

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA - CURSO DE ENGENHARIA MECÂNICA
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

SIMULAÇÃO E COMPARAÇÃO DE PARÂMETROS FUNDAMENTAIS DA
COMBUSTÃO DO ETANOL, GÁS NATURAL E HIDROGÊNIO

por

Henry Yoneama Dias

Monografia apresentada ao Departamento de Engenharia Mecânica da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para obtenção do diploma de Engenheiro Mecânico.

Porto Alegre, Abril de 2023

DADOS INTERNACIONAIS DE CATALOGAÇÃO

CIP - Catalogação na Publicação

Dias, Henry Yoneama
SIMULAÇÃO E COMPARAÇÃO DE PARÂMETROS FUNDAMENTAIS
DA COMBUSTÃO DO ETANOL, GÁS NATURAL E HIDROGÊNIO /
Henry Yoneama Dias. -- 2023.
15 f.
Orientador: Andrés Armando Mendiburu Zevallos.

Trabalho de conclusão de curso (Graduação) --
Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Escola de
Engenharia, Curso de Engenharia Mecânica, Porto
Alegre, BR-RS, 2023.

1. Combustão. 2. Cinética química. 3. Temperatura
de chama adiabática. 4. Velocidade de chama laminar.
5. Tempo de retardo de ignição. I. Zevallos, Andrés
Armando Mendiburu, orient. II. Título.

Elaborada pelo Sistema de Geração Automática de Ficha Catalográfica da UFRGS com os
dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Henry Yoneama Dias

SIMULAÇÃO E COMPARAÇÃO DE PARÂMETROS FUNDAMENTAIS DA
COMBUSTÃO DO ETANOL, GÁS NATURAL E HIDROGÊNIO

ESTA MONOGRAFIA FOI JULGADA ADEQUADA COMO PARTE DOS
REQUISITOS PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
ENGENHEIRO MECÂNICO
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELA BANCA EXAMINADORA DO
CURSO DE ENGENHARIA MECÂNICA

Prof. Cirilo Seppi Bresolin
Coordenador do Curso de Engenharia Mecânica

Área de concentração: Energia e fenômenos de transporte

Orientador: Andrés Armando Mendiburu Zevallos

Comissão de Avaliação:

Prof. Andrés Armando Mendiburu Zevallos (Presidente)

Prof. Felipe Tempel Stumpf

Prof. Volnei Borges

Porto Alegre, Abril de 2023

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho ao meu pai e doutor, Johnny Ferraz Dias, e à minha mãe e doutora Maria Lucia Yoneama.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais por me incentivarem à estudar e percorrer a longa jornada da formação em engenharia mecânica na UFRGS. Também agradeço, principalmente, aos meus amigos da “Mochila do Gustavo” e, especialmente, ao Guilherme Moacir Catusso.

ΕΠÍΓΡΑΦΕ

The problem is knowing enough about a subject to think that you're right, but not enough to know that you're wrong.

Neil deGrasse Tyson

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA - CURSO DE ENGENHARIA MECÂNICA
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO – 2023

**SIMULAÇÃO E COMPARAÇÃO DE PARÂMETROS FUNDAMENTAIS
DA COMBUSTÃO DO ETANOL, GÁS NATURAL E HIDROGÊNIO**

Henry Yoneama Dias
henryyd@gmail.com

Resumo. Este trabalho tem como objetivo principal a realização de uma análise onde o etanol, o gás natural e o hidrogênio serão comparados em termos das suas características principais de combustão frente aos parâmetros escolhidos e simulados com o software Cantera. Tais parâmetros são: a temperatura de chama adiabática, a velocidade de chama laminar e o tempo de retardo de ignição. Almeja-se entender os aspectos fundamentais do comportamento destes importantes combustíveis visto que este é o primeiro passo para pesquisas e avanços em suas aplicações. Dados experimentais de trabalhos científicos foram utilizados para validar algumas das simulações realizadas. Determinou-se as variáveis dependentes e independentes que compõem a solução dos problemas, com as independentes de base sendo o combustível, a composição do ar e o mecanismo de cinética química. Para a temperatura de chama adiabática, parâmetro teórico bastante influente nas taxas das reações químicas, será dado ênfase na termoquímica. Para a velocidade de chama laminar e o tempo de retardo de ignição, parâmetros experimentais que possuem um importante papel na validação dos mecanismos de cinética química, será dado ênfase na cinética global, ainda que utilizando algumas características básicas da cinética detalhada.

Palavras-chave: combustão, cinética química, temperatura de chama adiabática, velocidade de chama laminar, tempo de retardo de ignição

Simulation and comparison of fundamental combustion parameters for ethanol, natural gas and hydrogen

Abstract. The main goal of this work is to conduct an analysis in which ethanol, natural gas and hydrogen will be compared in terms of their main combustion characteristics against the chosen and simulated parameters with Cantera software. The chosen parameters are: adiabatic flame temperature, laminar flame speed and ignition delay time. This work aspires to extract the essence of the behaviour for these important fuels given that this is the first step for research and advances to be made in the field. Experimental data from scientific articles were utilized to validate some of the simulations made. The dependent and independent variables that compose the problems' solutions were determined, with the independent base ones being the fuel, air composition and chemical kinetics mechanism. For the adiabatic flame temperature, a theoretical parameter with significant influence on reaction rates, it will be given emphasis on thermochemistry. For the laminar flame speed and ignition delay time, experimental parameters with an important role in kinetic mechanisms validation, the emphasis will be on global kinetics, while still using basic characteristics of detailed kinetics.

Keywords: Combustion, chemical kinetics, adiabatic flame temperature, laminar flame speed, ignition delay time

NOMENCLATURA

Símbolo

Φ	Razão de equivalência	
AF	Razão ar-combustível	
AF_s	Razão ar-combustível estequiométrica	
\bar{m}'''	Taxa líquida de consumo de combustível	[kmol/m ³ s]
A_0	Fator pré exponencial	[(cm ³ /mol) ⁿ⁻¹ /s]
E_A	Energia de ativação	[kJ/mol]
R	Constante universal dos gases	[J/kmol K]
T	Temperatura	[K]
C_F	Concentração de combustível	[mol/cm ³]
C_{O_2}	Concentração de oxigênio	[mol/cm ³]
n	Ordem em relação ao combustível	
m	Ordem em relação ao oxidante	
H_{reag}	Entalpia dos reagentes	[J]
H_{prod}	Entalpia dos produtos	[J]
U_{reag}	Energia interna dos reagentes	[J]
U_{prod}	Energia interna dos produtos	[J]
T_i	Temperatura inicial	[K]
T_{ad}	Temperatura de chama adiabática	[K]
P	Pressão	[Pa]
P_i	Pressão inicial	[Pa]
P_f	Pressão final	[Pa]
$a, b, c, d \dots$	Número de mols das espécies	
$A, B, C, D \dots$	Espécies	
F	Espécie combustível	
O_x	Espécie oxidante	
P_r	Espécies produtos	
\bar{g}°_T	Função de Gibbs molar para uma espécie química pura	[J/kmol]
P^0	Pressão no estado padrão de referência	[Pa]
ρ	Massa específica	[kg/m ³]
u	Velocidade axial	[m/s]
W	Peso molecular da espécie	[g/mol]
V	Velocidade radial escalar	[s ⁻¹]
Λ	Autovalor de pressão	
μ	Viscosidade dinâmica	[Pa s]
c_p	Calor específico à pressão constante	[J/kg K]
λ	Condutividade térmica	[W m ⁻¹ K ⁻¹]
Y_k	Razão mássica da espécie k	
j_k	Fluxo de massa difusivo da espécie k	[mol/cm ² s]
h_k	Entalpia específica da espécie k	[J/kg]
$\dot{\omega}_k$	Taxa de geração da espécie k	[mol/s]
α	Difusividade térmica do ar	[m ² s ⁻¹]
ν	Número de mols de ar	
ρ_u	Densidade dos gases não queimados	[kg/m ³]
\dot{m}_{in}	Vazão mássica nas entradas	[kg/s]
$\dot{m}_{k,gen}$	Taxa de produção total da espécie k	[kg/s]
\dot{m}_{wall}	Taxa de produção de uma espécie na parede do reator	[kg/s]

f_w	Direção da parede	
A_w	Área da parede do reator	[m ²]
$v_w(t)$	Velocidade da parede em função do tempo	
p	Pressão	[Pa]
\dot{Q}	Taxa de transferência de calor	[W]
IDT	Tempo de retardo de ignição	[ms]
S_L	Velocidade de chama laminar	[m/s]

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	11
2. FUNDAMENTAÇÃO	11
2.1 Razão de equivalência	11
2.2 Cinética química	12
2.3 Temperatura de chama adiabática.....	13
2.4 Chamas laminares	14
2.5 Tempo de retardo de ignição	16
3. METODOLOGIA	16
4. RESULTADOS	18
4.1 Temperatura de chama adiabática.....	18
4.2 Velocidade de chama laminar	19
4.3 Tempo de retardo de ignição	22
5. CONCLUSÃO	24
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	26

| 1. INTRODUÇÃO

Com a crescente necessidade de se utilizar fontes de energia cada vez mais limpas, oriunda em parte pela própria consciência social, e principalmente pela pressão das entidades governamentais, surgiu-se a motivação de explorar esta importante questão através de uma análise de três combustíveis considerados menos agressivos ao meio ambiente: etanol, gás natural e hidrogênio. Representando 23,7% da matriz energética mundial (IEA, 2020) o gás natural, apesar de não ser uma fonte de energia renovável, produz 30% menos de dióxido de carbono em comparação com os derivados de petróleo. É um combustível conhecido por todos e muito utilizado nas atividades do dia a dia como no cozimento de alimentos e aquecimento de água, sendo uma fonte de energia abundante, barata e versátil. O etanol, por outro lado, é um combustível renovável com uma crescente importância mundial e que é especialmente importante para a economia dos Estados Unidos, com o Brasil sendo o segundo maior produtor. De acordo com a Renewable Fuels Association (2023), o etanol tem sido misturado com gasolina há mais de 40 anos, reduzindo a emissão de veículos, aumentando a independência energética e criando oportunidades de empregos em áreas rurais. Também é estimado que o etanol do milho reduz a emissão de gases de efeito estufa em até 50% comparado com a gasolina comum (SARISKY-REED, 2022). O terceiro combustível, o hidrogênio, é particularmente interessante por possuir características únicas e ter grande potencial ainda inexplorado. À primeira vista, utilizar o hidrogênio como combustível seria uma solução perfeita do ponto de vista de emissões, visto que o produto majoritário da sua combustão é essencialmente vapor de água, sendo praticamente isento de poluentes. Entretanto, entre os diversos desafios atuais do uso do hidrogênio como combustível em larga escala cita-se a sua difícil produção, que é relativamente cara e que emite carbono em quantidades significativas quando realizada através de meios economicamente viáveis.

A análise dos três combustíveis escolhidos será feita através de simulações com o *software* Cantera, onde será simulado a temperatura de chama adiabática, a velocidade de chama laminar e o tempo de retardo de ignição. O Cantera utiliza diferentes métodos de solução para as funções declaradas, porém, de forma geral, os problemas são resolvidos numericamente através do método de Newton. O único parâmetro em que é considerado alguma dimensão espacial para a sua solução é a velocidade de chama laminar, onde é declarado a espessura de chama Δx . Sempre que este trabalho se referenciar à uma “temperatura inicial”, é a temperatura da mistura combustível-oxidante ainda não queimada. Dito isso, a temperatura de chama adiabática é um parâmetro bastante influente nas taxas das reações de combustão, a velocidade de chama laminar é o parâmetro que determina a estrutura de uma chama, e o tempo de retardo de ignição mede, essencialmente, o tempo necessário para a combustão iniciar após o aquecimento inicial. O objetivo deste trabalho é comparar os três combustíveis frente aos parâmetros escolhidos e diferenciar as suas principais características. O entendimento do comportamento dos combustíveis é o ponto de partida para pesquisas e avanços dentro da área da combustão, para que se possa expandir suas aplicações e otimizar a eficiência dos processos envolvidos.

| 2. FUNDAMENTAÇÃO

2.1 Razão de equivalência

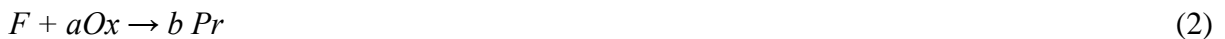
Definida como o parâmetro que determina se uma mistura ar-combustível é pobre, rica ou estequiométrica, a razão de equivalência possui grande influência na termoquímica e na cinética química e pode ser representada pela Eq. (1).

$$\Phi = AF_s / AF \quad (1)$$

Em que o termo AF_s representa a razão ar-combustível estequiométrica e o termo AF a razão ar-combustível da mistura. Lembrando que em uma mistura estequiométrica a quantidade de oxigênio presente é a estritamente necessária para a oxidação completa do combustível. Por outro lado, uma mistura pobre apresenta um déficit de combustível ou excesso de oxidante ($\Phi < 1$), enquanto uma mistura rica apresenta o contrário, excesso de combustível ou déficit de oxidante ($\Phi > 1$).

2.2 Cinética química

A cinética química é a área que estuda a forma como as concentrações das espécies produtos e reagentes de uma reação variam com o tempo. As taxas de consumo e produção das espécies químicas de todas as reações necessárias para levar uma determinada quantidade de combustível e oxidante a formarem seus produtos caracteriza os processos de combustão. Uma reação global como $H_2 + 0,5 (O_2 + 3,76 N_2) \rightarrow H_2O + 1,88 N_2$ ocorre através de centenas de reações químicas elementares e dezenas de espécies químicas intermediárias, que percorrem um certo caminho até formarem os produtos finais e juntas constituem os chamados mecanismos de cinética química. Tais mecanismos estão em constante evolução e desenvolvimento e são o objeto crucial que explicam uma grande parte dos fenômenos observados nos processos de combustão. Dito isso, muitas vezes a essência da cinética química de mecanismos complexos pode ser transmitida através de uma única reação global, ou mecanismo de reação global, e isso pode ser útil dependendo do tipo de análise. De Turns (2013), para um mecanismo de reação global em que um combustível F reage com a mols de oxidante para formar b mols de produtos, a reação pode ser representada pela Eq. (2)



A Eq. (3) para a taxa de consumo de combustível, para faixas de temperatura não muito extensas, aliada à formulação empírica de Arrhenius para o coeficiente de taxa pode ser expressa como:

$$\bar{m}''' = W_F [-A_0 \exp(-E_A/RT)] (C_F)^n (C_{O_2})^m \quad (3)$$

Ou seja, a taxa em que o combustível é consumido tem uma dependência exponencial com a temperatura e também com a ordem de reação n e m , determinadas experimentalmente e relacionadas à concentração de combustível e de oxidante, respectivamente. Salienta-se que este consumo é da perspectiva de uma espécie em reações químicas, e não do “consumo de combustível” que nos referimos corriqueiramente. Os valores para o etanol e o metano foram retirados de Turns (2013, Tab 5.1), enquanto que os dados para o hidrogênio foram retirados de Marinov *et al.* (1995, p. 1). Como neste trabalho o gás natural foi considerado como 87% de CH_4 , utilizou-se esse valor como aproximação.

Tab. 1 – Ordem de reação dos combustíveis

	Ordem do combustível n	Ordem do oxidante m
Etanol – C_2H_5OH	0,15	1,6
Gás natural – 87% CH_4	-0,3	1,3
Hidrogênio – H_2	1,0	0,5

Voltando nas reações elementares, as mesmas possuem diferentes funções nos mecanismos de cinética química e podem ser classificadas como: iniciadoras de cadeia, ramificadoras de cadeia, e finalizadoras de cadeia. As reações iniciadoras de cadeia são aquelas em que se forma um radical livre nos produtos sem a presença de radicais livres nos reagentes. Nas propagadoras de cadeia há o mesmo número de radicais livres nos reagentes e produtos, enquanto que nas ramificadoras de cadeia há mais radicais livres nos produtos do que nos reagentes. Por fim, nas reações finalizadoras de cadeia, reagentes com radicais livres formam somente espécies estáveis. A formação e propagação de radicais livres talvez seja um dos fenômenos mais influentes e explicativos para as reações de combustão, sendo a base para a ocorrência e o desenvolvimento das mesmas. É através da rápida propagação de radicais livres que a maior parte da energia de combustão é liberada. Como será visto, tal fenômeno é uma das características principais de diferenciação da combustão do hidrogênio comparado com o gás natural e o etanol, tendo grande impacto na velocidade de chama laminar e no tempo de retardo de ignição.

2.3 Temperatura de chama adiabática

Através de uma combinação da primeira lei aplicada ao volume de controle contendo a chama, juntamente com a condição de equilíbrio químico e a conservação atômica resolvidas simultaneamente (TURNNS, 2013), pode-se calcular a temperatura de chama adiabática. Essa é definida como a temperatura que uma chama teria considerando que todo o calor liberado pela combustão serve exclusivamente para aquecer os gases produtos da reação, sem transferências para fora do sistema. Tal sistema pode ser modelado a pressão ou volume constante. Segundo Turns (2013), o sistema a pressão constante seria o apropriado para tratar, por exemplo, da câmara de combustão de uma turbina a gás ou uma fornalha, enquanto que o sistema a volume constante seria o utilizado para um ciclo Otto. Por fim, o hidrogênio é muito utilizado como combustível na propulsão de foguetes. Abaixo temos a formulação da primeira lei aplicada a pressão e volume constantes, Eq. (4) e Eq. (5) respectivamente:

$$H_{reag}(T_i, P) = H_{prod}(T_{ad}, P) \quad (4)$$

$$U_{reag}(T_i, P_i) = U_{prod}(T_{ad}, P_f) \quad (5)$$

Adicionalmente, para calcular a temperatura de chama adiabática é necessário conhecer não somente todas as espécies produtos da reação de combustão analisada, como também a fração molar de cada uma. As frações molares são obtidas através do equilíbrio químico da mistura de produtos. Já em relação ao conhecimento das espécies em si, devido às altas temperaturas dos processos de combustão os produtos principais considerados somente de forma analítica pelo balanço estequiométrico podem não ser suficientemente representativos, e isso se deve ao efeito de dissociação das moléculas (TURNNS, 2013). Esse efeito permite que sob certas condições espécies normalmente consideradas como secundárias apresentem concentrações elevadas. Dito isso, muitas vezes a composição exata das espécies produtos é oriunda de um conhecimento prévio experimental.

Aplicada a conservação de energia através da primeira lei, também é necessário definir e estabelecer a condição de equilíbrio químico para a mistura de produtos da reação de combustão. Essa condição, que tem suas raízes na segunda lei da termodinâmica (TURNNS, 2013), permitirá a determinação das frações molares de todas as espécies produtos consideradas. A condição de equilíbrio é definida como a variação da função de Gibbs sendo nula para uma determinada pressão e temperatura, $dG_{mis} = 0$. Considerando somente gases ideais, para um sistema geral representado pela Eq. (6),



A equação final utilizada, Eq. (7), é:

$$-(e\bar{g}_{E,T}^\circ + f\bar{g}_{F,T}^\circ + \dots - a\bar{g}_{A,T}^\circ - b\bar{g}_{B,T}^\circ - \dots) = R_u T \ln \left\{ \frac{(P_E/P^\circ)^e \cdot (P_F/P^\circ)^f \cdot \text{etc}}{(P_A/P^\circ)^a \cdot (P_B/P^\circ)^b \cdot \text{etc}} \right\} \quad (7)$$

em que o termo entre parênteses no lado esquerdo é definido como a variação da função de Gibbs no estado padrão de referência, ΔG°_T , e o argumento do logaritmo representa a constante de equilíbrio K_p . Finalmente, a temperatura de chama adiabática é obtida resolvendo-se simultaneamente as Eqs. (4) ou (5) e (7), juntamente com a conservação atômica da reação.

2.4 Chamas laminares

O estudo da velocidade de chama laminar é muito importante dentro da combustão pois é o parâmetro que determina a estrutura de uma chama e também fornece a base para o entendimento de chamas turbulentas, além de determinar importantes características de estabilidade (TURNS, 2013). Dito isso, neste trabalho será dado foco em chamas laminares nas quais o combustível e o oxidante já se encontram pré-misturados, como é o caso de um bico de Bunsen. Turns (2013, p. 256) afirma que “[...] *Chama é uma propagação autossustentada, em velocidades subsônicas, de uma zona de combustão localizada*”. Pode-se pensar novamente no exemplo do bico de Bunsen para entender porque a sua chama é localizada, visto que ela ocorre em somente um ponto da mistura reagente (ao contrário de reatores), e autossustentada porque enquanto houver oxidante e combustível ela não é extinta sem alguma interferência externa. Outra definição de chama, Frimston (1962, p. 10) afirma que “[...] *Chamas são reações em fase gasosa que conseguem se propagar pelo espaço e são caracterizadas por interações fortes entre convecção, processos de transporte moleculares, e reações químicas*”.

Por outro lado, a velocidade em si pode ser entendida com o exemplo de um observador posicionado na chama de um queimador, que da sua perspectiva observaria os gases pré misturados se aproximando na sua direção com uma velocidade de chama S_L . É também interessante ressaltar que há uma aceleração significativa ao longo do escoamento da chama, visto que a massa específica dos gases queimados é aproximadamente 7 vezes menor que a dos gases não queimados (TURNS, 2013). Abaixo temos o conjunto de equações fundamentais utilizadas pelo *software* Cantera que resolvem e calculam a velocidade de chama laminar para um dado combustível, com seu respectivo mecanismo, e sujeito às condições iniciais de pressão e temperatura. Essas equações, (8) – (11) foram retiradas de Kee et al (2017) e utilizam uma solução de similaridade que reduz suas equações tridimensionais a somente uma.

$$\frac{\partial \rho u}{\partial z} + 2\rho V = 0 \quad \text{Continuidade} \quad (8)$$

$$\rho u \frac{\partial V}{\partial z} + \rho V^2 = -\Lambda + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial V}{\partial z} \right) \quad \text{Conservação de momento radial} \quad (9)$$

$$\rho c_p u \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \sum_k j_k c_{p,k} \frac{\partial T}{\partial z} - \sum_k h_k W_k \dot{\omega}_k \quad \text{Conservação de energia} \quad (10)$$

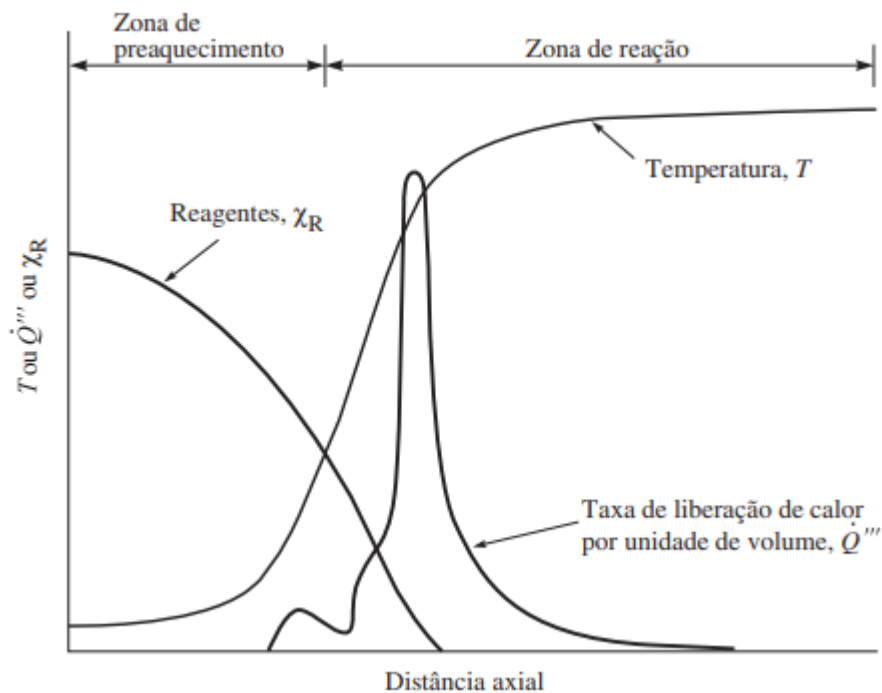
$$\rho u \frac{\partial Y_k}{\partial z} = - \frac{\partial j_k}{\partial z} + W_k \dot{\omega}_k \quad \text{Espécies} \quad (11)$$

Alternativamente, dependendo do tipo de análise, uma equação fechada e simplificada pode ser útil. A seguinte Eq. (12) retém a essência da cinética química necessária para avaliar a velocidade de chama laminar de forma qualitativa e entender o seu comportamento. As duas hipóteses simplificadoras mais relevantes para o uso desta equação são a consideração de um mecanismo global de uma etapa e a validade dos valores calculados somente no intervalo $\phi \leq 1$.

$$S_L = \left[-2\alpha(\mathbf{v} + \mathbf{1}) \frac{\bar{m}'''}{\rho_u} \right] \quad (12)$$

Outro aspecto essencial ao entendimento das chamas laminares é a distribuição de temperatura ao longo da mesma. Essa distribuição de temperatura se estende por basicamente duas regiões, uma zona de pré aquecimento e uma zona de reação. É na zona de reação que essencialmente a energia da combustão é liberada. Na Fig. 1, retirada de Friedman & Burke (1954), pode-se entender a separação das duas zonas e o papel que elas apresentam.

Figura 1 – Distribuição de temperatura em uma chama laminar



Analisando a figura 1 percebe-se que a zona de reação se inicia aproximadamente na região onde a concentração dos reagentes e a temperatura se cruzam, um pouco antes do aumento súbito e exponencial da taxa de liberação de calor. Como essa taxa se encontra concentrada em apenas uma pequena faixa da distância axial, a zona de reação ainda é dividida na zona de reações rápidas e na zona de reações lentas. A zona de reações rápidas, onde praticamente todo o calor é liberado, é composta pela propagação de radicais livres através de reações bimoleculares, enquanto que a zona de reações lentas é dominada por reações finalizadoras de cadeia através de reações de recombinação trimoleculares. Uma das etapas mais importantes dos mecanismos de cinética química de hidrocarbonetos e outros, a reação de oxidação do monóxido de carbono $\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$ é particularmente lenta e é um dos fatores que diferencia a combustão do gás natural e etanol em comparação com a do hidrogênio.

2.5 Tempo de retardo de ignição

O tempo de retardo de ignição (IDT) pode ser entendido como o tempo necessário para iniciar o processo de combustão de uma mistura combustível-oxidante, e é normalmente determinado de forma experimental. O dispositivo utilizado nos ensaios para a sua medição é o tubo de choque (MENDIBURU et al, 2022). Nestes experimentos de tubo de choque a volume ou pressão aproximadamente constantes, o IDT é definido como o intervalo de tempo entre o aquecimento inicial e a rápida formação de radicais livres e liberação de energia. Se voltarmos na Fig. 1, essa liberação de energia seria a que ocorre na fina região da zona de reações rápidas.

Relevante ao tempo de retardo de ignição também são algumas características singulares do processo de combustão de alguns combustíveis. De acordo com Westbrook & Dryer (1984), a oxidação do metano é um tanto quanto única pela dificuldade específica de oxidação do radical metil, CH_3 , e isso afeta diretamente o seu IDT. A dificuldade está na decomposição de CH_3 para obtenção de átomos H, onde a reação de CH_3 com oxigênio não simplesmente remove um átomo H e forma o radical HO_2 . Da perspectiva da cinética química, isso significa que a propagação em cadeia é dificultada pela falta de radicais livres para acompanhar a taxa de consumo de combustível. Portanto, reações de recombinação do radical metil para a oxidação do metano têm um papel significativamente maior do que em reações similares com outros combustíveis, e isso aumenta relativamente o seu tempo de retardo de ignição. Uma das formas observadas de diminuir o IDT do metano em ensaios de tubo de choque é através da adição de pequenas quantidades de hidrogênio, C_2H_6 ou C_3H_8 (WESTBROOK & DRYER, 1984). Abaixo temos as Eqs. (13) – (16) utilizadas pelo *software* Cantera para simular o tempo de retardo de ignição em um reator a volume constante. Salienta-se que, apesar do volume externo ser constante, há um movimento das paredes no seu interior.

$$\frac{dm}{dt} = \sum_{in} \dot{m}_{in} - \sum_{out} \dot{m}_{out} + \dot{m}_{wall} \quad \text{Variação de massa} \quad (13)$$

$$\frac{dV}{dt} = \sum_w f_w A_w v_w(t) \quad \text{Variação de volume no interior} \quad (14)$$

$$\frac{dU}{dt} = -p \frac{dV}{dt} + \dot{Q} + \sum_{in} \dot{m}_{in} h_{in} - h \sum_{out} \dot{m}_{out} \quad \text{Energia interna total} \quad (15)$$

$$m \frac{dY_k}{dt} = \sum_{in} \dot{m}_{in} (Y_{k,in} - Y_k) + \dot{m}_{k,gen} - Y_k \dot{m}_{wall} \quad \text{Espécies de fase homogênea} \quad (16)$$

| 3. METODOLOGIA

Primeiro escolheu-se os três combustíveis que seriam comparados: o etanol, o gás natural e o hidrogênio. Em seguida escolheu-se os três parâmetros da combustão que seriam simulados: a temperatura de chama adiabática, a velocidade de chama laminar e o tempo de retardo de ignição. É importante ressaltar que para a temperatura de chama adiabática e para a velocidade de chama laminar as simulações não consideram nenhuma linha de tempo, ou seja, a combustão está ocorrendo infinitamente sem ter passado por ignição. Para a velocidade de chama laminar e o tempo de retardo de ignição coletou-se alguns dados experimentais de trabalhos científicos para validar a acurácia das simulações. A composição do ar foi considerada como 21% O_2 e 79% N_2 , com os combustíveis e o ar sendo considerados como gases ideais. A

composição do gás natural utilizada foi baseada em Faramawy et al (2016) porém reformulada para conter somente hidrocarbonetos e com a ausência da espécie isobutano. Nota-se que as concentrações das espécies do gás natural normalmente se encontram dentro de uma faixa e apresentam variabilidade dependendo da fonte. Neste trabalho sua formulação química foi considerada como 87% CH₄ (metano) + 10% C₂H₆ (etano) + 3% C₃H₈ (propano). Todas as simulações foram realizadas considerando reações com 1 mol de combustível.

Os parâmetros escolhidos foram simulados com o *software* Cantera, na linguagem Python. O mesmo é público e bastante conhecido por resolver problemas de cinética química, termodinâmica e fenômenos de transporte. Em primeira instância seria utilizado, para cada parâmetro, um código base disponível abertamente na biblioteca oficial caso o mesmo fosse suficiente e satisfatório para resolver o problema de acordo com as diretrizes almeçadas. Dito isso, para a velocidade de chama laminar foi necessário modificar o código base disponível para que o mesmo conseguisse simular a S_L em função da razão de equivalência.

O próximo passo foi determinar os mecanismos de cinética química que seriam utilizados para caracterizar e simular o processo de combustão de cada combustível. Escolheu-se os mais atuais e respeitados dentro da comunidade científica que estavam disponíveis para o Cantera. Na Tab. 2 temos as informações essenciais a respeito de cada mecanismo.

Tab. 2 – Mecanismos de cinética química utilizados

	Mecanismo	Nº espécies	Nº reações
Etanol	<i>ethanol_mech - Marinov</i>	62	383
Gás natural	<i>GRI-Mech 3.0</i>	53	325
Hidrogênio	<i>San Diego 2016</i>	57	268

Em seguida definiu-se as variáveis dependentes e independentes para cada parâmetro simulado. As variáveis independentes que obrigatoriamente os três parâmetros simulados têm em comum e que foram declaradas em todas as simulações são:

- Combustível
 - Etanol – C₂H₅OH
 - Gás natural – 0.87 CH₄ + 0.1 C₂H₆ + 0.3 C₃H₈
 - Hidrogênio – H₂
- Mecanismo de cinética química
 - ethanol_mech
 - GRI-Mech 3.0
 - San Diego 2016
- Composição do ar (O₂ : 1 ; N₂ : 3,76)

Também tem-se as variáveis independentes específicas à simulação de cada parâmetro, o que é apresentado na Tab. 3.

Tab. 3 – Variáveis independentes específicas a cada parâmetro

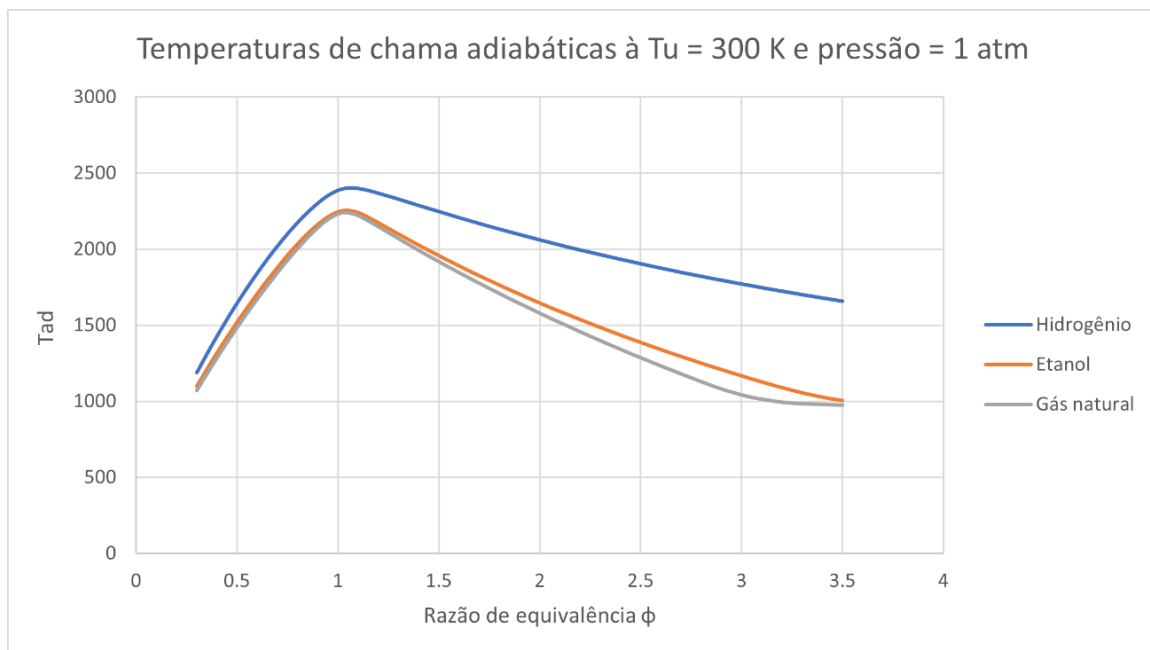
Variável dependente	Variáveis independentes	Considerações
T_{ad}	<ul style="list-style-type: none"> $T_u = 300$ K Pressão = 1 atm 	<ul style="list-style-type: none"> Sistema a pressão constante
S_L	<ul style="list-style-type: none"> $\Phi = [0.7, 0.8, \dots 2.5]$ Espessura de chama = 0,03 m 	<ul style="list-style-type: none"> Fluxo unidimensional Chama pré-misturada
IDT	<ul style="list-style-type: none"> IDT inicial = 0,05 s Pressão do reator (Pa) $T_{reator} = [800, 825 \dots 1250]$ K $\Phi = 1$ Espécie de referência: OH 	<ul style="list-style-type: none"> Reator adiabático Sistema a volume constante

4. RESULTADOS

4.1 Temperatura de chama adiabática

Na Fig. 2 encontra-se a variação da temperatura de chama adiabática em função da razão de equivalência Φ para os três combustíveis. A simulação foi realizada à pressão constante de 1 atm e temperatura inicial de 300 K.

Fig. 2 – Temperatura de chama adiabática (K) em função de Φ



Analisando o gráfico, considerando 1 mol de combustível reagindo com uma quantidade variável de ar, primeiro observamos que os três combustíveis atingem um máximo de temperatura de chama adiabática muito próximo do ponto de mistura estequiométrica ($\Phi \sim 1,05$). Em comparação com misturas pobres ($\Phi < 1$) isso se deve ao fato de que com uma mistura estequiométrica não há moléculas de oxigênio sobrando nos produtos da combustão e a quantidade de nitrogênio inerte a ser aquecido é mínima, com todo o oxigênio sendo utilizado pelas reações químicas e consequentemente liberando mais calor. Por outro lado, com misturas crescentemente ricas a partir do ponto estequiométrico há um déficit cada vez maior de oxidante (O_2) necessário para formar os produtos da combustão, diminuindo a quantidade de calor liberado. Observa-se também que a taxa em que a temperatura de chama adiabática aumenta ou

diminui em função de Φ dos dois lados do ponto estequiométrico é diferente, apresentando uma variação menor e uma curva mais suave no lado direito das misturas ricas. Isso se deve ao fato de que no intervalo $\Phi < 1$ o decréscimo de ambos o O_2 e N_2 ao aumentar a razão de equivalência contribuem no mesmo sentido de aumentar a temperatura de chama, enquanto que no intervalo $\Phi > 1$ o decréscimo de O_2 disponível atua no sentido de diminuí-la e o decréscimo de N_2 atua no sentido de aumentá-la. Com isso percebe-se que, de forma geral, a influência que prevalece sobre a temperatura de chama adiabática é a quantidade de oxidante puro O_2 necessária para as reações químicas da combustão ocorrerem e liberarem calor, com papel secundário da inércia térmica do nitrogênio não reativo. Porém, é interessante notar que o ponto de T_{ad} máxima não ocorre exatamente no ponto estequiométrico e sim para uma mistura levemente rica. Isso mostra que para o intervalo ($1 < \Phi < 1,05$) o comportamento é o contrário, o decréscimo da inércia térmica prevalece sobre o efeito do déficit de oxigênio. Outro ponto que deve ser mencionado é o fato da temperatura de chama do hidrogênio ser mais alta do que as do etanol e do gás natural em todo o espectro. Um dos grandes fatores contribuintes à isso é o fato do hidrogênio requerir menos ar para a sua combustão a qualquer razão de equivalência. Isso pode ser observado analisando as reações estequiométricas com composição simplificada para cada combustível, mostrando apenas os reagentes. F é a composição química do gás natural.

- $F + 2,24 (O_2 + 3,76 N_2) \rightarrow$
- $C_2H_5OH + 3 (O_2 + 3,76 N_2) \rightarrow$
- $H_2 + 0,5 (O_2 + 3,76 N_2) \rightarrow$

Observa-se que na estequiometria, $\Phi = 1$, o hidrogênio necessita de 4,48x menos de ar para a sua combustão do que o gás natural e 6x menos do que o etanol. Isso significa que o hidrogênio tem que aquecer essa mesma quantidade a menos de nitrogênio não reativo, sofrendo muito menos o efeito da inércia térmica e consequentemente possibilitando uma temperatura de chama mais elevada. Também nota-se que o hidrogênio apresenta uma taxa de redução de T_{ad} para $\Phi > 1,05$ menor em comparação com os outros dois combustíveis, ou seja, sua temperatura de chama é menos sensível à falta de oxidante ao aumentar a razão de equivalência. Isso pode ser explicado pela combustão do hidrogênio formar somente uma espécie química majoritária com oxigênio, H_2O , ao invés de ter que formar ambos H_2O e CO_2 para liberar calor. Ressalta-se a importância do termo “majoritária”, dado que todos os três combustíveis geram diversos outros produtos em maiores ou menores quantidades, que por sua vez ainda dissociam-se com as elevadas temperaturas da combustão. Como será visto, o comportamento da temperatura de chama adiabática tem um papel significativo na cinética química através das taxas das reações químicas, afetando diretamente a velocidade de chama laminar. Na Tab. 4 temos os valores simulados para a temperatura de chama e alguns valores teóricos retirados da literatura, todos para uma mistura estequiométrica $\Phi = 1$.

Tab. 4 Comparação de valores simulados e da literatura para a temperatura de chama

	T_{ad} simulado	Literatura	Autor
Etanol	2251,00 K	2236,29 K	Shuichi et al (1991)
Gás natural	2240,00 K	2210,15 K	Glassman et al (1987)
Hidrogênio	2394,00 K	2455,15 K	Glassman et al (1987)

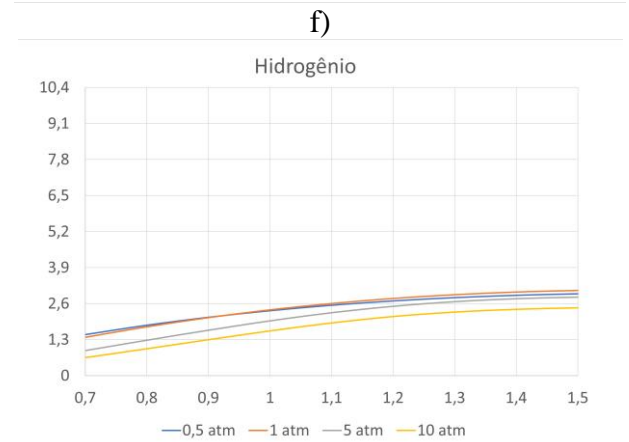
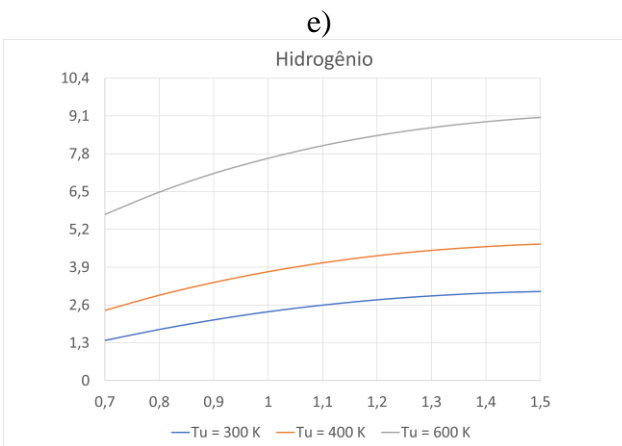
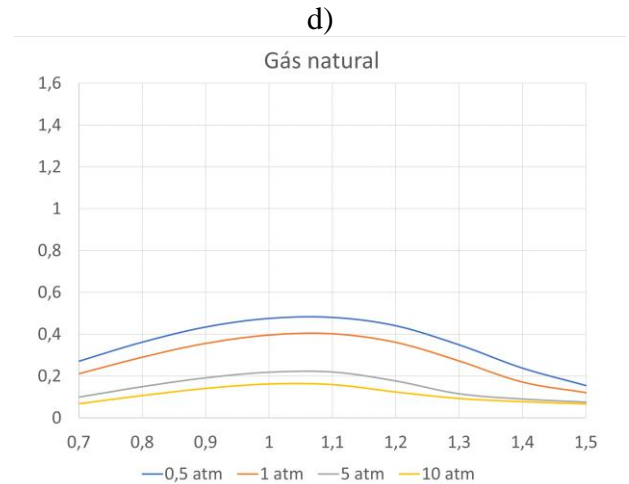
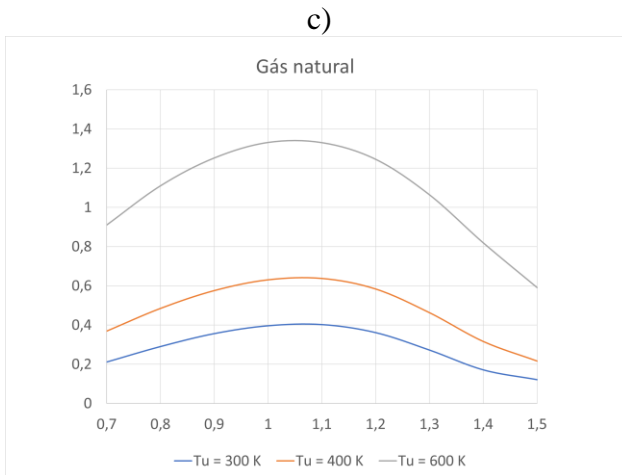
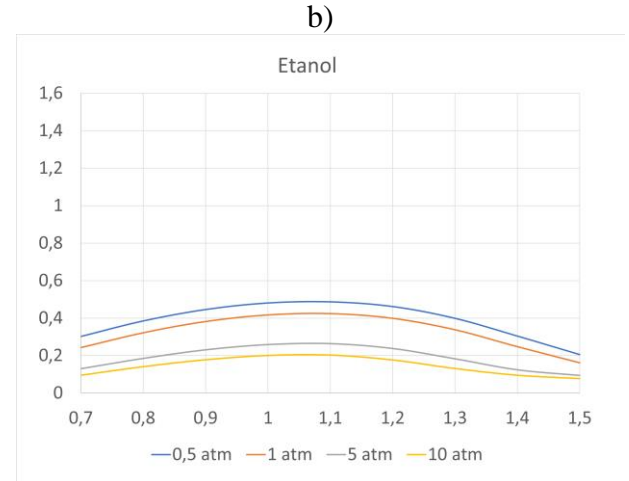
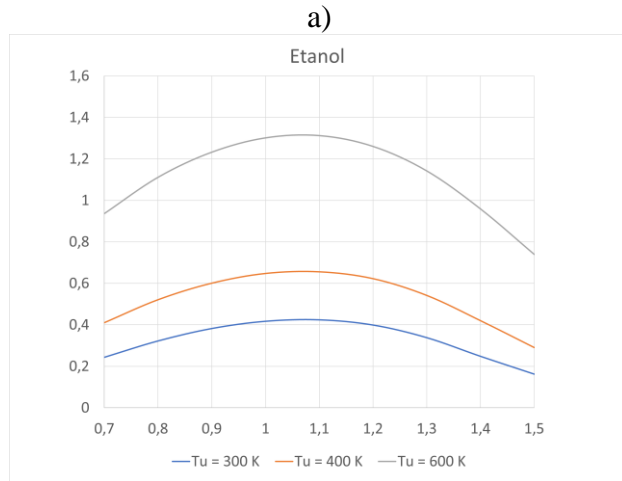
4.2 Velocidade de chama laminar

Na Fig. 3 encontra-se a variação da velocidade de chama laminar em função da razão de equivalência Φ para os três combustíveis.

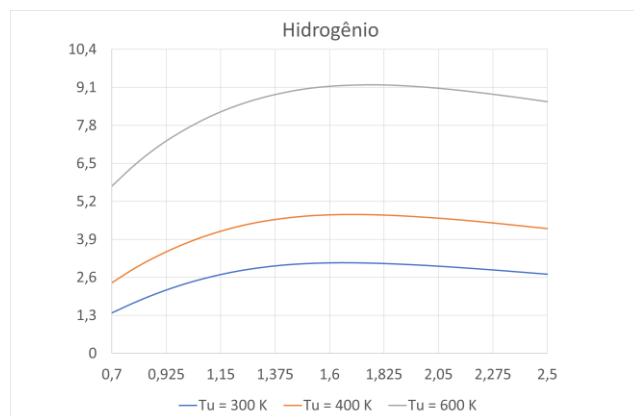
Fig. 3 – Velocidade de chama laminar em função de Φ para diferentes pressões e temperaturas

Velocidade de chama laminar (m/s) em função da razão de equivalência Φ para diferentes temperaturas iniciais à pressão de 1 atm

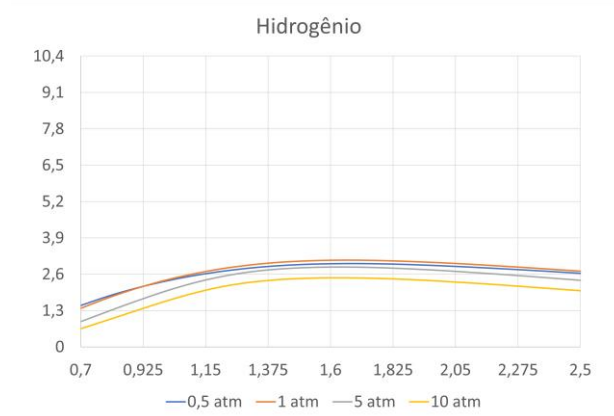
Velocidade de chama laminar (m/s) em função da razão de equivalência Φ para diferentes pressões à temperatura inicial de 300 K



g) *Intervalo aumentado



h) *Intervalo aumentado



Analisando os gráficos, observamos que para o mesmo combustível e uma razão de equivalência fixa, o aumento da temperatura inicial do processo gera uma influência exponencial na velocidade de chama laminar. Para os três combustíveis a uma razão de equivalência de 0,7, por exemplo, nota-se que suas velocidades de chama são multiplicadas por aproximadamente 4 quando suas temperaturas iniciais são dobradas. Isso pode ser explicado pela contribuição exponencial da temperatura no termo de taxa líquida de consumo de combustível, \bar{m}''' , através da forma empírica de Arrhenius, Eq. (3), para o coeficiente de taxa das reações. Por outro lado, essa mesma influência exponencial que a temperatura tem sobre a velocidade de chama laminar também explica porque a mesma varia em função da razão de equivalência Φ . Observa-se que para uma temperatura inicial fixa a velocidade de chama aumenta gradativamente partindo de uma mistura pobre, atinge um máximo e começa a decair. Nota-se que esse máximo de velocidade de chama para o etanol e o gás natural ocorrem muito próximos do ponto de mistura estequiométrica, $\Phi = 1,05$, o mesmo que ocorre com o máximo de suas temperaturas de chama adiabáticas, Fig. 2. Entretanto, observa-se que isso é diferente do que acontece com o hidrogênio, que possui seus máximos de velocidade e temperatura de chama defasados em relação à razão de equivalência ($\Phi = 1,7$ versus $\Phi = 1,05$ respectivamente). Para explicar isso, se repararmos novamente na Fig. 2 observa-se que a taxa de redução da temperatura de chama a partir de $\Phi > 1,05$ é substancialmente menor para o hidrogênio, apresentando uma curva mais suave do que para o gás natural e o etanol. Analisando a Eq. (3) e a Eq. (12), e sabendo que ao aumentar a razão de equivalência a partir de $\Phi > 1,05$ resulta em uma redução da temperatura de chama (T_{ad}), isso significa que a redução menos agressiva da T_{ad} do hidrogênio no intervalo $1,05 < \Phi < 1,7$ é o suficiente para fazer com que o efeito combinado dos termos de dependência da sua reação em relação à concentração de combustível e à concentração de oxidante, $(C_F)^n$ e $(C_{O_2})^m$ respectivamente, sobreponha o efeito da redução da temperatura de chama nesse intervalo, aumentando sua S_L até $\Phi = 1,7$. Isso pode ser verificado analisando os dados da Tab. 1, onde reparamos que a combustão do hidrogênio é muito mais sensível à variação de concentração de combustível em comparação com o gás natural e o etanol, e, ao contrário, muito menos sensível à variação de concentração de oxidante. Ambas estas sensibilidades do hidrogênio contribuem no mesmo sentido de um aumento superior de \bar{m}''' ao ir aumentando a razão de equivalência. Dito isso, apesar do hidrogênio apresentar um comportamento peculiar, o principal efeito da razão de equivalência sobre a velocidade de chama laminar se deve a como a primeira afeta a temperatura de chama do combustível, que por sua vez influencia na velocidade de chama através do termo de taxa líquida de consumo de combustível, \bar{m}''' . É interessante também observar que do ponto de vista estritamente da Eq. (12), ela sugeriria ao primeiro olhar através do termo $\nu + 1$ que o aumento

de Φ a partir de uma mistura pobre até uma mistura estequiométrica faria com que a velocidade de chama diminuísse, o oposto do que ocorre de fato. Isso mostra que o efeito que prevalece da razão de equivalência sobre a velocidade de chama laminar é o da cinética química agindo através das taxas das reações químicas.

Da perspectiva dos mecanismos de cinética química para cada combustível, a taxa de reação da combustão do hidrogênio é muito mais alta em comparação com o gás natural e o etanol. Isso é devido a dois motivos principais, o primeiro sendo a facilidade com que uma propagação em cadeia ocorre através da formação de radicais livres. Para o gás natural, por exemplo, a decomposição de CH_4 através de $\text{O} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{OH} + \text{CH}_3$ forma 1 radical livre, assim como para o etanol em $\text{O} + \text{C}_2\text{H}_5\text{OH} \rightarrow \text{OH} + \text{C}_2\text{H}_4\text{OH}$. Por outro lado, para o hidrogênio a cadeia é iniciada com a formação de 2 radicais livres através de somente uma etapa com $\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{HO}_2 + \text{H}$, acelerando significativamente o processo em cadeia. O outro motivo que diferencia a combustão do hidrogênio é a ausência da etapa relativamente lenta de oxidação do monóxido de carbono $\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$, que ambos o etanol e o gás natural necessitam para formarem seus produtos da combustão. De forma geral, da perspectiva da cinética química detalhada esses são os motivos principais que fazem a velocidade de chama laminar do hidrogênio ser significativamente mais alta.

Agora analisando somente o lado direito onde encontram-se os gráficos para uma temperatura inicial fixa e sujeito a diferentes pressões, percebe-se que, ao contrário para a variação da temperatura, a variação da pressão tem um efeito relativamente pequeno sobre a velocidade de chama laminar. Também nota-se que a velocidade de chama é inversamente proporcional à pressão. Ambos esses resultados também foram mostrados por (SAKHRIEH, 2019).

Na Tab. 5 temos a comparação de alguns valores próprios simulados com o Cantera em relação a dados experimentais, extraídos visualmente de forma aproximada de trabalhos científicos. Ambos os valores simulados e experimentais são correspondentes a uma pressão de 1 atm e razão de equivalência $\Phi = 1$. As temperaturas iniciais dos dados experimentais foram de 298 K para o etanol e 293 K para o hidrogênio e gás natural, enquanto que as das simulações foram todas a 300 K.

Tab. 5 – Comparação de S_L simulados e de dados experimentais

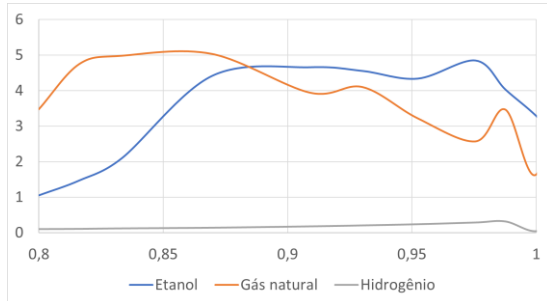
	Valor simulado de S_L	S_L experimental	Autor
Etanol	0,417 m/s	0,400 m/s	Egolfopoulos et al (1992)
Gás natural	0,396 m/s	0,350 m/s	Dong et al (2010)
Hidrogênio	2,372 m/s	2,200 m/s	Dong et al (2010)

4.3 Tempo de retardo de ignição

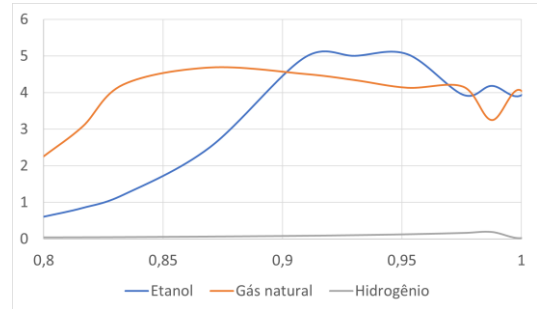
Na Fig. 4 encontra-se o tempo de retardo de ignição em função de $1000 / T$ (K) para os três combustíveis. A temperatura decresce na direção positiva do eixo x. Analisando os gráficos observa-se que para as pressões de 0,5, 1, e 4 atm, e uma temperatura de 1250 K ($x = 0,8$), os três combustíveis em ordem crescente de tempo de retardo de ignição são: hidrogênio, etanol e gás natural.

Fig. 4 – Tempo de retardo de ignição em *ms* em função de $1000 / T$ (K)Tempo de retardo de ignição em *ms* em função de $1000 / T$ (K)

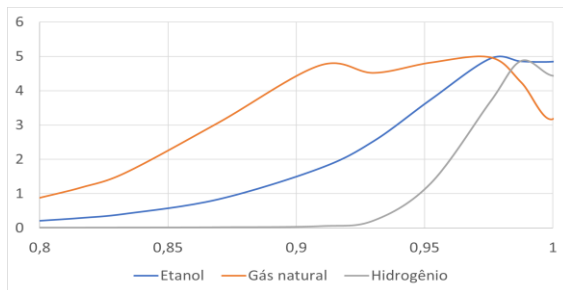
a) Pressão = 0,5 atm



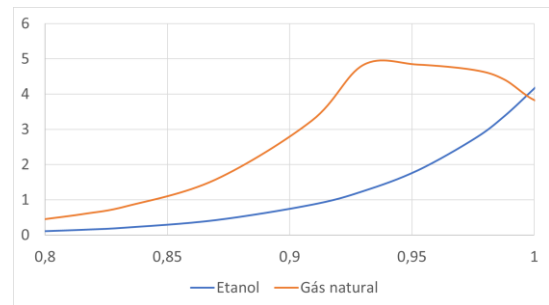
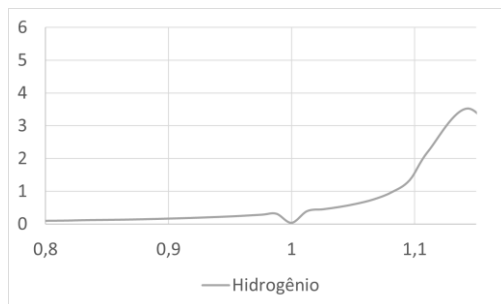
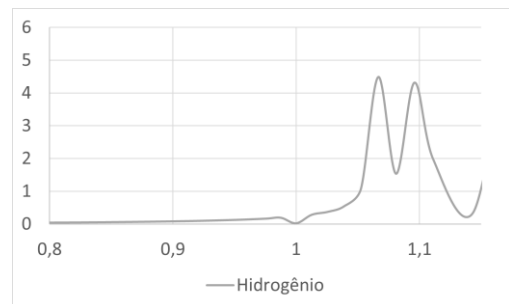
b) Pressão = 1 atm



c) Pressão = 4 atm



d) Pressão = 10 atm

e) Hidrogênio, pressão = 0,5 atm
Intervalo aumentado*f) Hidrogênio, pressão = 1 atm
Intervalo aumentado*

O fato do IDT do hidrogênio ser o mais baixo está novamente relacionado à sua facilidade superior de propagação de radicais livres através do seu mecanismo, como explicado anteriormente para a velocidade de chama laminar. Quanto maior e mais rápida a formação e propagação de radicais livres através das reações elementares, mais rapidamente a energia da combustão é liberada e menor é o tempo de retardo de ignição. Também nota-se que para as pressões de 0,5 e 1 atm o IDT do hidrogênio apresentou uma variação quase nula em comparação com os outros dois combustíveis e não convergiu para pressões acima de 4 atm. Devido a isso, adicionou-se os gráficos adicionais e) e f) para somente o hidrogênio, onde foi necessário alterar o limite superior do intervalo de 1 para 1,1 para conseguir mostrar o seu comportamento. Como pode ser visto, o hidrogênio só começa a apresentar uma variação expressiva do IDT para uma temperatura aproximadamente 90 K menor em comparação com o etanol e o gás natural, de 1000 K para 909 K. Ainda para temperaturas próximas de 1250 K ($x = 0,8$), nota-se que o IDT do gás natural é significativamente mais alto do que o do etanol.

De acordo com Westbrook & Dryer (1984) o metano, que constitui aproximadamente 90% do gás natural, é conhecido por possuir um tempo de retardo de ignição incomumente lento e isso se deve ao processo de oxidação do radical metil (CH_3), em que é bastante difícil a obtenção de átomos H adicionais através de sua decomposição. Ao contrário para a combustão do etanol, essa reação não tem grande importância e não afeta o seu IDT da mesma forma. Olhando os gráficos c) d) e) f), ainda nota-se que o tempo de retardo de ignição dos três combustíveis diminui ao aumentar a pressão, o que é esperado visto que isso aumenta a frequência de colisão das partículas, consequentemente facilitando a ocorrência e o desenvolvimento das reações químicas no processo em cadeia.

Agora analisando a variação do IDT em todo o intervalo, para as pressões de 0,5 e 1 atm nota-se que o comportamento apresentado não parece seguir algum padrão bem estabelecido, possivelmente indicando que a simulação não é precisa o suficiente para pressões tão baixas. Isso fica nítido ao reparar que ao ir aumentando a pressão o comportamento das curvas vai ficando mais homogêneo dentro do intervalo considerado. Dito isso, ainda consegue-se observar uma certa coerência na evolução do comportamento geral ao aumentar a pressão de 0,5 para 1 atm. Para as pressões de 4 e 10 atm o comportamento é o esperado, a diminuição da temperatura causa um aumento do tempo de retardo de ignição. Adicionalmente, o comportamento das curvas sugere que para o etanol e o gás natural o aumento da pressão reduz a taxa de variação do IDT no intervalo considerado, enquanto que para o hidrogênio é o contrário, o aumento da pressão antecipa o aumento abrupto do seu IDT para temperaturas cada vez mais altas e aumenta a porção aleatória do comportamento. O fato do IDT do hidrogênio não convergir para pressões acima de 4 atm e o seu comportamento apresentado sugerem que para pressões acima de 4 atm a temperatura máxima de 1250 K do intervalo não é alta o suficiente. Devido à dificuldade de obter dados experimentais para as composições e pressões baixas dos IDTs simulados, conseguiu-se somente uma, para o etanol. Drost et al relatou um IDT experimental de 0,240 ms para o etanol a 3,95 atm, 1219 K e $\Phi = 1$. Para a simulação, realizada a 4 atm, 1250 K e $\Phi = 1$ encontrou-se o IDT de 0,252 ms.

| 5. CONCLUSÃO

Este trabalho consistiu em realizar uma comparação entre o etanol, o gás natural e o hidrogênio frente aos três parâmetros de combustão escolhidos: a temperatura de chama adiabática, a velocidade de chama laminar e o tempo de retardo de ignição. Através de uma análise feita por simulações com o *software* Cantera, almejou-se entender os aspectos mais importantes do comportamento dos combustíveis e diferenciar as suas principais características frente aos parâmetros simulados. As variáveis independentes em comum para a simulação dos três parâmetros foram o combustível, o mecanismo de cinética química e a composição do ar. Para a temperatura de chama adiabática observou-se que, apesar da quantidade de O_2 ser o fator mais influente, a inércia térmica do nitrogênio não reativo presente na composição do ar tem influência significativa na T_{ad} e, consequentemente, nas taxas de reação dos combustíveis. Para a velocidade de chama laminar o ponto destaque foi o fato do hidrogênio, ao contrário dos outros dois combustíveis, apresentar um máximo de velocidade de chama defasado em Φ em relação ao máximo de sua temperatura de chama adiabática. O próprio comportamento da temperatura de chama, aliado às sensibilidades à variação de concentração de combustível e de oxidante ao aumentar a razão de equivalência, permitiram isso. Finalmente, o tempo de retardo de ignição foi o parâmetro simulado em que houve uma clara distinção entre os três combustíveis, com o IDT do gás natural sendo significativamente mais alto do que o do etanol devido à oxidação do radical metil e com o IDT do hidrogênio sendo o mais baixo como esperado. De forma geral, observou-se proximidade de comportamento e de valores para o etanol e o gás natural em relação à temperatura de chama adiabática e à velocidade de chama

laminar. O hidrogênio mostrou-se como o combustível atípico nos três parâmetros simulados. Da perspectiva da cinética química, o fator mais influente na diferenciação da combustão do hidrogênio em comparação com os outros dois combustíveis é a facilidade de propagação de radicais livres através do seu mecanismo, que é o principal contribuinte para a sua S_L ser a mais alta e o seu IDT ser o mais baixo. Como sugestão para um próximo trabalho seria recalcular os parâmetros escolhidos considerando reações de combustão com somente oxidante puro, O_2 , e analisar o impacto que tal consideração acarretaria nos resultados apresentados. Isso seria interessante visto que a não reatividade e inércia térmica do nitrogênio para as temperaturas e razões de equivalência consideradas tem um grande impacto no comportamento dos combustíveis.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

DONG, C.; ZHOU, Q.; ZHANG, X.; ZHAO, Q.; XU, T.; HUI, S. **Experimental study on the laminar flame speed of hydrogen/natural gas/air mixtures**. Xi'an: Higher Education Press and Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010.

DROST, S et al. **Experimental investigation of ethanol oxidation and development of a reduced reaction mechanism for a wide temperature range**. Karlsruhe: Institute of Technical Thermodynamics & Karlsruhe Institute of Technology (KIT).

EGOLFOPOULOS, F. N.; DU, D. X.; LAW, C. K. **A study on ethanol oxidation kinetics in laminar premixed flames, flow reactors, and shock tubes**. Symposium (International) on Combustion, vol. 24, issue 1, 1992.

FRIEDMAN, R.; BURKE, E. **Measurement of Temperature Distribution in a Low-Pressure Flat Flame**. Journal of Chemical Physics, 22: 824-830 (1954).

FRISTROM, R. M.; WESTENBERG, A. A. **Fundamental Processes and Laminar Flame Structure**. 1962.

GOODWIN, D. G.; MOFFAT, H. K.; SCHOEGL, I.; SPETH, R. L.; WEBER, B. W. *Cantera: An Object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes*. Disponível em: <https://www.cantera.org>, 2022. Version 2.6.0. doi:10.5281/zenodo.6387882

INTERNATIONAL ENERGY AGENCY (IEA). **World Energy Outlook 2020**. Paris, 2020. Disponível em: <https://www.iea.org/reports/world-energy-outlook-2020?mode=overview> Acesso em: 21 mar. 2023.

KEE, R. J.; COLTRIN M. E.; GLARBORG, P.; ZHU, H. **Chemically Reacting Flow: Theory and Practice**. 2nd ed. John Wiley and Sons, 2017.

MARINOV, N. M.; WESTBROOK, C. K.; PITZ, W. J. **Detailed and Global Chemical Kinetics Model for Hydrogen**. San Francisco: Lawrence Livermore National Laboratory, 1995.

MENDIBURU, A. Z et al. **Combustion characteristics and application in engines**. Elsevier Ltd, 2022

RENEWABLE FUELS ASSOCIATION (RFA). **Why is Ethanol Important?** Washington D.C, 2023. Disponível em: <https://ethanolrfa.org/ethanol-101/why-is-ethanol-important> Acesso em: 21 mar. 2023.

SAKHRIEH, A. **The adiabatic flame temperature and laminar flame speed of methane premixed flames at varying pressures**. American University of Ras Al Khaimah, 2019.

SARISKY-REED, V. **Ethanol vs. Petroleum-Based Fuel Carbon Emissions**. Washington D.C: Bioenergy Technologies Office, 2022. Disponível em: <https://www.energy.gov/eere/bioenergy/articles/ethanol-vs-petroleum-based-fuel-carbon-emissions#:~:text=The%20most%20recent%20DOE%20study,lower%20GHG%20emissions%20than%20gasoline>. Acesso em: 23 mar. 2023.

TURNS, S. R. **Introdução à Combustão: Conceitos e Aplicações**. 3rd ed. New York: AMGH Editora Ltda, 2013.

WESTBROOK, C. K.; DRYER, F. L.; **Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion**. Pergamon Press Ltd, 1984.