação para o método: o método do fluxo de calor. Essa variação, adotada pelo presente trabalho, consiste na utilização de uma fonte de calor secundária para aquecer a mistura não queimada e compensar a perda de calor da chama para o queimador. Essa variação é melhor descrita na seção 2.1.

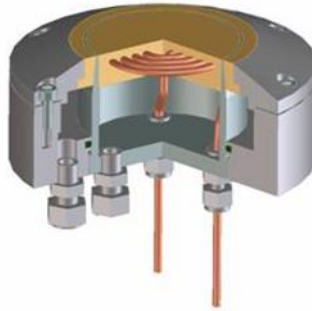


Figura A.3 – Queimador McKenna [Holthuis & Associates, 2015]. Queimador atual da variação criada por Botha e Spalding, 1954.

## APÊNDICE B – Parâmetros utilizados nas simulações numéricas

Tabela B.1 – Principais parâmetros utilizados nas simulações numéricas.

<b>Solver</b>	
<b>Critério de convergência</b>	1,00E-10
<b>Esquema diferencial</b>	Exponencial ( <i>Power-Law</i> )
<b>Modelos</b>	
<b>Tipo de chama</b>	Livre
<b>Tipo de simulação</b>	Estacionário
<b>Modelo de transporte</b>	Complexo
<b>Difusão térmica</b>	Sim
<b>Química</b>	Detalhada
<b>Radição</b>	Não
<b>Condições de contorno</b>	
<b>Temperatura de entrada</b>	298 K
<b>Pressão de entrada</b>	1 atm
<b>Malha</b>	
<b>Número de pontos</b>	300
<b>Limite esquerdo [cm]</b>	-0.5
<b>Limite direito [cm]</b>	2
<b>Esquema de interpolação</b>	Linear

## APÊNDICE C – Procedimento experimental

O procedimento experimental para a realização da medição da  $S_L^0$  no setup experimental do presente trabalho começa pela etapa de preparação do experimento. De modo a reduzir o consumo de combustível necessário para essa etapa, a mesma é dividida em duas partes. A primeira parte consiste na estabilização térmica dos banhos termostáticos e na pressurização das linhas de gás (caso já não estejam pressurizadas) e aquecimento dos controladores de vazão. Esse aquecimento é essencial para manter a precisão dos controladores. Essa parte dura, em média, de 1 a 1,5 horas devido ao tempo necessário para a estabilização térmica dos banhos.

Somente após a estabilização térmica dos banhos passa-se para a segunda parte da etapa de preparação a qual se resume na estabilização da primeira chama a ser medida e posterior aguardo até que o sistema entre em regime permanente. No presente trabalho, considerou-se que tal regime é atingido quando as diferenças entre as temperaturas máximas e mínimas indicadas por qualquer termopar preso a placa sejam inferiores a 0,5 K no intervalo de medição (30 segundos). Em média, o tempo necessário para isso ocorrer é de, aproximadamente, 15 minutos.

Assim que o sistema se encontre em regime permanente, inicia-se a etapa de medição onde o perfil de temperaturas experimental da placa perfurada é adquirido. A cada alteração realizada no sistema (vazão e  $\phi$  da mistura), tempo é dado para que o mesmo entre novamente em regime permanente. Isso leva, em média, 2 minutos para alterações na vazão (devido a pequena diferença nas temperaturas indicadas pelos termopares causadas por tais mudanças) e 5 minutos para alterações no  $\phi$  da mistura.

Utilizou-se de 7 a 9 perfis de temperatura para encontrar a velocidade de queima laminar adiabática de cada mistura, resultando em um tempo médio de experimento de 16 minutos (desconsiderando o tempo de preparação).

## APÊNDICE D – Coeficiente de determinação

Segundo Li et al., 2011, a comparação qualitativa entre modelos só é válida quando as disparidades entre medidas e previsões de diferentes mecanismos é óbvia e excede as incertezas experimentais. O desenvolvimento e melhoramento de modelos, no entanto, requer uma análise quantitativa das discrepâncias. Com isso em mente, o presente trabalho optou por utilizar o coeficiente de determinação, ou  $R^2$ , como um dos parâmetros da análise quantitativa de seus resultados.

O coeficiente de determinação é um parâmetro que varia de 0 a 1 que indica a proporção da variação total em torno da média explicada por uma regressão [Draper e Smith, 1998], ou seja, o quanto um modelo consegue explicar os valores observados ou medidos. Quanto mais próximo da unidade, melhor um modelo explica o fenômeno estudado. Ele é definido por:

$$R^2 = 1 - \frac{SQ_{res}}{SQ_{tot}} \quad (C.1)$$

onde  $SQ_{res}$  é a soma dos quadrados dos resíduos, ou seja, das diferenças entre o modelo e as amostras e  $SQ_{tot}$  é a soma total dos seus quadrados, definidos respectivamente por:

$$SQ_{res} = \sum_{i=1}^n (\hat{o}_i - \bar{o})^2 \quad (C.2)$$

e

$$SQ_{tot} = \sum_{i=1}^n (o_i - \bar{o})^2 \quad (C.3)$$

onde  $n$  é o número de observações,  $o_i$  o valor observado,  $\bar{o}$  a sua média e  $\hat{o}_i$  o seu valor estimado (previsto).

O coeficiente de determinação apresenta diversas peculiaridades apontadas pela literatura, como apresentar valores negativos em alguns casos de comparação entre regressões não lineares e dados (o que não ocorreu no presente trabalho). Entretanto, ele ainda é bastante utilizado como parâmetro de comparação e análise preliminar [Draper e Smith, 1998] e é

utilizado pelo presente trabalho como parâmetro de determinação do mecanismo que melhor previu os resultados experimentais.

## APÊNDICE E – Resultados tabelados

### D.1 Validações

#### D.1.1 Metano

Tabela E.1 – Resultados experimentais tabelados.

$\phi$	$\delta\phi$	$S_L^0$ [cm/s]	$\delta S_L^0$ [cm/s]	$\delta S_L^0$ [%]
<b>0,7</b>	0,020	15,47	1,38	8,91%
<b>0,8</b>	0,015	23,84	0,66	2,77%
<b>0,9</b>	0,014	30,75	0,53	1,71%
<b>1</b>	0,014	35,08	0,50	1,42%
<b>1,1</b>	0,014	35,77	0,49	1,36%
<b>1,2</b>	0,016	31,92	0,49	1,54%
<b>1,3</b>	0,019	24,38	0,54	2,20%
<b>1,4</b>	0,026	15,86	0,75	4,74%

Tabela E.2 – Resultados numéricos (em cm/s) tabelados.

$\phi$	GRI 3.0	Davis et al.	Konnov	San Diego	USC II
<b>0,6</b>	11,23	11,23	9,18	11,2	12,08
<b>0,7</b>	18,89	18,89	16,66	18,77	19,97
<b>0,8</b>	26,45	26,45	24,23	25,73	27,06
<b>0,9</b>	32,73	32,73	30,46	31,19	32,39
<b>1</b>	36,63	36,63	34,21	34,41	35,25
<b>1,1</b>	37,01	37,01	34,49	34,6	34,99
<b>1,2</b>	32,52	32,52	30,22	30,7	30,71
<b>1,3</b>	23	23	21,53	22,61	22,51
<b>1,4</b>	13,49	13,49	13,08	14,24	13,85
<b>1,5</b>	9,78	9,78	9,25	10,12	9,65

Tabela E.3 – Diferenças absolutas (em cm/s), médias e  $R^2$  entre resultados numéricos e experimentais.

$\phi$	GRI 3.0	Davis et al.	Konnov	San Diego	USC II
<b>0,7</b>	3,42	3,42	1,19	3,30	4,50
<b>0,8</b>	2,61	2,61	0,39	1,89	3,22
<b>0,9</b>	1,98	1,98	0,29	0,44	1,63
<b>1</b>	1,55	1,55	0,87	0,67	0,17
<b>1,1</b>	1,24	1,24	1,28	1,17	0,78
<b>1,2</b>	0,60	0,60	1,70	1,23	1,21
<b>1,3</b>	1,38	1,38	2,85	1,77	1,87
<b>1,4</b>	2,38	2,38	2,78	1,63	2,01
<b>Média</b>	1,89	1,89	1,42	1,51	1,92
<b><math>R^2</math></b>	0,9245	0,9245	0,9497	0,9476	0,9054

#### D.1.2 H<sub>2</sub>/CO

Tabela E.4 – Resultados experimentais tabelados.

$\phi$	$\delta\phi$	$S_L^0$ [cm/s]	$\delta S_L^0$ [cm/s]	$\delta S_L^0$ [%]
<b>0,6</b>	0,006	14,94	0,74	4,95%
<b>0,7</b>	0,006	19,38	0,83	4,31%
<b>0,8</b>	0,006	24,36	0,91	3,73%
<b>0,9</b>	0,006	29,49	0,89	3,00%
<b>1</b>	0,006	34,67	0,76	2,20%

Tabela E.5 – Resultados numéricos (em cm/s) tabelados.

$\phi$	GRI 3.0	Davis et al.	Konnov	San Diego	USC II
<b>0,6</b>	16,86	16,86	16,67	15,46	17,72
<b>0,7</b>	22,38	22,38	21,95	20,44	23,06
<b>0,8</b>	27,57	27,57	26,94	25,14	28,02
<b>0,9</b>	32,38	32,38	31,57	29,51	32,56
<b>1</b>	36,81	36,81	35,85	33,54	36,7

Tabela E.6 – Diferenças absolutas (em cm/s), médias e  $R^2$  entre resultados numéricos e experimentais.

$\phi$	GRI 3.0	Davis et al.	Konnov	San Diego	USC II
<b>0,6</b>	1,92	1,92	1,73	0,52	2,78
<b>0,7</b>	3,00	3,00	2,58	1,06	3,68
<b>0,8</b>	3,21	3,21	2,58	0,78	3,66
<b>0,9</b>	2,89	2,89	2,08	0,02	3,07
<b>1</b>	2,14	2,14	1,18	1,13	2,03
<b>Média</b>	2,63	2,63	2,03	0,70	3,04
<b><math>R^2</math></b>	0,8541	0,8541	0,9106	0,9867	0,8040



## D.2 Biogás

Tabela E.7 – Resultados experimentais tabelados.

Diluição	$\phi$	$\delta\phi$	$S_L^0$ [cm/s]	$\delta S_L^0$ [cm/s]	$\delta S_L^0$ [%]
10%	0,8	0,014	23,13	0,49	2,13%
	0,9	0,013	28,99	0,46	1,59%
	1	0,013	32,65	0,48	1,48%
	1,1	0,014	32,85	0,49	1,49%
	1,2	0,015	28,97	0,48	1,65%
	1,3	0,019	21,46	0,51	2,36%
	20%	0,8	0,014	19,99	0,58
0,9		0,013	26,18	0,50	1,92%
1		0,013	29,36	0,47	1,62%
1,1		0,013	29,47	0,46	1,56%
1,2		0,015	25,84	0,44	1,71%
1,3		0,019	19,06	0,52	2,75%
30%		0,8	0,014	17,62	0,50
	0,9	0,013	22,99	0,46	1,98%
	1	0,013	25,77	0,43	1,65%
	1,1	0,014	24,72	0,40	1,61%
	1,2	0,015	22,19	0,40	1,78%
	1,3	0,019	16,07	0,47	2,93%
	40%	0,8	0,014	15,54	0,40
0,9		0,013	19,63	0,37	1,86%
1		0,013	21,78	0,37	1,70%
1,1		0,014	21,37	0,37	1,73%
1,2		0,016	18,13	0,36	2,00%
1,3		0,020	12,76	0,35	2,75%
50%		0,8	0,015	11,76	0,44
	0,9	0,013	15,81	0,37	2,35%
	1	0,013	17,48	0,33	1,88%
	1,1	0,015	16,80	0,31	1,86%
	1,2	0,017	13,73	0,36	2,60%

Tabela E.8 – Reduções da velocidade de queima tabeladas. Velocidades com 0% de diluição utilizadas com referência.

$\phi$	Diluição				
	10%	20%	30%	40%	50%
<b>0,8</b>	2,99%	16,17%	26,10%	34,80%	50,68%
<b>0,9</b>	5,75%	14,87%	25,25%	36,18%	48,58%
<b>1</b>	6,92%	16,31%	26,54%	37,91%	50,19%
<b>1,1</b>	8,16%	17,62%	28,73%	40,25%	53,01%
<b>1,2</b>	9,26%	19,05%	30,51%	43,22%	57,00%
<b>1,3</b>	11,99%	21,81%	34,08%	47,67%	
<b>Média</b>	7,51%	17,64%	28,53%	40,01%	51,89%

Tabela E.9 – Resultados numéricos (em cm/s) tabelados.

Diluição	$\phi$	GRI 3.0	Davis et al.	Konnov	San Diego	USC II
10%	0,7	17,78	17,78	15,71	17,77	18,64
	0,8	24,79	24,79	22,78	24,28	25,2
	0,9	30,5	30,5	28,5	29,26	30,02
	1	33,89	33,89	31,8	32,03	32,44
	1,1	33,95	33,95	31,8	31,88	31,91
	1,2	29,5	29,5	27,6	27,91	27,68
	1,3	20,47	20,47	19,37	20,15	19,88
	1,4	11,66	11,66	11,51	12,42	11,85
20%	0,7	16,5	16,5	14,61	16,6	17,39
	0,8	22,89	22,89	21,12	22,6	23,41
	0,9	27,97	27,97	26,26	27,05	27,7
	1	30,8	30,8	29,07	29,34	29,68
	1,1	30,52	30,52	28,79	28,85	28,86
	1,2	26,14	26,14	24,66	24,81	24,64
	1,3	17,66	17,66	16,94	17,45	17,26
	1,4	9,75	9,75	9,8	10,48	9,92
30%	0,7	14,99	14,99	13,32	15,22	15,9
	0,8	20,69	20,69	19,17	20,63	21,32
	0,9	25,07	25,07	23,68	24,5	25,03
	1	27,31	27,31	25,97	26,28	26,53
	1,1	26,69	26,69	25,39	25,43	25,42
	1,2	22,39	22,39	21,36	21,37	21,25
	1,3	14,56	14,56	14,23	14,48	14,34
	1,4	7,79	7,79	7,98	8,46	7,9
40%	0,7	13,21	13,21	11,78	13,56	14,14
	0,8	18,12	18,12	16,89	18,3	18,86
	0,9	21,73	21,73	20,69	21,53	21,93
	1	23,36	23,36	22,42	22,77	22,93
	1,1	22,39	22,39	21,55	21,59	21,54
	1,2	18,22	18,22	17,65	17,55	17,45
	1,3	11,17	11,17	11,23	11,28	11,15
	1,4	5,87	5,87	6,09	6,41	5,87
50%	0,7	11,08	11,08	9,93	11,54	12
	0,8	15,09	15,09	14,19	15,52	15,93
	0,9	17,88	17,88	17,21	18,05	18,31
	1	18,87	18,87	18,35	18,74	18,79
	1,1	17,61	17,61	17,21	17,26	17,16
	1,2	13,65	13,65	13,52	13,34	13,24
	1,3	7,61	7,61	7,98	7,91	7,73
	1,4	4,07	4,07	4,25	4,46	3,96

Tabela E.10 – Diferenças absolutas (em cm/s), médias e  $R^2$  entre resultados numéricos e experimentais.

Diluição	$\phi$	GRI 3.0	Davis et al.	Konnov	San Diego	USC II
10%	0,8	1,66	1,66	0,34	1,15	2,07
	0,9	1,51	1,51	0,48	0,28	1,03
	1	1,24	1,24	0,85	0,62	0,21
	1,1	1,10	1,10	1,05	0,96	0,94
	1,2	0,53	0,53	1,37	1,06	1,29
	1,3	0,98	0,98	2,09	1,30	1,58
	Média	1,17	1,17	1,03	0,90	1,19
	$R^2$	0,9204	0,9204	0,9260	0,9514	0,9081
20%	0,8	2,90	2,90	1,13	2,61	3,42
	0,9	1,79	1,79	0,08	0,87	1,52
	1	1,44	1,44	0,29	0,02	0,32
	1,1	1,06	1,06	0,68	0,62	0,60
	1,2	0,29	0,29	1,18	1,03	1,20
	1,3	1,40	1,40	2,12	1,61	1,81
	Média	1,48	1,48	0,91	1,13	1,48
	$R^2$	0,8922	0,8922	0,9507	0,9257	0,8771
30%	0,8	3,07	3,07	1,55	3,01	3,70
	0,9	2,08	2,08	0,70	1,52	2,05
	1	1,54	1,54	0,20	0,51	0,76
	1,1	1,20	1,20	0,10	0,06	0,07
	1,2	0,20	0,20	0,83	0,82	0,94
	1,3	1,51	1,51	1,84	1,59	1,73
	Média	1,60	1,60	0,87	1,25	1,54
	$R^2$	0,9380	0,9380	0,9781	0,9539	0,9304
40%	0,8	2,57	2,57	1,35	2,76	3,31
	0,9	2,10	2,10	1,07	1,91	2,31
	1	1,57	1,57	0,64	0,99	1,15
	1,1	1,02	1,02	0,18	0,22	0,17
	1,2	0,09	0,09	0,48	0,58	0,67
	1,3	1,58	1,58	1,53	1,48	1,61
	Média	1,49	1,49	0,87	1,32	1,54
	$R^2$	0,9733	0,9733	0,9907	0,9768	0,9676
50%	0,8	3,34	3,34	2,43	3,76	4,17
	0,9	2,06	2,06	1,40	2,24	2,50
	1	1,39	1,39	0,87	1,26	1,32
	1,1	0,80	0,80	0,41	0,45	0,36
	1,2	0,08	0,08	0,21	0,39	0,49
	Média	1,54	1,54	1,06	1,62	1,77
	$R^2$	0,9789	0,9789	0,9896	0,9753	0,9698

### D.3 Gás de síntese

Tabela E.11 – Resultados experimentais tabelados.

$\phi$	$\delta\phi$	$S_L^0$ [cm/s]	$\delta S_L^0$ [cm/s]	$\delta S_L^0$ [%]
<b>0,65</b>	0,013	10,65	0,86	8,05%
<b>0,8</b>	0,011	16,76	0,61	3,63%
<b>0,95</b>	0,011	21,29	0,57	2,66%
<b>1,1</b>	0,011	25,25	0,59	2,34%
<b>1,55</b>	0,019	18,43	0,96	5,19%
<b>1,7</b>	0,037	7,73	1,34	17,35%

Tabela E.12 – Resultados numéricos (em cm/s) tabelados.

$\phi$	GRI 3.0	Davis et al.	Konnov	San Diego	USC II
<b>0,65</b>	13,04	13,04	13,75	13,13	13,98
<b>0,8</b>	19,57	19,57	20,17	19,4	19,98
<b>0,95</b>	24,92	24,92	25,36	24,2	24,35
<b>1,1</b>	28,55	28,55	28,84	27,18	26,85
<b>1,55</b>	22,76	22,76	23,8	21,67	20,15
<b>1,7</b>	12,7	12,7	14,7	14,32	12,28

Tabela E.13 – Diferenças absolutas (em cm/s), médias e  $R^2$  entre resultados numéricos e experimentais.

$\phi$	GRI 3.0	Davis et al.	Konnov	San Diego	USC II
<b>0,65</b>	2,39	2,39	3,10	2,48	3,33
<b>0,8</b>	2,81	2,81	3,41	2,64	3,22
<b>0,95</b>	3,62	3,62	4,07	2,91	3,06
<b>1,1</b>	3,30	3,30	3,59	1,93	1,60
<b>1,55</b>	4,33	4,33	5,38	3,24	1,72
<b>1,7</b>	4,97	4,97	6,97	6,59	4,55
<b>Média</b>	3,57	3,57	4,42	3,30	2,91
<b><math>R^2</math></b>	0,6213	0,6213	0,4019	0,6303	0,7340