



Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico
Evento: 2011 SIC - XIX Seminário de Iniciação Científica

MODELAGEM MATEMÁTICA NOS PRODUTOS DA COMBUSTÃO DA BIOMASSA, AVALIANDO A INFLUÊNCIA DA UMIDADE¹

Daniele Aline Jungbeck², A. Patricia Spilimbergo³.

¹ Trabalho de Iniciação Científica, PIBIC/ UNIJUI

² Bolsista PIBIC/UNIJUI. Aluna do Curso de Matemática - Licenciatura do Departamento de Ciência Exatas e Engenharias; e-mail: daniele2012@gmail.com

³ Professora Orientadora, Departamento de Ciências Exatas e Engenharias. Mestre em Matemática. Participante do Grupo de Pesquisa Modelagem Matemática de Fenômenos de Transferência de Calor e Massa; e-mail: patspi@unijui.edu.br

Resumo

O presente trabalho destina-se ao estudo da influência da umidade na composição e nas propriedades dos produtos de combustão de combustíveis de biomassa utilizados em instalações energéticas como fornalhas, para secagem de grãos. Para calculá-las é aplicado o modelo que considera o meio reagente em equilíbrio químico. Os combustíveis estudados foram: palha de trigo (*Wheas Straw*) e casca de feijão (*Bean Straws*). Foram realizados cálculos para teores de umidade na ordem de 10% a 15%. Entre as principais propriedades estudadas podemos citar: temperatura, calor específico, massa molecular média, viscosidade, condutividade térmica, entre outras.

Palavras-chave: Equilíbrio Químico; Processos de Combustão; Combustíveis de Biomassa.

Introdução

Em várias instalações energéticas (fornos, caldeiras, geradores de gás, propulsores e fornalhas) para gerar energia mecânica, elétrica ou térmica são realizados processos de combustão e no resultado destes processos aparecem os produtos de combustão. A composição e as propriedades destes produtos são necessárias para os projetistas, quando da elaboração do projeto de construção de uma respectiva instalação. Por exemplo:

- para a determinação de regimes de funcionamento de fornalhas para secagem de grãos (rendimento, transferência de calor nas paredes, etc.) é necessário conhecer a temperatura dos produtos de combustão, o calor específico e a viscosidade entre outros;
- para determinação das características de fluxos reagentes em tubeiras, é necessário conhecer ao longo da tubeira, a temperatura, a pressão, a massa molecular média, a viscosidade e também a velocidade e o impulso específico na saída.

Os processos de combustão são complexos e variados, mas em seu fundamento estão as transformações químicas de combustíveis em produtos de combustão. Para prever as características dos produtos de combustão, são aplicados vários modelos, de acordo com os esquemas de transformação do oxidante e combustível em produtos de combustão. Entre eles destacamos os seguintes: modelo de equilíbrio químico (Alemassov *et al.*, 1980; Gordon e





Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico
Evento: 2011 SIC - XIX Seminário de Iniciação Científica

McBride, 1971), modelo da cinética química detalhada (Kuo, 1986) e modelo da cinética química total (Veras *et al.*, 1996).

Assim, o objetivo deste trabalho é estudar a influência da umidade na composição e nas propriedades dos produtos de combustão dos combustíveis: palha de trigo e casca de feijão, que podem ser utilizados, por exemplo, em fornalhas para secagem de grãos, com o objetivo de gerar ar quente, levando em conta que o meio reagente se encontra em estado de equilíbrio químico.

Metodologia

O desenvolvimento deste trabalho será realizado através da metodologia parcial da modelagem matemática onde para o cálculo da composição e das propriedades dos produtos de combustão, utiliza-se o modelo de Alemassov *et al.* (1980). Essas propriedades são: temperatura, calor específico, massa molecular média, viscosidade, condutibilidade térmica, entre outras.

O modelo Alemassov *et al.* (1980) está baseado nas seguintes suposições: todas as substâncias estão em equilíbrio químico entre si e com a temperatura (T) e a pressão (P); a priori está definido o conjunto das substâncias, que é constituído por “m” tipos de moléculas e radicais () e “n” tipos de átomos (); para cada substância (átomo ou molécula/radical)

são conhecidas as dependências: $\ln K_p = -\frac{q}{RT} + \ln K_p^0$, sendo $q = m+n$, ou seja, todas as substâncias do meio reagente: átomos e moléculas/radicais, ΔH_f^0 a entalpia molar da q -ésima substância e S_f^0 entropia da q -ésima substância quando $P = 1\text{atm}$; é válida a equação de estado do gás ideal para cada substância reagente gasosa.

O modelo utilizado (Alemassov *et al.*, 1980) é constituído basicamente por três tipos de equações, descritas a seguir.

1) A equação da dissociação das moléculas nos átomos, que fornecesse um número de equações igual ao número de moléculas da substância:

(1)

onde, p_i e p_j são as pressões parciais do átomo i e molécula (radical) j , ν_i é a quantidade do átomo i em uma molécula (radical) j e K_p é a constante de dissociação pela pressão.

2) A equação da conservação da quantidade de átomos nos produtos de combustão, que fornecesse um número de equações igual ao número de átomos contidos na substância:

(2)





Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico
Evento: 2011 SIC - XIX Seminário de Iniciação Científica

onde, ρ é a constante de proporcionalidade que assegura $\rho = \frac{p}{V}$ (ρ e V são respectivamente, a pressão parcial e a quantidade dos moles da q -ésima substância dos produtos de combustão) e n_i é a quantidade do i -ésimo átomo na fórmula condicional do propelente (Spilimbergo, Castelli e Auth, 1999).

3) Equação de Dalton:

(3)

As relações (1)-(3) fornecem um volumoso sistema de equações algébricas não lineares, e para sua resolução utiliza-se o método de Newton.

Resultados e Discussão

Utilizando o aplicativo ADTJUI, associado ao modelo Alemassov *et al.* (1980), foram realizados cálculos para determinar as propriedades dos produtos de combustão dos combustíveis da biomassa já mencionados, avaliando a influência da umidade na combustão desses combustíveis. As informações necessárias foram obtidas na literatura (Jenkins, 1990) e preparadas conforme mostrado em Spilimbergo *et al.* (1998) e os resultados encontrados, para base seca, estão mostrados na Tabela 1.

Tabela 1 - Entalpias e Fórmulas Condicionais.

Combustível	l_c =(kJ/kg)	C	H	O	N	Si
Palha de Trigo	-6384,51	3,24	5,61	3,11	0,06	0,17
Casca de Feijão	-6335,12	3,25	6,14	3,25	0,06	0,08

A avaliação da influência da umidade nas propriedades e na composição se dá por considerar, no combustível, a presença de umidade na ordem de 10 a 50%.

Na Fig. 1 é mostrada a variação da temperatura (T) em função de λ . O valor de λ corresponde a relação entre os reagentes (combustível e oxidante) e, portanto representa o excesso ($\lambda > 1$) ou a falta ($\lambda < 1$) de oxidante no processo de combustão. Considerando diferentes percentuais de umidade as maiores temperaturas ocorrem quando há menor teor de umidade, conforme esperado.

Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico
Evento: 2011 SIC - XIX Seminário de Iniciação Científica

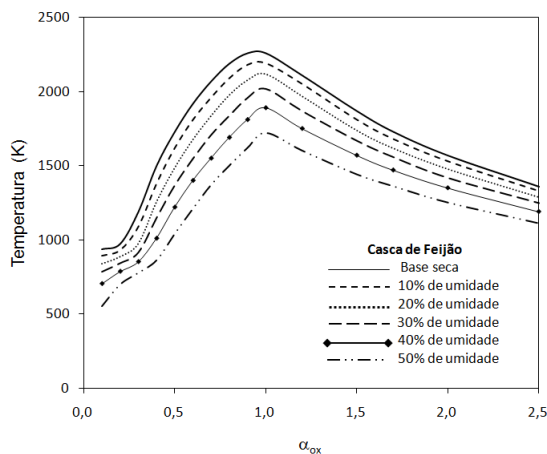


Figura 1: Dependência da temperatura dos produtos de combustão em função de α_{ox} .

Na Fig. 2 é mostrada a variação do calor específico (equilibrado e “congelado”) e se pode constatar que podem ocorrer erros em cálculos para altas temperaturas se não for levado em conta à dissociação. Este efeito é observado tanto para a base seca como para diferentes percentuais de umidade nos combustíveis.

As composições do CO e CO₂ em função de α_{ox} são mostradas na Fig. 3. Se houver a ausência de oxidante ($\alpha_{ox} = 0$) a combustão realiza-se por conta do oxigênio existente. Com o aumento de α_{ox} passa-se a ter um aumento de CO onde seu máximo é alcançado em $\alpha_{ox} \approx 1,0$ e nesse intervalo CO₂ diminui. Com mais aumento de α_{ox} a quantidade de CO diminui e aumenta a quantidade de CO₂. Quando $\alpha_{ox} > 1,0$ a quantidade de CO₂ diminui, pois seu máximo ocorre para $\alpha_{ox} \approx 1,0$. Este processo se repete também para os combustíveis com umidade, mas com menores efeitos.

Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico
Evento: 2011 SIC - XIX Seminário de Iniciação Científica

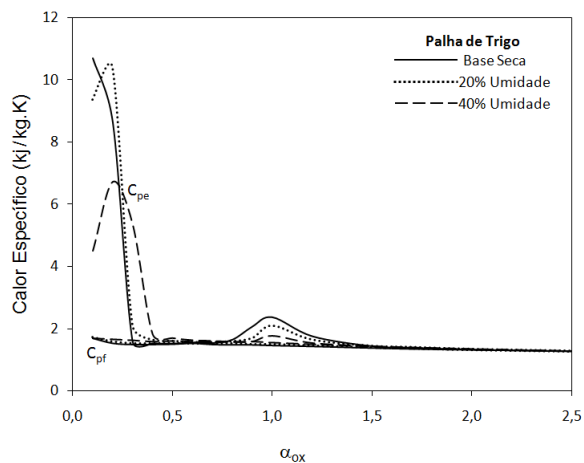


Figura 2: Dependência do calor específico dos produtos de combustão em função de α_{ox} .

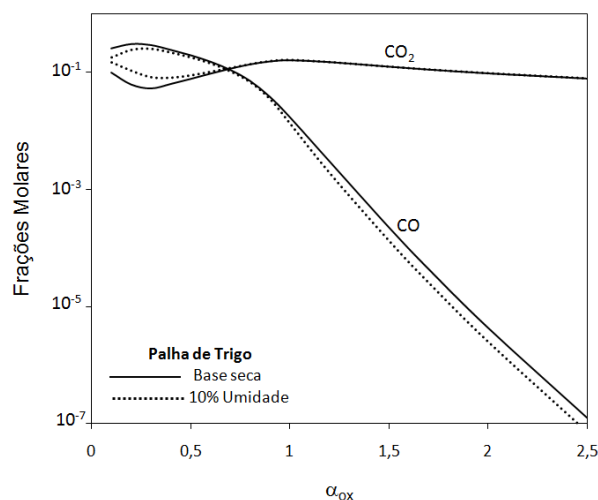


Figura 3: Dependência das frações molares dos produtos de combustão em função de α_{ox} .

Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico
Evento: 2011 SIC - XIX Seminário de Iniciação Científica

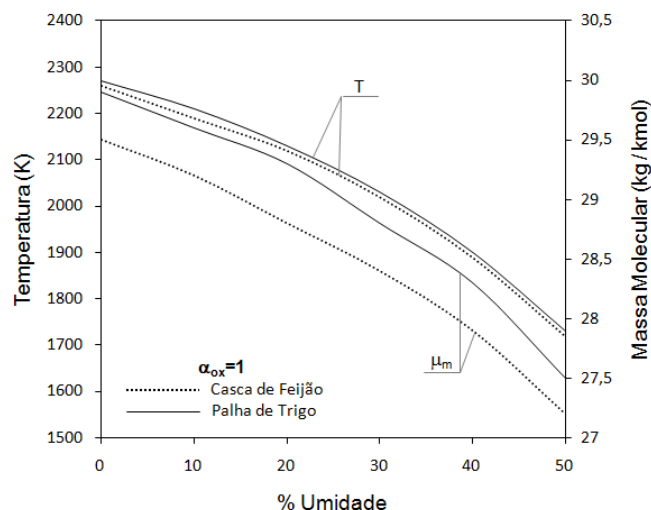


Figura 4: Dependência da umidade e massa molecular dos produtos de combustão em função da umidade.

A influência da umidade nas principais características dos produtos de combustão está mostrada na Fig. 4. No intervalo de alteração da umidade de 0 a 50% a temperatura T () cai consideravelmente, o mesmo, como se pode observar, ocorrendo com a massa molecular.

Conclusões

Este trabalho foi desenvolvido partindo-se do problema da modelagem matemática dos processos quimicamente equilibrados, para determinar as propriedades e composição dos produtos de combustão em instalações energéticas, para secagem de grãos. O modelo utilizado é constituído de um sistema de equações algébricas não lineares, que leva em conta as equações da conservação dos tipos de átomos, da dissociação das moléculas em átomos e de Dalton. Foram realizados cálculos para se obter a composição e as propriedades dos produtos de combustão dos combustíveis de biomassa, sendo eles palha de trigo e casca de feijão. Além disto, foi avaliada também a influência da umidade na composição e propriedades dos produtos resultantes da combustão.

Agradecimentos

A UNIJUI pela bolsa de Iniciação Científica, que possibilitou a realização deste trabalho.

Referências

ALEMASSOV, V. E., DREGALIN, A. F. e TISHIN, A. P. *Teoria de propulsores*. Moscou: Mashinostroenie, 1980, 240 p.



Modalidade do trabalho: Relatório técnico-científico

Evento: 2011 SIC - XIX Seminário de Iniciação Científica

GORDON, S., McBRIDE, B. J. *NASA SP-273 Computer program for calculation do complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected schoks and chapman-jouguet*. Washington, 1971. 245p.

JENKINS, B. M. Fuel Properties for Biomass Materials. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON APPLICATION AND MANAGEMENT OF THE ENERGY IN AGRICULTURE, 1990, Indiana. **Proceedings**.... Indiana: [S. ed.],1990.

KUO, K. K. *Principles of Combustion*. Hoboken: John Wiley and Sons, 1986. p. 732.

SFILIMBERGO A. P., AUTH C. J., ISKHAKOVA R. L. Modelagem dos Sistemas Quimicamente Equilibrados Aplicando os Métodos das Grandes Moléculas e do Meio Local Reagente. In: BRAZILIAN CONGRESS OF ENGINEERING AND THERMAL SCIENCES, 7, 1998, Rio de Janeiro. **Proceedings**... Rio de Janeiro: [s.n.], 1998, v. 1, p. 116-121.

SFILIMBERGO, A. P.; CASTELLII, C. A.; AUTH, C. J. Simulação numérica das propriedades dos produtos de combustão de diferentes espécies de carvão. In: IBERIAN LATIN-AMERICAN CONGRESS ON COMPUTATIONAL METHODS, 20, 1999, São Paulo. **Proceedings**... São Paulo: [S. ed.], 1999, 1 CD-ROM.

VERAS, C. A. G.; CARVALHO Jr. J. A.; SASTAMOINEN, J. J. Effect of Pressure on Sigle Particle Combustion Rate. In: LATIN AMERICAN CONGRESS OF HEAT AND MASS TRANSFER, 6, 1996, Florianópolis. **Proceedings**... Florianópolis: [S. ed.], 1996. p. 225-230.