MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

ESTUDO TEÓRICO DA VELOCIDADE DE CHAMA PLANA LAMINAR ADIABÁTICA PARA COMPOSIÇÕES REPRESENTATIVAS DE GASES POBRES

por

Marcos Bassani Rech

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, Dezembro de 2011

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Escola de Engenharia
Departamento de Engenharia Mecânica

ESTUDO TEÓRICO DA VELOCIDADE DE CHAMA PLANA LAMINAR ADIABÁTICA PARA COMPOSIÇÕES REPRESENTATIVAS DE GASES POBRES

por

Marcos Bassani Rech

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 DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

Prof.: Arnaldo Ruben Gonzalez
Coordenador do Curso de Engenharia Mecânica

Área de Concentração: **Ciências Térmicas**

Orientador: Prof. Fernando Marcelo Pereira

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Bardo Bodmann

Prof. Dr. Paulo Otto Beyer

Prof. Sergio Luiz Frey

Porto Alegre, Dezembro de 2011.

Dedico este trabalho aos meus pais e irmãos
pelo incentivo constante para nunca desistir, à UFRGS
pela oportunidade inigualável de estudo e, aos amigos,
em especial à Letícia Jenisch Rodrigues, pelo apoio
e amizade constantes nos bons e maus momentos.

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos - Alfabeto arábico	Unidade
A - Fator pré-exponencial de Ahrrenius	$[depende\ da\ ordem\ da\ reação]$
A_i - Espécie química hipotética *i*	$[-]$
A_n - Área normal à direção de propagação de chama	$[m^2]$
c_p- Calor específico à pressão constante	$[J/(kg.K)]$
D_i^M - Coeficiente de difusão médio	$[kg/(m.s)]$
D_{ij} - Coeficiente de difusão binário	$[kg/(m.s)]$
E_A - Energia de ativação	$[J]$
h - Altura de uma placa perfurada	$[m]$
h_i - Entalpia específica	$[J/kg]$
k – Constante da reação	$[depende\ da\ ordem\ da\ reação]$
k_f - Constante da reação no sentido direto da reação	$[depende\ da\ ordem\ da\ reação]$
k_r - Constante da reação no sentido reverso da reação	$[depende\ da\ ordem\ da\ reação]$
$\dot{m}$ - Vazão mássica dos reagentes	$[kg/s]$
$\dot{m}''$ - Vazão mássica dos reagentes por unidade de área	$[kg/(m^2 s)]$
na - Número de moles de ar	$[mol]$
na_s - Número de moles de ar em uma mistura estequiométrica	$[mol]$
PCI - Poder Calorífico Inferior	$[MJ/kg]$
PCI_i - Poder Calorífico Inferior da espécie combustível *i*	$[MJ/kg]$
p - Pressão	$[atm]$
p_0 - Pressão dos reagentes	$[atm]$
p_{ref} - Pressão de referência (1atm)	$[atm]$
$\dot{q}''$ - Fluxo de calor	$[W/m^2]$
r - Raio de uma placa perfurada	$[m]$
R_u - Constante universal dos gases (8314 J/kmol.K)	$[J/(kmol.K)]$
SL - Velocidade de chama plana laminar adiabática	$[m/s]$
T - Temperatura	$[K]$
$\bar{T}$ - Temperatura média	$[K]$
T_{ad} - Temperatura de chama adiabática	$[K]$
T_c - Temperatura no centro de uma placa perfurada	$[K]$
T_f- Temperatura Final	$[K]$
T_{ig}- Temperatura de Ignição	$[K]$
T_p - Temperatura de uma placa perfurada	$[K]$
T_0- Temperatura Inicial	$[K]$
T_{ref} - Temperatura inicial de referência (298 K)	$[K]$
u_g - Velocidade dos gases da mistura reagente	$[m/s]$
$u_{g,0}$ - Velocidade dos gases da mistura reagente em T_0	$[m/s]$
$\vec{v}$ - Vetor velocidade nas equações de conservação	$[m/s]$
V_i - Velocidade de difusão da espécie química *i*	$[m/s]$
W_{FU} - Massa molar do combustível	$[kg/kmol]$
W_i - Massa molar da espécie *i*	$[kg/kmol]$
X_i - Fração molar da espécie *i*	$[-]$
Y_i - Fração mássica da espécie *i*	$[-]$
Y_{FU} – Fração mássica do combustível	$[-]$

Símbolos - Alfabeto grego	Unidade
α - Parâmetro experimental do método do fluxo de calor	$[K/m^2]$
α_P - Expoente da pressão em correlação empírica	$[-]$
α_T - Expoente da temperatura em correlação empírica	$[-]$
α_0 - Difusividade térmica da mistura	$[m^2/s]$
β - Expoente da temperatura no cálculo de k_f	$[-]$
δ_r - Espessura da zona de reação	$[m]$
Φ - Razão de equivalência	$[-]$
λ- Condutividade térmica	$[W/(m.K)]$
ν_i' - Coeficiente estequiométrico do reagente *i*	$[-]$
ν_i'' - Coeficiente estequiométrico do produto *i*	$[-]$
ρ – Massa específica	$[kg/m^3]$
ρ_0 - Massa específica inicial	$[kg/m^3]$
$\dot{\omega}_{FU}$ - Taxa de reação do combustível	$[kmol/(m^3\ s)]$
$\dot{\omega}_i$ - Taxa de reação da espécie *i*	$[kmol/(m^3\ s)]$

RECH, M. B. **Estudo Teórico da Velocidade de Chama Plana Laminar Adiabática Para Composições Representativas de Gases Pobres**. 2011. 17 páginas. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2011.

RESUMO

O presente trabalho apresenta a solução computacional, unidimensional, para a velocidade de chama plana laminar adiabática para misturas combustíveis, representativas de gases pobres. Para tal, utilizou-se o *software* comercial CHEMKIN, versão 4.0, aplicando cinética química detalhada em conjunto com a solução numérica das equações de conservação. É assumido que a pressão é constante e a transferência de calor por radiação é desprezível. As simulações foram realizadas para dois valores específicos de poder calorífico inferior, determinados a partir da composição do combustível formado por misturas de metano, hidrogênio, oxigênio, nitrogênio, monóxido de carbono e dióxido de carbono. Foi abrangida uma faixa de razão de equivalência entre o limite inferior de inflamabilidade até misturas levemente ricas. A simulação também foi usada para encontrar uma composição de gás que tivesse um comportamento similar ao gás de menor poder calorífico inferior. Os resultados encontrados são de boa concordância com resultados experimentais e computacionais encontrados na literatura

PALAVRAS-CHAVE: Velocidade de chama, gases de baixo poder calorífico, simulação numérica.

RECH, M. B. **Theorical Study of the Plane Laminar Adiabatic Flame Speed to Lean Composition Gases**. 2011. 18 páginas. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2011.

ABSTRACT

This work presents the computing solution, for one dimension, to the plane laminar adiabatic flame speed for combustible mixtures, representable to lean gases. For this purpose, CHEMKIN 4.0 commercial software was used, applying detailed chemical kinetic together to the numerical solution of the conservation equations. Also, is assumed that the pressure is constant, the radiation heat transfer are despicable. The simulations were realized for two values of Lower Heat Value, determined from the fuel composition formed by Methane, Hydrogen, Oxygen, Nitrogen, Carbon Monoxide and Carbon Dioxide mixtures. Was included a band to the equivalence ratio between the lower flamability limit until little bit rich mixtures. The simulations were used also to find a gas composition that had a similar behavior to the Lower Heat Value gas. The found results are in good agreement with experimental and computing results found in the literature.

KEYWORDS: Flame speed, low heating value gases, numerical simulations.

ÍNDICE

Pág.

1. INTRODUÇÃO 1
2. OBJETIVO 1
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA 1
4. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA 3
4.1. Equações de Conservação 3
4.2. Cálculo computacional da velocidade de chama 5
4.3. Análise aproximada da velocidade de chama 5
5. METODOLOGIA 8
6. RESULTADOS E DISCUSSÃO 11
6.1 Análise do gás de 5 MJ/kg 11
6.2 Análise do gás de 15 MJ/kg 12
6.3. Estudo de composição alternativa de 5 MJ/kg 13
7. CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS 14
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 15
APÊNDICE I – O método do fluxo de calor 16

1. INTRODUÇÃO

Em uma época onde a preocupação com as fontes de energia e o seu impacto sobre o meio ambiente cresce diariamente, a pesquisa e o desenvolvimento de combustíveis sustentáveis protagonizam o cenário da matriz energética mundial. Uma das alternativas mais concretas para a energia renovável é o aproveitamento daquilo que antes era simplesmente rejeitado como dejetos animais, resíduo sólido urbano, restos de alimentos e restos de vegetais. A decomposição anaeróbica destes elementos gera um gás, conhecido como biogás, cujo componente combustível de principal interesse é o metano, que é também o principal constituinte do gás natural. Além do metano, existem outros gases presentes no biogás, tais como hidrogênio, nitrogênio, oxigênio, dióxido de carbono e monóxido de carbono, que influenciam no processo de combustão do biogás.

O biogás se enquadra em um grupo de gases conhecidos como gases pobres, justamente porque a concentração de metano varia de 1% até 60%. Outras fontes de gases pobres, além das já citadas são a gaseificação de biomassa, a síntese de carvão mineral, a coqueria, a biodigestão de lodo de esgoto entre outras. Embora o poder calorífico destes gases seja relativamente baixo devido às baixas e médias concentrações de metano, a energia que os mesmos oferecem não pode ser desprezada.

Utilizando-se gases pobres como combustível, evita-se a emissão de metano diretamente na atmosfera, que, conforme Wuebbles e Hayhoe, 2002, tem um impacto muito mais danoso ao meio ambiente quando comparado ao CO_2. Porém, para uma correta utilização destes gases para a geração de energia, por exemplo, é necessário o conhecimento de suas propriedades e de seu comportamento quando o mesmo é utilizado em processos de combustão.

Neste contexto, uma das principais características de um combustível, é a sua velocidade de chama. Esta propriedade é um parâmetro fundamental para que se inicie um projeto de um queimador ou de uma câmara de combustão. Uma das possíveis abordagens para a determinação da velocidade de chama é a solução numérica das equações de conservação para uma chama plana laminar adiabática pré-misturada empregando cinética química detalhada. Como a solução destas equações é de grande complexidade, é comum o uso de ferramentas computacionais dedicadas, como os *softwares* CHEMKIN (http://www.sandia.gov/chemkin/) e CANTERA (http://sourceforge.net/projects/cantera/).

2. OBJETIVO

O objetivo do presente trabalho é a determinação da velocidade de chama plana laminar adiabática de gases pobres em ampla faixa de condições iniciais. A solução numérica das equações de conservação para a combustão pré-misturada é desenvolvida no *software* comercial CHEMKIN, versão 4.0, utilizando cinética química detalhada. A escolha das espécies presentes nos gases estudados é baseada em composições típicas de gases provenientes de aterro sanitário, gaseificação de biomassa e decomposição de matéria orgânica. Os resultados obtidos serão futuramente utilizados para a construção de uma bancada experimental para a medição de chama plana laminar adiabática, através do método do fluxo de calor.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Conforme apresentado em Coelho e Costa, 2007, existem dois tipos de chamas mais comuns que são: as chamas de pré misturadas e as chamas de difusão. As chamas pré misturadas, por exemplo, chamas em um queimador de Bunsen, são aquelas onde o combustível e o oxidante são misturados antes de alcançarem a zona de reação. Em chamas de difusão, por exemplo, a combustão de uma vela, o combustível e o oxidante estão inicialmente separados e a reação química ocorre na interface entre o combustível e o oxidante sendo que a combustão e a mistura ocorrem simultaneamente. Neste trabalho, o estudo da velocidade de chama é desenvolvido para as chamas pré-misturadas.

A frente de chama é definida como a região do espaço em que se observam intensos gradientes de temperatura e composição devido à reação química, conforme mostrado na figura 3.1, abaixo.

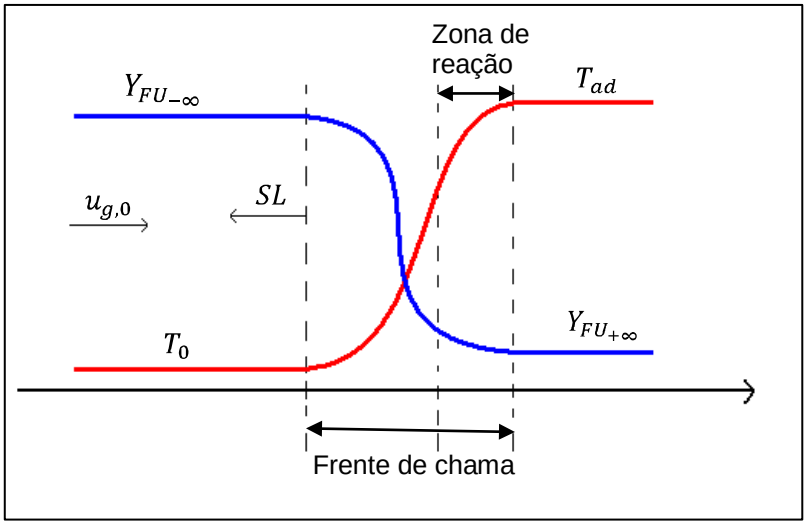

Figura 3.1: Esquematização da frente de chama e região onde ocorre a reação

Na figura, SL é a velocidade de chama, T_{ad} é a temperatura adiabática de chama, T_0 é a temperatura inicial dos reagentes, $u_{g,0}$ é a velocidade dos reagentes na temperatura T_0 e Y_{FU} é a fração mássica do combustível.

A velocidade de chama é a velocidade de propagação da frente de chama em relação à mistura não queimada (Turns, 2000, Glassman, 1997, Poinsot e Veynante, 2005). Em uma chama estacionária, a velocidade de chama é igual à velocidade da mistura não queimada ($SL = u_{g,0}$). A velocidade de chama é uma propriedade da mistura ar-combustível que depende da temperatura, pressão, curvatura e estiramento da chama. A velocidade de chama plana laminar adiabática é aquela onde não há influência da curvatura e estiramento de chama, onde a transferência de calor por radiação a partir da chama é desprezível e onde o escoamento a montante da chama é laminar.

A razão de equivalência de uma mistura combustível pode ser calculada pela equação 3.1 abaixo

$$\Phi = na_s/na \tag{3.1}$$

onde na é o número de moles de ar na mistura, na_s é o numero de moles de ar em uma mistura estequiométrica e Φ é a razão de equivalência. Para uma mistura estequiométrica a razão de equivalência vale um. Para misturas pobres, a razão de equivalência é menor do que um e para misturas ricas a razão de equivalência é maior do que um.

Conforme consta em Coelho e Costa, 2007, Andrews e Bradley, 1972, mediram a velocidade de chama plana laminar adiabática para misturas estequiométricas de metano, varrendo uma faixa de temperatura de 300 K a 600 K (a 1atm). Com os resultados obtidos chegaram a seguinte correlação empírica para a velocidade de chama, apresentada na equação 3.2 abaixo.

$$SL = (10 + 3{,}71 \times 10^{-4} T_0^2)/100 \tag{3.2}$$

Ainda em Coelho e Costa, 2007, Metghalchi e Keck, 1982, realizaram a medição da velocidade de chama para diversos combustíveis, varrendo uma vasta gama de temperatura

e pressões. Com os resultados obtidos chegaram a seguinte correlação para a velocidade de chama plana laminar, apresentada na equação 3.3 abaixo

$$SL = SL_{ref}\left(\frac{T_0}{T_{ref}}\right)^{\alpha_T}\left(\frac{p_0}{p_{ref}}\right)^{\alpha_p} \tag{3.3}$$

onde SL_{ref} é a velocidade de chama de referência para cada combustível, T_{ref} é a temperatura de referência (298 K), p_{ref} é a pressão atmosférica, p_0 é a pressão dos reagentes e os expoentes α_p e α_T são referentes às condições de pressão e temperatura, respectivamente. Para chamas estequiométricas pré-misturadas de metano SL_{ref} vale 0,36 m/s, α_p vale -0,374 e α_T vale 1,612.

De Goey e Bosschaart, 2004, realizaram um experimento de medição de velocidade de chama, utilizando o método do fluxo de calor, para uma série de hidrocarbonetos, varrendo uma ampla faixa de razões de equivalência. Os resultados encontrados para temperatura de 298K e pressão atmosférica foram da ordem de 0,36 m/s, com imprecisão de cerca de 0,01 m/s.

Coelho e Costa, 2007, apontam a velocidade de chama para a mistura estequiométrica de metano em ar como sendo da ordem de 0,410 m/s.

Coppens et al., 2007, mediram a velocidade de chama plana laminar para misturas de metano e hidrogênio em ar, utilizando também o método do fluxo de calor, variando o teor de hidrogênio de 0 a 35%. Para uma mistura estequiométrica de 75% de metano e 25% de hidrogênio em ar, os resultados para condições de temperatura e pressão padrão são da ordem de 0,42 m/s. Junto ao experimento, também foi realizada modelagem computacional utilizando o *software* CHEMKIN II, para o qual os valores encontrados, para as mesmas condições iniciais do experimento, são da ordem de 0,465 m/s.

Bougrine et al., 2011, realizaram a modelagem computacional da velocidade de chama plana laminar, utilizando o mecanismo GRI MECH 3.0, para misturas de metano e hidrogênio e condições padrão de temperatura e pressão. Para uma proporção de 40% de hidrogênio na mistura combustível, com razão de equivalência um, foi encontrado o valor de 0,52 m/s.

4. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A formulação matemática do problema da combustão baseia-se nas equações de conservação de massa, conservação de massa das espécies químicas, conservação da quantidade de movimento e conservação da energia. Essas equações são revisadas na seção que segue na sua forma unidimensional e em regime permanente. Em seguida, a obtenção numérica da velocidade de chama plana laminar é revisada.

4.1. Equações de Conservação

A equação de conservação da massa total é expressa pela equação 4.1 abaixo

$$\frac{d\rho u_g}{dx} = 0 \tag{4.1}$$

onde ρ é massa específica. A integração desta equação resulta na equação 4.2, abaixo

$$\rho_0 SL = \dot{m}'' = cte \tag{4.2}$$

onde $\dot{m}''$ é a vazão mássica por unidade de área e ρ_0 é a massa específica inicial.

Assumindo válida a Lei de Fick, a equação de conservação da massa de uma espécie química *i* é dada pela equação 4.3 abaixo

$$\rho u \frac{dY_i}{dx} = \frac{d}{dx}\left(\rho D_i^M \frac{dY_i}{dx}\right) + W_i \dot{\omega}_i \tag{4.3}$$

onde D_i^M é o coeficiente de difusão mássico da espécie *i* na mistura, W_i é a massa molar da espécie *i*, Y_i é a fração mássica da espécie *i* e $\dot{\omega}_i$ é a taxa de reação molar da espécie *i*. A expressão para o cálculo do coeficiente de difusão mássico da espécie *i* na mistura (D_i^M) é representada pela equação 4.4 abaixo (aproximação de Hirschfelder e Curtis, CHEMKIN *Theory Manual*, 2004)

$$D_i^M = \frac{1 - Y_i}{\sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^{N_S} \frac{X_j}{D_{ij}}} \tag{4.4}$$

onde D_{ij} é o coeficiente de difusão binário, N_S é o número de espécies químicas, X_j é a fração molar da espécie *j*. D_{ij} pode ser determinado por expressões algébricas obtidas da teoria cinética dos gases (Turns, 2000, apêndice D).

Sendo considerada a reação genérica expressa em 4.5, abaixo

$$\sum_{j=1}^{N_R} \nu'_{ij} A_i \rightleftharpoons \sum_{j=1}^{N_R} \nu''_{ij} A_i \tag{4.5}$$

onde A_i é uma espécie química hipotética, N_R é o números de reações e ν'_{ij} e ν''_{ij} são os coeficientes estequiométricos dos reagentes e dos produtos, respectivamente, segundo Turns, 2000, a taxa de reação, $\dot{\omega}_i$, na equação 4.3, é calculada pela equação 4.6 abaixo

$$\dot{\omega}_i = \sum_{j=1}^{N_R} \left(\nu''_{ij} - \nu'_{ij}\right) \left[k_{fj} \prod_{i=1}^{N_S} (A_i)^{\nu'_{ij}} - k_{rj} \prod_{i=1}^{N_S} (A_i)^{\nu''_{ij}} \right] \tag{4.6}$$

onde k_{fj} é a constante da reação para o sentido direto da reação *j* e k_{rj} é a constante da reação para o sentido reverso da reação *j*. A constante de uma reação, k, é calculada pela equação 4.7 abaixo (expressão de Arrhenius estendida)

$$k = AT^{\beta} EXP\left(-\frac{E_A}{R_u T}\right) \tag{4.7}$$

onde A é o fator pré-exponencial de Ahrrenius, E_A é a energia de ativação da reação, R_u é a constante universal dos gases, T é a temperatura e β é o expoente da temperatura. Os parâmetros da equação 4.7 para as reações consideradas são listados no arquivo que descreve o mecanismo cinético empregado.

Em chamas laminares a queda de pressão através da chama é desprezível e a equação da conservação da quantidade de movimento não se faz necessária.

A equação de conservação da energia, assumindo que a transferência de calor por radiação é desprezível, pode ser calculada pela equação 4.8 abaixo

$$\rho u c_p \frac{dT}{dx} = \frac{d}{dx}\left(\frac{\lambda}{c_p}\frac{dT}{dx}\right) + \sum_{i=1}^{N_S} \rho Y_i V_i c_{pi} \frac{dT}{dx} + \sum_{i=1}^{N_S} \frac{h_i W_i \dot{\omega}_i}{c_p} \tag{4.8}$$

onde c_p é o calor específico à pressão constante, h_i é a entalpia específica da espécie química *i* e λ é a condutividade térmica. O termo V_i é a velocidade de difusão da espécie química *i* na reação e é calculada pela equação 4.9 abaixo

$$V_i = -\frac{D_i^M}{Y_i}\frac{dY_i}{dx} \tag{4.9}$$

Assumindo que a chama se encontra na origem do sistema de coordenadas, em torno do qual a solução do problema é desenvolvida, o intervalo de solução do sistema de equações para uma chama plana laminar se estende de $-\infty$ até $+\infty$. Para $x \to -\infty$, as condições de contorno são as seguintes: $T = T_0$; $Y_i = Y_0$ e $\partial T/\partial x = \partial Y_i/\partial x = 0$. Para $x \to +\infty$, tem-se que $T = T_{ad}$ e $\partial T/\partial x = \partial Y_i/\partial x = 0$. Todas as condições são válidas para qualquer espécie química *i*.

4.2. Cálculo computacional da velocidade de chama

A velocidade da chama pode ser obtida da integração equação de conservação da massa do combustível (Eq. 4.3). A integração dessa equação submetida às condições de contorno apresentadas resulta na equação 4.10 abaixo

$$SL = \frac{1}{\rho(Y_{FU(x=+\infty)} - Y_{FU(x=-\infty)})} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_{FU} dx \tag{4.10}$$

onde $\dot{\omega}_{FU}$ é a taxa de reação do combustível. O termo de integração é o somatório das taxas de reação na malha de solução. Para manter a chama estacionária, o valor da vazão mássica de entrada no domínio é corrigido fazendo-se $u_g = SL$

Para resolver a taxa de reação química para todas as espécies envolvidas, o *software* utiliza o mecanismo de reação GRI MECH 3.0 (http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/). Esta é a versão mais atualizada do mecanismo GRI MECH, contendo 53 espécies químicas e 325 reações elementares, além das reações de formação de NOx.

4.3. Análise aproximada da velocidade de chama

Mallard e Le Châtelier, em 1883, postularam que a chama é constituída por uma zona de pré aquecimento e uma zona de reação, separadas por uma interface onde ocorre a ignição da mistura, conforme pode ser visto na figura 4.1 abaixo

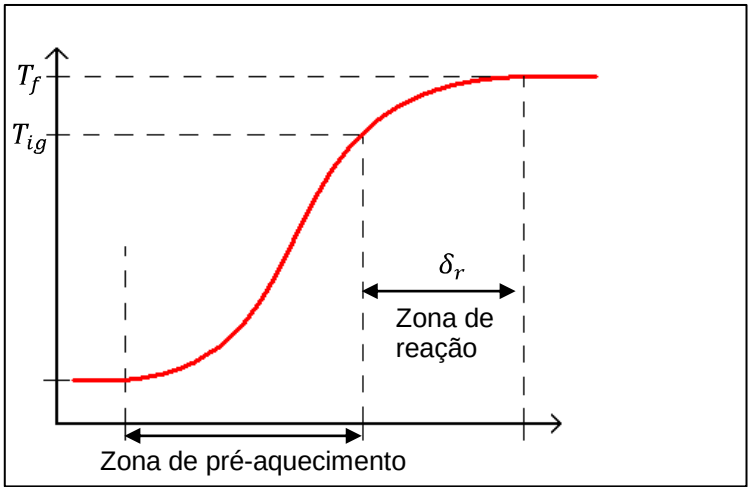

Figura 4.1: Zonas presentes em uma chama

onde T_f é a temperatura final dos produtos da reação (igual à temperatura de chama adiabática), T_{ig} é a temperatura de ignição dos reagentes e δ_r é a espessura da zona de reação.

De acordo com essa teoria, o calor transmitido por condução da zona de reação para a zona de pré aquecimento é igual ao requerido para elevar a temperatura dos reagentes até a temperatura de ignição, que constitui a fronteira entre duas zonas. Considerando que o perfil de temperaturas é aproximadamente linear na zona de reação, pode-se fazer um balanço aproximado da energia na fronteira entre as duas zonas pela equação 4.11, abaixo

$$\dot{m}c_p\left(T_{ig} - T_0\right) = \lambda \frac{\left(T_f - T_{ig}\right)}{\delta_r} A_n \tag{4.11}$$

onde A_n é a área normal à direção de propagação da chama e $\dot{m}$ é a vazão mássica dos reagentes. Sabendo que a vazão mássica dos reagentes é proporcional ao produto entre a massa específica inicial dos mesmos, ρ_0, à velocidade de propagação da chama e também à área normal A_n e levando isto à equação 4.12, resulta a equação 4.13 abaixo.

$$SL = \frac{\lambda}{\rho_0 c_p} \frac{\left(T_f - T_{ig}\right)}{\left(T_{ig} - T_0\right)} \frac{1}{\delta_r} \tag{4.12}$$

A vazão mássica dos reagentes é relacionada com a taxa de reação média na zona de reação pela equação 4.13 abaixo

$$\dot{m} = \rho_0 A_n SL = \left(-\frac{\dot{\omega}_{FU} W_{FU}}{Y_{FU}}\right) A_n \delta_r \tag{4.13}$$

onde W_{FU} é a massa molar do combustível. Isolando δ_r nesta equação e substituindo na equação 4.12, chega-se à equação 4.14, abaixo, para a velocidade de chama plana laminar adiabática

$$SL = \sqrt{-\frac{\lambda}{\rho_0 c_p} \frac{\left(T_f - T_{ig}\right)}{\left(T_{ig} - T_0\right)} \frac{\frac{\dot{\omega}_{FU} W_{FU}}{Y_{FU}}}{\rho_0}} \propto \sqrt{-\frac{\alpha_0 \frac{\dot{\omega}_{FU} W_{FU}}{Y_{FU}}}{\rho_0}} \tag{4.14}$$

onde α_0 é a difusividade térmica da mistura reagente.

Conforme pode ser observado na equação acima, a velocidade de chama é proporcional à raiz quadrada da difusividade térmica e da taxa de reação. Uma limitação importante desta teoria é a temperatura de ignição dos reagentes, cujo valor depende das condições nas quais o experimento é realizado.

Ainda, conforme consta em Coelho e Costa, 2007, Zeldovich et al., 1941, propuseram também uma teoria para a velocidade de propagação de chama. Assim como na teoria anteriormente apresentada, esta também considera que a chama seja dividida em duas zonas. Porém, leva em conta a difusão das espécies químicas sem levar em conta a difusão de radicais e seus efeitos. Outra consideração importante desta teoria é que a temperatura de ignição é considerada muito próxima da temperatura adiabática de chama (aproximação de energia de ativação elevada) sendo que a taxa de reação é calculada nesta temperatura. Considerando propriedades termofísicas constantes e condições padrão de temperatura e pressão, Zeldovich et al chegaram à equação 4.15 abaixo para velocidade de chama plana laminar.

$$SL = \sqrt{-\frac{2\alpha_0 \frac{\overline{\dot{\omega}_{FU} W_{FU}}}{Y_{FU}}}{\rho_0}} \tag{4.15}$$

onde o produto $\overline{\dot{\omega}_{FU} W_{FU}}$ é a taxa de reação média do combustível.

Assim como na teoria de Mallard e Le Châtelier, esta também mostra que a velocidade de chama é proporcional à difusividade térmica dos reagentes. A diferença é que nesta teoria é utilizado um valor de taxa de reação médio para temperaturas próximas à temperatura de chama adiabática. Mallard e Le Châtelier não especificaram um valor de temperatura para este cálculo. Ambas as teorias não permitem calcular valores precisos para a velocidade de chama porém permitem uma análise qualitativa dos fatores que influenciam em SL.

O principal efeito da temperatura sobre a velocidade de chama é na taxa de reação, dado o fato que uma temperatura inicial elevada resulta em uma temperatura final elevada. Como pode ser observado na equação 4.7, à medida que a temperatura final da chama aumenta, o termo exponencial desta equação torna-se dominante, fazendo aumentar a constante da reação.

O efeito da pressão é bem menor que a da temperatura. Conforme consta em Turns, 2000, uma correlação empírica que mostra a influência da pressão na velocidade de chama plana laminar adiabática para o metano está expressa na equação 4.16, abaixo

$$SL = [43 \times (p)^{-0,5}]/100 \tag{4.16}$$

onde p é a pressão.

A razão de equivalência influencia na temperatura da chama conforme a figura 4.2 abaixo, adaptada de Glassman, 1997. Conforme pode ser observado na figura abaixo, as maiores temperaturas de chama ocorrem para valores de razão de equivalência próximos ao estequiométrico (Φ = 1) e, para este caso, os valores de velocidade de chama serão máximos.

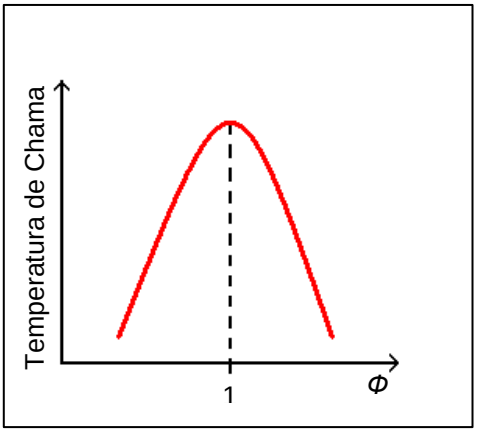

Figura 4.2: Dependência da temperatura de chama com a razão de equivalência

A temperatura cai para chamas mais pobres porque a mistura é progressivamente diluída em ar. Já para misturas mais ricas a temperatura cai porque não há oxigênio suficiente para queimar todo o combustível da mistura.

5. METODOLOGIA

Para a realização deste trabalho, primeiramente procura-se determinar quais as composições representativas de gases pobres serão escolhidas para as simulações. Para isto, realiza-se então uma pesquisa bibliográfica por composições típicas de gases provenientes de aterros sanitários, biodigestores de matéria orgânica (alimentos e excrementos animais), centrais de tratamento de lodo de esgoto, gaseificação de biomassa, etc.

De posse destes dados é montada uma tabela com a composição e a origem dos gases, observando-se quais constituintes podem ter mais influência nos resultados. Cada gás tem seu poder calorífico inferior calculado, utilizando-se para isto a equação 5.1 abaixo

$$PCI = \sum_{i=1}^{N} Y_i PCI_i \tag{5.1}$$

onde PCI é o poder calorífico inferior e PCI_i é o poder calorífico inferior de cada espécie combustível da mistura. A tabela 5.1 abaixo apresenta os gases avaliados neste estudo.

Tabela 5.1: Gases considerados no estudo (% em volume)

	ORIGEM DO BIOGÁS						
Espécies Presentes	Biomassa (leito fluid. com ar)	Biomassa (contracorrente com ar)	Biomassa (concorrente com ar)	Biomassa (concorrente com O2)	Aterro Sanitário (RSU)	Planta Agrícola de Biogás	Digestor de Lodo de Esgoto
CH_4	7	3	1	2	47–57	55–58	61–65
CO_2	20	9	13	15	37–41	37–38	36–38
O_2					<1	<1	<1
N_2	50	53	48	3	<1 - 17	<1 - 2	<2
H_2	9	11	17	32			
H_2O							
H_2S					36 - 115 ppm	32 - 169 ppm	b.d
CO	14	24	21	48			
Benzeno [mg/m^3]					0.6–2.3	0.7–1.3	0.1–0.3
Tolueno [mg/m^3]					1.7–5.1	0.2–0.7	2.8–11.8
NH_3							
Tad [K]	1484	1861	1811	2227	2070	2097	2114
PCI [MJ/kg]	4,1916	4,518	4,247	10,487	14,861	17,011	18,803
Ref.	[3]	[3]	[3]	[3]	[11]	[11]	[11]

A partir dos resultados encontrados, escolheu-se duas composições, de baixo e médio poder calorífico inferior, da ordem de 5 MJ/kg e 15 MJ/kg, para seguir na avaliação da sua velocidade de chama. Benzeno, Tolueno, compostos de Enxofre e Amônia não foram considerados no estudo devido à complexidade que acarretariam na simulação.

No entanto, antes de se iniciarem os estudos para os gases escolhidos, é necessário realizar a validação do método numérico utilizado. Para isto, são realizadas simulações para a combustão de metano em ar e para a combustão de misturas de hidrogênio e metano em ar, com condições de temperatura de 298 K e pressão de 1atm, varrendo-se razão de equivalência de Φ igual a 1,2 até o limite inferior de inflamabilidade, que é a mistura mais pobre em que a reação se sustenta. É então construída a curva de velocidade de chama em função da razão de equivalência. Os resultados para combustão de metano em ar e para misturas de metano e hidrogênio em ar são apresentados, respectivamente, nas figura 5.1 e 5.2 abaixo, sendo comparados com resultados experimentais extraídos de De Goey e Bosschaart, 2004, e Coppens et al., 2007.

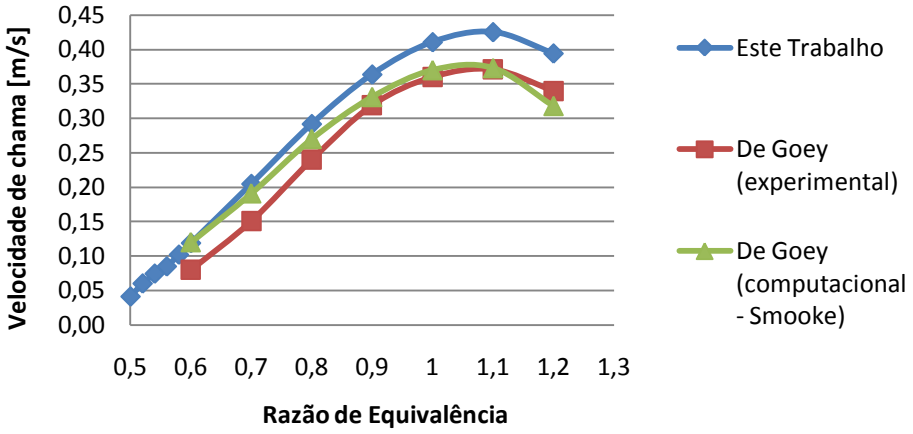

Figura 5.1: Velocidade de chama plana laminar adiabática para misturas de metano em ar a 298 K e 1atm

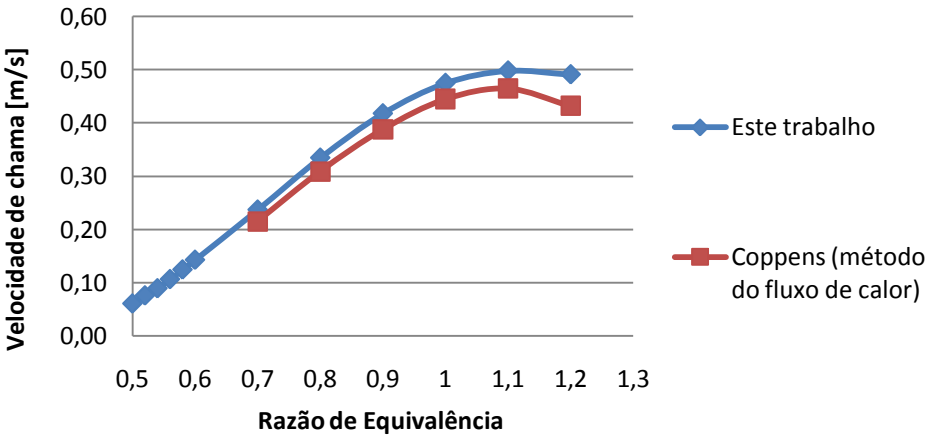

Figura 5.2: Velocidade de chama plana laminar adiabática para misturas de metano e hidrogênio em ar a 298 K e 1atm

Os deste trabalho apresentam boa concordância ao serem comparados com resultados mais antigos. No entanto, apresentam cerca de 15% de diferença em relação a resultados experimentais mais recentes. Isto pode ser devido ao fato de o mecanismo de reação empregado ser construído tomando como base resultados experimentais mais antigos. Tendo em mente que resultados experimentais dependem muito de cada condição de ensaio, o método numérico utilizado é considerado válido para os propósitos desse estudo.

Parte-se então para o estudo da velocidade de chama para os gases escolhidos. Como condições de temperatura e pressão, utilizam-se valores de condições padrão de temperatura e pressão e valores para situações com misturas pré aquecidas e sob pressão. Estes valores foram combinados entre si, resultando nas condições iniciais apresentadas na tabela 5.2 abaixo. A condição 1 é a condição de combustão atmosférica, já a condição 4 simula a combustão em uma turbina a gás. As condições 2 e 3 são condições intermediárias.

Tabela 5.2: Combinação de condições iniciais utilizadas

Condição	Condições iniciais	
	Pressão [atm]	Temperatura [K]
1	1	298
2	1	540
3	8	298
4	8	540

Para cada condição, foi varrida uma faixa de razão de equivalência de 1,2 até o limite inferior de inflamabilidade. Considera-se que este limite é atingido quando o *software* não encontra mais solução para o problema após o intervalo de Φ ser subdividido em passos menores. As quatro condições iniciais apresentadas são aplicadas a cada uma das misturas de gases selecionadas, analisando-se ponto a ponto cada razão de equivalência.

Como estudo adicional é realizada mais uma seqüência de simulações para pressão atmosférica e temperatura de 298 K, para uma mistura de poder calorífico inferior de cerca de 5 MJ/kg semelhante ao de um dos gases estudados, para averiguar se com uma mistura de dois combustíveis (Metano e Hidrogênio) diluídos em CO_2 é possível obter-se resultados semelhantes aos do gás de menor poder calorífico.

6. RESULTADOS E DISCUSSÃO

6.1. Análise do gás de 5 MJ/kg

Para o caso de gás de baixo poder calorífico inferior, da ordem de 5 MJ/kg, foi utilizada a seguinte composição: 3% de CH_4, 9% de CO_2, 53% de N_2, 11% de H_2 e 24% de CO. Este gás é oriundo da gaseificação de biomassa em contracorrente com ar, apresentado em Carvalho, 2010.

Este caso foi simulado sob as quatro condições iniciais apresentadas na tabela 5.2. Os resultados para cada uma das quatro condições estão apresentados na figura 6.1 abaixo.

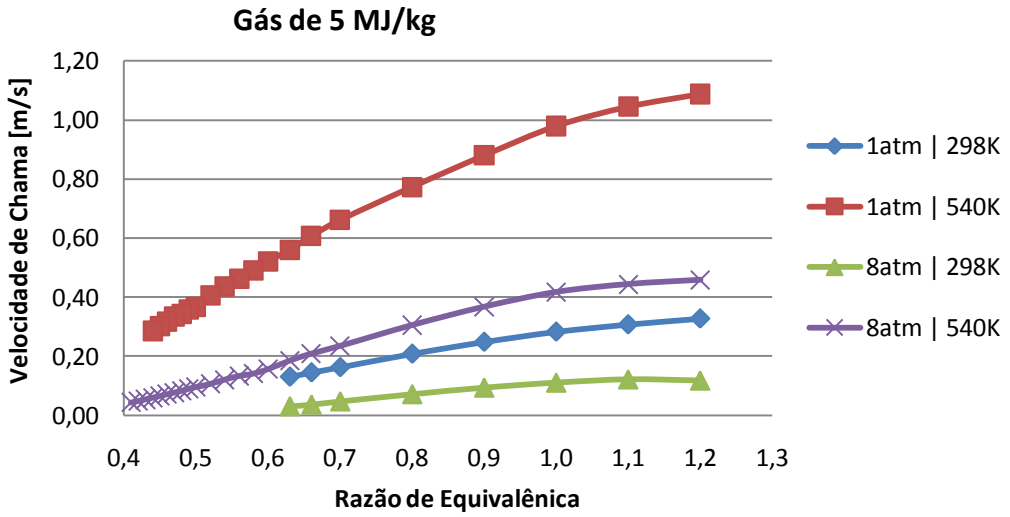

Figura 6.1: Velocidade de chama plana laminar adiabática para cada condição simulada; *PCI* ≈ 5 MJ/kg

Analisando a condição 1 (pressão de 1atm e temperatura inicial de 298 K), é possível notar que, mesmo com o baixíssimo teor de metano na mistura combustível, o gás apresentou velocidades de chama comparáveis com misturas levemente pobres de metano puro em ar. Isto se deve, à presença de hidrogênio no combustível. Segundo consta em Coelho, 2007, o hidrogênio possui difusividade térmica superior à dos hidrocarbonetos, bem como uma maior taxa de reação. Como foi visto anteriormente, estes fatores têm influência direta na velocidade de propagação de chama.

Para a condição 2, (pressão de 1atm e temperatura inicial de 540 K), o aumento no valor da velocidade de chama em relação ao caso 1 já era esperado devido ao aumento da taxa de reação da mistura, causado pela maior temperatura inicial. A influência da temperatura em SL também pode ser constatada na equação 3.2. É interessante observar também que o

limite inferior de inflamabilidade fica menor com o aumento da temperatura inicial. Isto se deve ao fato de a mistura ter energia para promover a auto-sustentação da chama em razões de equivalência de mistura pobre.

Fazendo agora a análise da condição 3 (pressão de 8atm e temperatura inicial de 298 K), é observada uma redução brusca na velocidade de chama com relação aos casos anteriores. Isto já era esperado pela análise das correlações empíricas apresentadas nas equações 3.3 e 4.17. Aqui o limite inferior de inflamabilidade ficou menor devido ao aumento das reações de terminação causado pelo aumento da pressão.

Para a condição 4 (pressão de 8atm e temperatura inicial de 540 K), observa-se que o valor de SL aumenta em relação ao primeiro caso. Isso mostra a predominância da influência da temperatura inicial em relação à pressão. Ainda pode ser observado que, em relação à condição 1, 2 e 3, o limite inferior de inflamabilidade é menor, ou seja, a reação se sustenta para misturas mais pobres.

6.2. Análise do gás de 15 MJ/kg

Para o gás de médio poder calorífico inferior, da ordem de 15 MJ/kg, foi utilizada a seguinte composição: 52% de CH_4, 39% de CO_2, 1% de O_2 e 8% de N_2. Este gás é típico de aterros sanitários para resíduo sólido urbano, sendo que esta composição foi extraída de Raisi, 2007.

Assim como no caso anterior, este gás foi simulado sob as quatro condições iniciais apresentadas na tabela 5.2. Os resultados para cada uma das quatro condições estão apresentados na figura 6.2 abaixo.

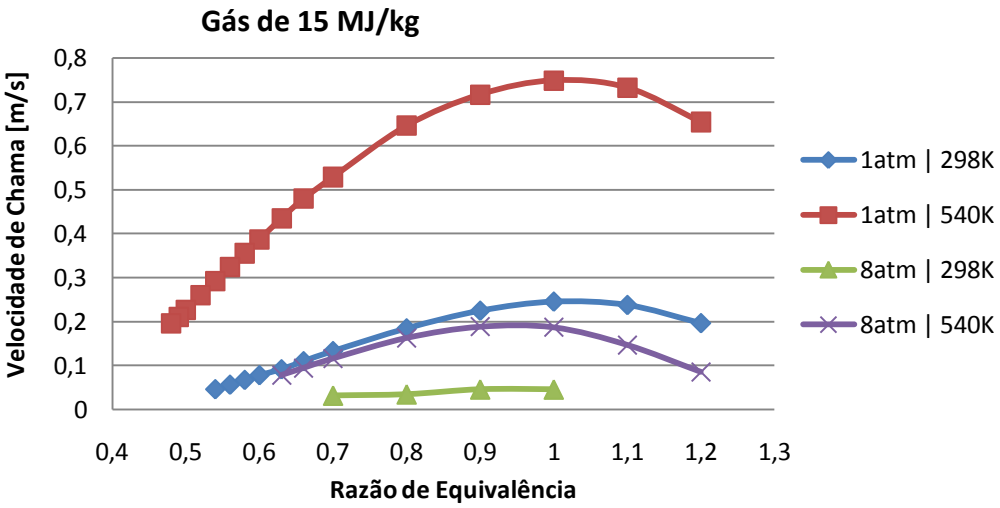

Figura 6.2: Velocidade de chama plana laminar adiabática para cada condição simulada; *PCI* ≈ 15 MJ/kg

Analisando a condição 1 (pressão de 1atm e temperatura inicial de 298 K), observa-se que os valores de velocidade de chama são menores, se comparados com a mesma condição para o gás de menor poder calorífico inferior, mesmo o segundo tendo um teor de metano mais de 17 vezes maior do que o primeiro. Isto se deve à presença de dióxido de carbono na mistura combustível, que, conforme consta em Coelho e Costa, 2007, não permite temperaturas finais elevadas, diminuindo, assim, as taxas de reação.

Para a condição 2, (pressão de 1atm e temperatura inicial de 540 K), a velocidade de chama da mistura aumentou, como já era esperado devido ao aumento da taxa de reação com o aumento da temperatura inicial. É interessante observar também que o limite inferior de inflamabilidade foi mais uma vez reduzido, pelo mesmo motivo que o caso 2 para o gás de menor poder calorífico.

A análise dos resultados para a condição 3 (pressão de 8atm e temperatura inicial de 298 K), observa-se a diminuição da velocidade de chama. A grande diminuição de SL pode ter ocorrido, mais uma vez, pelo grande teor de CO_2 presente na mistura. É interessante observar também que, para esta condição inicial, ocorreu um estreitamento da faixa de inflamabilidade da mistura com relação aos casos anteriores. O motivo pelo qual isto ocorre é o mesmo que no caso 3 para o gás de menor poder calorífico.

Analisando a condição 4 (pressão de 8atm e temperatura inicial de 540 K), a temperatura inicial aumentou o valor de SL em relação à condição 3 de simulação deste gás. Porém, em relação à condição a 1, para este gás, a velocidade de chama é menor. Isto pode ser devido, mais uma vez, ao grande teor de dióxido de carbono presente nesta mistura que não permite temperaturas finais elevadas.

Como última análise geral dos dois gases simulados, é interessante observar que os valores máximos de SL para o primeiro caso ocorrem em misturas levemente ricas, enquanto que, para o segundo caso, os máximos ocorrem para misturas estequiométricas ou levemente pobres. Isto pode ser devido à presença de hidrogênio no primeiro caso estudado. Segundo Coelho, 2007, a máxima velocidade de chama do hidrogênio ocorre para uma razão de equivalência de 1,8 (mistura bastante rica), tendendo, assim, a deslocar o ponto de SL máxima para a direita do gráfico de SL *versus* Φ.

6.3. Estudo de composição alternativa de 5 MJ/kg

Conforme citado anteriormente, foi simulado ainda um último caso, com poder calorífico inferior baixo, da ordem de 5MJ/kg, para que fosse feita uma avaliação da possibilidade de se utilizar uma mistura de gases preparada em laboratório para representar o comportamento de um gás oriundo de decomposição de matéria orgânica, ou gaseificação de biomassa. Utilizando o método de tentativa e erro, chegou-se a seguinte composição : 4,0% de CH_4, 57,0% de CO_2 e 39,0% de H_2. Esta composição foi escolhida para que se obtivesse um valor de poder calorífico semelhante a um dos casos estudados. As condições utilizadas foram de pressão de 1atm e temperatura inicial de 298 K. O resultado para este caso é apresentado na figura 6.3 abaixo.

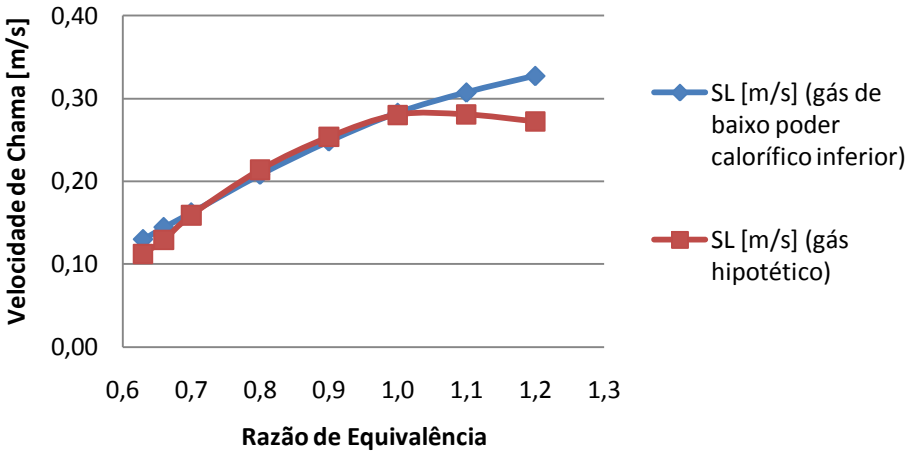

Figura 6.3: Gás hipotético (composição alternativa) comparado com o gás de menor poder calorífico inferior; *PCI* ≈ 5 MJ/kg

Aqui é interessante observar que, para a faixa de razão de equivalência $0{,}7<\Phi<1{,}0$ o comportamento de ambos os gases é bastante similar, o que permite concluir que, para esta mesma faixa de razão de equivalência e temperatura inicial de 298 K, este gás pode caracterizar satisfatoriamente um gás de poder calorífico inferior da ordem de 5 MJ/kg

7. CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Tendo sido realizados todos os estudos propostos neste trabalho, ao final do mesmo pode se concluir que, conforme era esperado pelas equações e correlações empíricas apresentadas, o aumento da temperatura inicial da mistura reagente causa um aumento na taxa de reação da mesma, o que aumenta a velocidade de chama. Conclui-se ainda que um aumento de pressão influi fortemente a velocidade de chama de maneira à diminuí-la, o que também está de acordo com as correlações empíricas apresentadas.

Quanto aos efeitos da composição, pode-se concluir que, mesmo com baixos teores de metano, uma mistura que apresenta hidrogênio pode ter sua velocidade de chama aumentada, devido à maior taxa de reação deste elemento. Ainda, a presença de hidrogênio tende a deslocar o ponto de máxima velocidade de chama para valores mais elevados de razão de equivalência. Foi possível ainda, encontrar uma composição alternativa, que pode ser reproduzida em laboratório e que reproduz satisfatoriamente, para uma faixa de razão de equivalência entre 1,0 e 0,7 e temperatura inicial de 298 K, o comportamento de um gás de poder calorífico inferior da ordem de 5 MJ/kg.

Não é escopo deste trabalho realizar análise de limite inferior ou de inflamabilidade das misturas estudadas mas, como foi observado, estes limites são afetados pela composição, pressão e temperatura inicial da mistura. Fica então como sugestão para trabalhos futuros a análise da presença de inertes em misturas combustíveis nos limites de inflamabilidade de misturas combustíveis, sob diversas condições iniciais. Caso uma análise deste tipo seja realizada utilizando-se o *software* que foi ferramenta de trabalho do presente estudo, sugere-se ainda estudos da formação de NOx, uma vez que, como foi citado anteriormente, o mecanismo de reação GRI MECH 3.0 inclui as reações de formação destes compostos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] Bougrine, S., Richard, S., Nicolle, A., Veynante, D., "**Numerical Study of laminar flame properties of diluted methane-hydrogen-air flames at high pressure and temperature using detailed chemistry**", International Journal of Hydrogen Energy, vol. 36, pp. 12035 – 12047, 2011.

[2] CANTERA, http://sourceforge.net/projects/cantera/. Acessado em 20/08/2011.

[3] Carvalho, S. H. V; "**Geração de energia elétrica a partir de gaseificação de biomassa**", Projeto de Pesquisa, Universidade Federal de Alagoas, 2010.

[4] CHEMKIN, http://www.sandia.gov/chemkin/. Acessado em 20/08/2011.

[5] CHEMKIN, "**Theory Manual**", capítulo 2, 2004. http://www.sandia.gov/chemkin/. Acessado em 20/08/2011.

[6] Coelho, Pedro; Costa, Mario, "**Combustão**", Lisboa, 1ª Edição, Edições Orion, capítulos 4 e 7, 2007.

[7] Coppens, F. H. V., Ruyck, J. De, Konnov, A. A., "**The effects of composition on burning velocity and nitric oxide formation in laminar premixed flames of CH4 + H2 + O2 + N2**", Combustion and Flame, vol. 149, pp. 409 – 417, 2007.

[8] De Goey, L. P. H., Bosschaart,K. J., "**The laminar burning velocity of flames propagating in mixtures of hydrocarbons anda air measured with the heat flux metod**", Combustion and Flame, vol. 136, pp. 261 – 269, 2004.

[9] Glassman, I., "**Combustion**", 3ª Edição, capítulos 1 e 4, 1997.

[10] Poinsot, T., Veynante, D., "**Theoritical and Numerical Combustion**", 2ª Edição, Ed. Edwards, capítulo 2, 2005.

[11] Rasi, S., Veijanen, A., Rintala, J., "**Trace compounds of biogas from different biogas production plants**", Energy, vol. 32, pp. 1375 – 1380, 2007.

[12] Smith, G. P., Golden, D. M., Frenklach, M., Moriarty, N. W., Eitenner, B., Goldenberg, M., Bowman, C. T., Hanson, R. K., Song, S., Gardiner Jr., C., Lissianski, V. V., Qin, Z., "**GRI-Mech 3.0**", disponível em http:// www.me.berkeley.edu/gri_mech/. Acessado em 10/09/2011.

[13] Turns, Stephen R., "**An Introduction to Combustion**", New York, 2° Edição, Editora McGraw Hill, capítulo 8 e apêndice D, 2000.

[14] Wuebbles, D. J., Hayhoe, K., "**Atmospheric methane and global change**", Earth-Science Reviews, vol. 57, pp. 177 – 210, 2002

APÊNDICE I – O método do fluxo de calor

O método de medição de velocidade de chama plana laminar adiabática através do método do fluxo de calor que se pretende construir utilizando os resultados deste trabalho é uma variação do método do queimador de chama plana. Este último é considerado um método bastante preciso, porém não é aplicável à chamas com velocidade de propagação superior à 0,15 m/s. Para velocidades maiores, como é o caso da maioria dos hidrocarbonetos "puros", é necessário um dispositivo conforme o esquematizado na figura A I.1 abaixo.

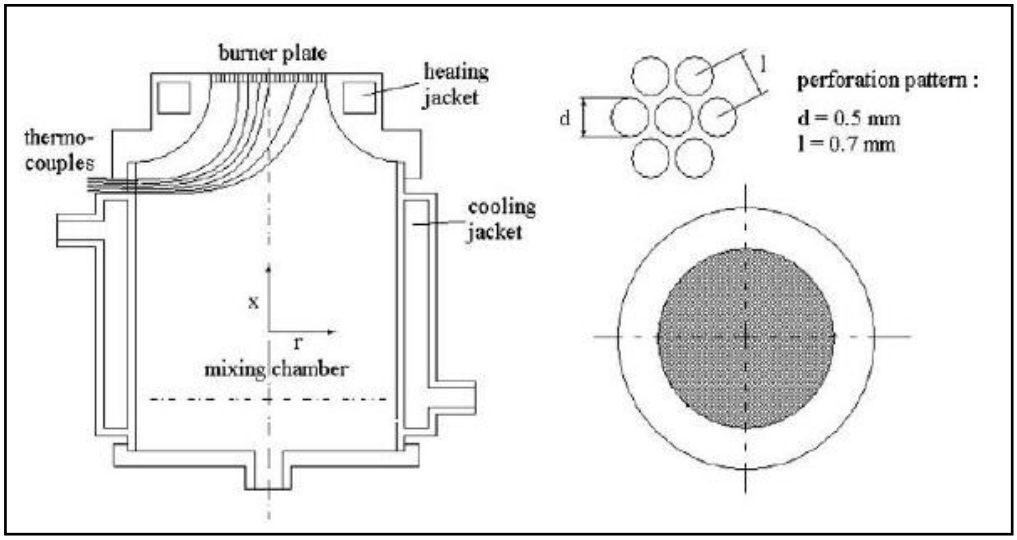

Figura A I.1: Esquema básico do queimador a ser utilizado na bancada de testes

Na figura acima, à esquerda, é possível visualizar o dispositivo que será utilizado para a construção da bancada de medição de velocidade de chama. À direita, está sendo mostrada a vista superior da placa que funciona como o "bico" do queimador e no detalhe acima o espaçamento e a configuração da furação da placa.

Neste dispositivo, as camisas de arrefecimento mantém a câmara de mistura em uma temperatura constante. Mais acima, as camisas de aquecimento mantêem a placa aquecida, de maneira que a mistura seja pré-aquecida antes de entrar em combustão. Uma série de termopares é radialmente distribuída na placa. O cálculo da velocidade de chama é feito com base no balanço térmico do calor transferido da chama para a placa e desta para a mistura reagente.

Quando a velocidade de chama for maior que a velocidade da mistura, a chama irá se aproximar da placa e irá aquecer na porção central desta, fazendo com os termopares indiquem aumento de temperatura. Caso a velocidade da mistura seja maior do que a velocidade de chama, a chama irá se afastar da placa, causando uma queda da temperatura da mesma que será indicada pelos termopares. Quando todos os termopares indicarem a mesma temperatura, significa que o fluxo líquido de calor no sistema é igual a zero e será observado que toda a área da chama é paralela à superfície da placa.

O balanço de energia para uma placa perfurada é dado pela equação A I.1, abaixo

$$T_p(r) = T_c - \frac{\dot{q}''}{4\lambda h} r^2 = T_c \left(1 - \frac{1}{4}\alpha^2 r^2\right) \qquad \text{(A I.1)}$$

onde h é a altura da placa, $\dot{q}''$ é o fluxo de calor, r é o raio da placa T_c é a temperatura no centro da placa, T_p é a temperatura da placa, α^2 é um parâmetro experimental e λ é a condutividade térmica. A razão de equivalência é então fixada enquanto a vazão dos reagentes

vai sendo variada. Para cada ponto, é medido um valor de α^2 e T_c. Utilizando-se o método dos mínimos quadrados, é construída uma curva de α^2 em função da velocidade dos reagentes. A velocidade dos reagentes que resulta em $\alpha^2 = 0$ é a velocidade de chama plana laminar adiabática.

Para que os efeitos de borda não influenciem nos resultados, os termopares devem ser posicionados na região mais interna da placa. O método é limitado à temperaturas de, no máximo, 600 K na placa e, para velocidades maiores que 0,60 m/s, o método se torna impreciso devido às dificuldades de se estabilizar uma chama plana nestas velocidades.