

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

RODOLFO SPINELLI TEIXEIRA

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO USO DE GÁS DE SÍNTESE EM TURBINAS A GÁS

**JUIZ DE FORA
2017**

Rodolfo Spinelli Teixeira

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO USO DE GÁS DE SÍNTESE EM TURBINAS A GÁS

Trabalho de conclusão de curso apresentado
à Faculdade de Engenharia da Universidade
Federal de Juiz de Fora, como requisito para
a obtenção do título de Engenheiro Mecânico

Universidade Federal de Juiz de Fora – UFJF
Faculdade de Engenharia de Produção e Mecânica

Orientador: Prof. Dr. Marco Aurélio da Cunha Alves
Coorientador: Prof. Dr. Washington Orlando Irrazabal Bohorquez

Brasil
28 de junho de 2017

Ficha catalográfica elaborada através do programa de geração automática da Biblioteca Universitária da UFJF, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Spinelli Teixeira, Rodolfo.

Uso de gás de síntese em turbinas a gás / Rodolfo Spinelli Teixeira. -- 2017.
65 f.

Orientador: Marco Aurélio da Cunha Alves

Coorientador: Washington Orlando Irrazabal Bohorquez

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) - Universidade Federal de Juiz de Fora, Faculdade de Engenharia, 2017.

1. turbina a gás. 2. desempenho em ponto de projeto. 3. gás de síntese. I. da Cunha Alves, Marco Aurélio, orient. II. Irrazabal Bohorquez, Washington Orlando, coorient. III. Título.

Rodolfo Spinelli Teixeira

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO USO DE GÁS DE SÍNTESE EM TURBINAS A GÁS

Trabalho de conclusão de curso apresentado
à Faculdade de Engenharia da Universidade
Federal de Juiz de Fora, como requisito para
a obtenção do título de Engenheiro Mecânico

Trabalho aprovado. Brasil, 28 de junho de 2017:

**Orientador Prof. Dr. Marco Aurélio
da Cunha Alves**
Universidade Federal de Juiz de Fora

**Prof. Dr. Washington Orlando
Irrazabal Bohorquez**
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Raphael Fortes Marcomini
Universidade Federal de Juiz de Fora

Brasil
28 de junho de 2017

Agradecimentos

Primeiramente gostaria de agradecer a Deus pelo dom da vida pois sem Ele este trabalho não seria possível.

Ao meu orientador Marco Alves pelos conselhos e ensinamentos não somente neste trabalho mas ao longo de minha jornada acadêmica. A todos os professores e funcionários da Universidade Federal de Juiz de Fora, cada um teve uma atuação neste trabalho e portanto dedico o mesmo a eles.

A minha família em especial os meus pais por sempre estarem ao meu lado independente de minhas decisões. Eles são minha fonte de inspiração e orgulho. Ao meu querido irmão João Victor, exemplo de profissional, irmão e amigo.

A minha namorada Bianca por todo carinho, afeto e incentivo durante esses anos ao meu lado. Sua companhia ao meu lado foi de fundamental importância e inspiração para a realização deste trabalho.

Aos meus amigos que sempre estão ao meu lado, torcendo e vibrando a cada momento de nossas vidas.

“E não sede conformados com este mundo, mas sede transformados pela renovação do vosso entendimento, para que experimenteis qual seja a boa, agradável, e perfeita vontade de Deus.

(Bíblia Sagrada, Romanos 12, 2)

Resumo

O aumento da demanda por energia e a incerteza nos preços dos combustíveis convencionais requer uma maior flexibilização no uso dos combustíveis em turbinas a gás. Além do gás natural, existe um crescente interesse nos gases sintéticos, também chamados de syngas, que são gases de baixo poder calorífico, quando comparados com o gás natural. A composição de um syngas pode conter diferentes tipos e quantidades de componentes (CO , H_2 , CO_2 , N_2 , umidade, etc.). Neste trabalho será analisado o desempenho de turbinas a gás em ponto de projeto utilizando syngas, com diferentes composições, de modo a determinar de que maneira cada componente da composição do syngas afeta o desempenho do motor. Notou-se que para os gases de síntese analisados, os mesmos se sobressaem quando operados por turbinas a gás com razões de pressões elevadas e baixa temperatura na entrada da turbina. Além disso, foi modelada uma câmara de combustão convencional no *Cantera* com a finalidade de se ter uma análise qualitativa das emissões de óxidos de nitrogênio para os diferentes combustíveis estudados pelo presente trabalho. Foi observado que os gases de síntese apresentaram maior emissão desses gases poluentes quando comparados com o metano.

Palavras-chave: turbina a gás, desempenho em ponto de projeto, gás de síntese.

Abstract

The increase demand on energy and the uncertainty about conventional fuel prices lead to a higher flexibility in the use of fuels of gas turbines. Beyond natural gases, there is a upcoming interest on synthetic gases, also known as syngas which are lower heating value gases when comparing to other gases such as natural gases. A syngas composition may have different types and quantities of species (CO , H_2 , CO_2 , N_2 , humidity, etc.). In this present work will be analyzed gas turbine efficiency on its design point by running syngas, with different compositions, in a way to determine how each component affect the engine efficiency. It was noted that for the syngas studied, these achieved better efficiency when operated at higher pressure ratios and lower turbine inlet temperature. Furthermore, it was modeled a conventional combustion chamber on *Cantera* in order to have a qualitative analysis about nitrogen oxides emissions for the different fuels studied in this present work. It was observed that these syngas presented higher pollutant emissions when compared to methane.

Keywords: gas turbine, design point efficiency, synthetic gas.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Emissão de CO para diferentes misturas de combustível gasoso	16
Figura 2 – Emissão de NOx para diferentes misturas de combustível gasoso	16
Figura 3 – Pressão dinâmica em RMS para diferentes misturas de combustível gasoso	17
Figura 4 – Processo de gaseificação de combustível sólido	21
Figura 5 – Processo Fischer-Tropsch	22
Figura 6 – Planta de uma turbina a gás	23
Figura 7 – Ciclo simples de uma turbina a gás	24
Figura 8 – Diagramas P-v e T-s ciclo Brayton	25
Figura 9 – Exemplo de código escrito em Python	38
Figura 10 – Dados para reação de número 35 no mecanismo GRI-Mech 3.0	39
Figura 11 – Desenho em CAD do combustor modelado no <i>Cantera</i>	42
Figura 12 – Resultado simulações DESTUR	47
Figura 13 – Variação percentual da eficiência de ciclo para Bio-Syngas	48
Figura 14 – Variação percentual da eficiência de ciclo para Coal-Syngas	49
Figura 15 – Variação percentual do trabalho específico para Bio-Syngas	50
Figura 16 – Variação percentual do trabalho específico para Coal-Syngas	50

Lista de tabelas

Tabela 1 – Alguns fatos históricos da gaseificação	19
Tabela 2 – Terminologias antigas para vários tipos de syngas	20
Tabela 3 – Composição molar em porcentagem para os combustíveis utilizados	43
Tabela 4 – PCI gerado pela rotina em Python dos combustíveis utilizados	44
Tabela 5 – Parâmetros utilizados para alimentação do DESTUR	45
Tabela 6 – Parâmetros utilizados para alimentação da câmara de combustão no <i>Cantera</i>	46
Tabela 7 – Emissões de NO_x para a turbina selecionada	51

Lista de abreviaturas e siglas

CO	Monóxido de Carbono
CO_2	Dióxido de Carbono
NH_3	Amônia
HCN	Ácido Cianídrico
NO_x	Óxidos de Nitrogênio
H_2	Hidrogênio Molecular
H_2S	Sulfeto de Hidrogênio
N_2	Nitrogênio Molecular
$IGCC$	Integrated Gasification Combined Cycle
TG	Turbina a Gás
FT	Fischer-Tropsch
Q	Transferência de calor para o volume de controle
W	Trabalho exercido pelo volume de controle
h	entalpia em determinado ponto do volume de controle
C	Velocidade em determinado ponto do volume de controle
c_p	Calor específico do fluido de trabalho a pressão constante
c_v	Calor específico do fluido de trabalho a volume constante
T	Temperatura em determinado ponto do volume de controle
p	Pressão em determinado ponto do volume de controle
R	Constante universal dos gases
1	Subscrito 1 representando entrada do compressor
2	Subscrito 2 representando saída do compressor
3	Subscrito 3 representando saída da câmara de combustão

- 4 Subscrito 4 representando saída da turbina
- c* Subscrito *c* representando compressor
- t* Subscrito *t* representando turbina
- o* Subscrito *o* representando grandeza física em estagnação

Lista de símbolos

η	Letra grega eta representando rendimento
ϕ	Letra grega phi representando a razão combustível ar
Σ	Letra grega sigma representando somatório
γ	Letra grega gamma representando a razão de calor específico
Δ	Letra grega delta representando variação de determinada grandeza física

Sumário

	Lista de ilustrações	8
	Lista de tabelas	9
1	INTRODUÇÃO	15
1.1	Objetivos	17
1.1.1	Objetivos Específicos	18
1.2	Estrutura do Trabalho	18
2	GÁS DE SÍNTESE	19
2.1	Histórico do gás de Síntese	19
2.2	Processos de obtenção do gás de síntese	20
2.2.1	Gaseificação de carvão	20
2.2.2	Síntese de Fischer-Tropsch	21
3	DESEMPENHO DE TURBINAS A GÁS	23
3.1	Ciclo ideal de uma turbina a gás	23
3.1.1	Conceitos gerais de turbina a gás	23
3.1.2	Ciclo ideal simples de uma turbina a gás	24
3.2	Método de cálculo de desempenho no ponto de projeto	28
3.2.1	Premissas adotadas	28
3.2.2	Propriedades de estagnação	28
3.2.3	Eficiência do compressor e turbina	30
3.2.4	Perdas de pressão	31
3.2.5	Perdas mecânicas	31
3.2.6	Razão combustível-ar, eficiência de combustão e eficiência do ciclo	32
3.3	Cálculo do poder calorífico inferior (PCI)	33
4	MODELAGEM USANDO PACOTE <i>Cantera</i>	37
4.1	Pacote <i>Cantera</i> aplicado a linguagem Python	37
4.2	Mecanismo químico detalhado	39
4.3	Modelagem da câmara de combustão no <i>Cantera</i>	40
5	METODOLOGIA	43
5.1	Simulação numérica para cálculo do PCI	43
5.2	Simulação usando DESTUR para cálculo de desempenho no ponto de projeto	45

5.3	Simulação da câmara de combustão no pacote <i>Cantera</i>	45
6	RESULTADOS	47
7	CONCLUSÕES	52
	REFERÊNCIAS	53
	ANEXOS	54
	ANEXO A – ROTINA DE CÁLCULO DO PCI DOS COMBUSTÍ- VEIS ESTUDADOS	55
A.1	Rotina de cálculo do metano	55
A.2	Rotina de cálculo do Bio-Syngas	56
A.3	Rotina de cálculo do Coal-Syngas	57
	ANEXO B – ROTINA DE MODELAGEM DA CÂMARA DE COM- BUSTÃO NO <i>CANTERA</i>	58
B.1	Rotina de modelagem para Metano	58
B.2	Rotina de modelagem para Bio-Syngas	60
B.3	Rotina de modelagem para Coal-Syngas	63
	ANEXO C – TERMO DE AUTENTICIDADE	66

1 Introdução

Atualmente muito se fala a respeito de mudanças climáticas, degradação ambiental e crescimento da demanda energética. Grande parte da energia produzida mundialmente é gerada por plantas termelétricas que emitem gases poluentes como o NO , NO_2 , CO e CO_2 , este principal agente das mudanças climáticas (LIU, 2010). Portanto, há uma tendência recente nas termelétricas em substituir combustíveis convencionais como carvão e petróleo por outros mais limpos como o gás de síntese (syngas). O termo gás de síntese é usado para descrever combustíveis não derivados do petróleo tais como carvão e biomassa (LEFEBVRE; BALLAL, 2010).

Segundo MATHIEU (2013), o gás de síntese é uma mistura gasosa composta idealmente por CO e H_2 a qual pode ser produzida a partir de uma variedade de matéria prima (carvão, biomassa e gás natural) e métodos de produção. Devido a essa extensa forma de obtenção, o gás de síntese acaba por carregar impurezas em sua composição e, portanto, torna-se um combustível bastante heterogêneo. Além dos compostos usuais (CO e H_2), o gás de síntese pode conter em sua composição espécies químicas como NH_3 , HCN , CO_2 , NO_x , H_2S e pequenas concentrações de metano (CH_4).

Com base nesse viés, vários artigos na literatura recente vem sendo publicados por diferentes órgãos de pesquisa e fomento para a obtenção de melhores resultados e eficiências em ciclos combinados integrados à gaseificação de energia elétrica IGCC (essa abreviação vem do inglês Integrated Gasification Combined Cycle). Como exemplo podemos citar, (LEE, 2009), o qual observa as características de combustão do syngas em uma turbina GE 7EA, modelo do fabricante General Electric. O autor afirma que tal companhia vem conduzindo testes e pesquisas baseadas em experimentos laboratoriais e computacionais para estudar o comportamento da combustão do gás de síntese. Em seu artigo, algumas misturas de gás de síntese e metano puro são estudadas e suas emissões foram comparadas.

Na figura 1 observa-se que a medida em que se diminui a quantidade de energia na entrada da turbina, tem-se um aumento das emissões de monóxido de carbono. O inverso ocorre para as emissões de NO_x observadas na figura 2. Nesta figura, o comportamento desse gás poluente será explicado segundo mecanismos de cinética química os quais serão abordados neste trabalho.

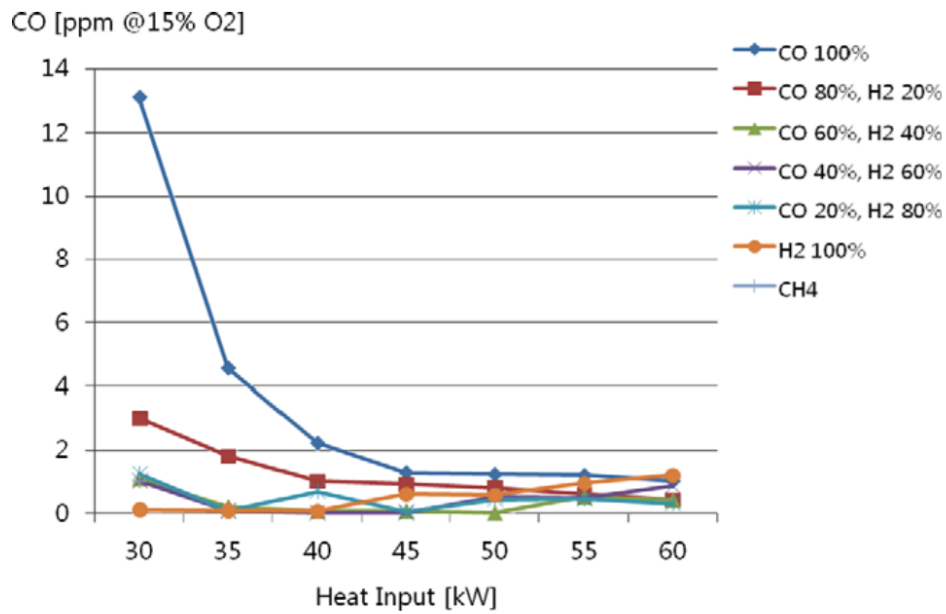


Figura 1 – Emissão de CO para diferentes misturas de combustível gasoso

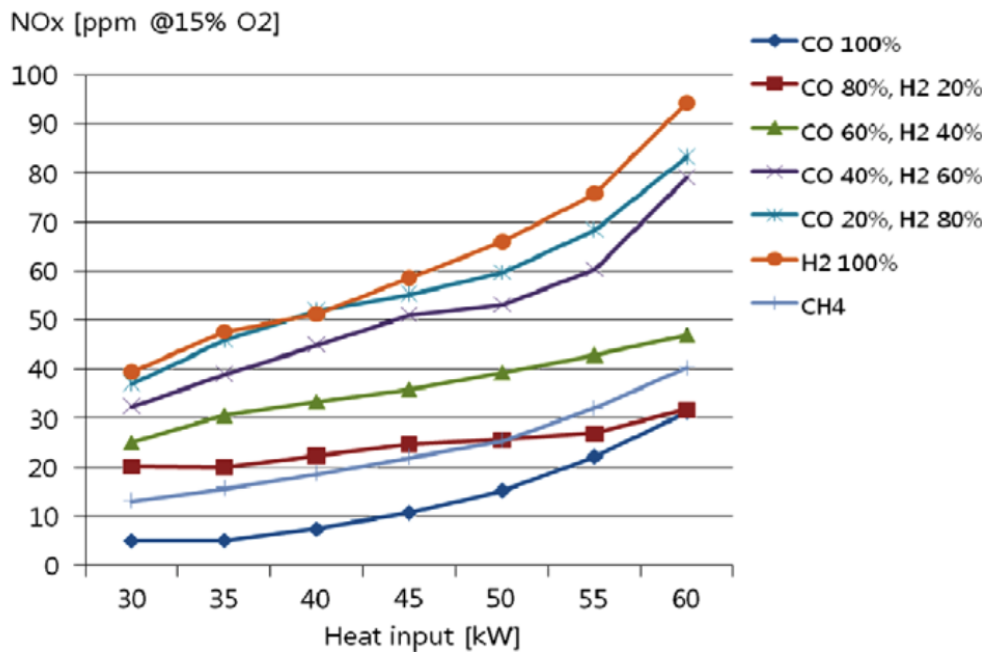


Figura 2 – Emissão de NOx para diferentes misturas de combustível gasoso

Outro aspecto positivo quando comparamos os gases de síntese com metano puro é a estabilidade dinâmica da combustão. Na figura 3 observamos que os gases de síntese apresentam maior estabilidade em relação ao metano puro.

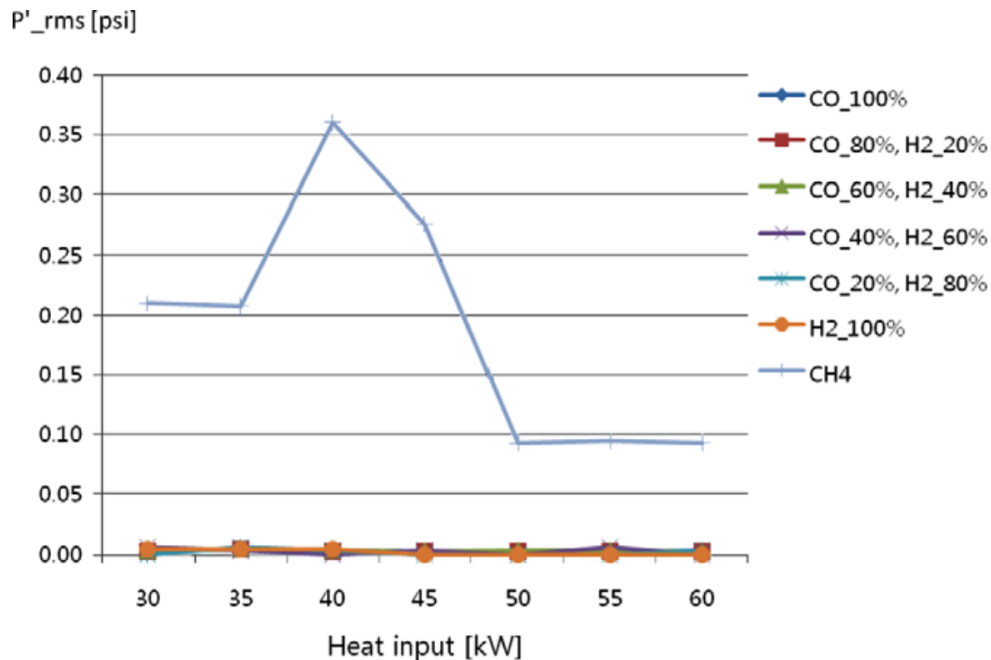


Figura 3 – Pressão dinâmica em RMS para diferentes misturas de combustível gasoso

O gás de síntese é um combustível que apresenta grande interesse para as térmicas, pois além de ser um combustível alternativo relevante, em termos de disponibilidade, pode contribuir com a redução das emissões e melhorar as características da combustão das turbinas a gás (TG) usadas em plantas térmicas. Outro ponto importante é conhecer como se comporta o desempenho termodinâmico de turbinas a gás movidas a *syngas*. Esse é o objetivo desse trabalho, avaliar como se comporta o desempenho de uma turbina a gás usada em termelétricas, bem como as emissões de óxidos de nitrogênio (NO_x) em ponto de projeto quando o combustível é mudado de gás natural para *syngas*.

1.1 Objetivos

Neste trabalho, tem-se como objetivos primários, avaliar o desempenho de turbinas a gás quando operadas com dois tipos diferentes de combustíveis: Bio-Syngas e Coal-Syngas. As comparações foram feitas com base no gás metano o qual é amplamente utilizado pelas turbinas a gás atualmente. Além disso, foi feita uma análise qualitativa das emissões

de óxidos de nitrogênio para uma determinada condição de uma câmara de combustão específica.

1.1.1 Objetivos Específicos

Como objetivos específicos, tem-se o desenvolvimento de um algoritmo para o cálculo do poder calorífico inferior dos combustíveis estudados bem como a modelagem da câmara de combustão através do *Cantera*.

1.2 Estrutura do Trabalho

Este trabalho apresenta em sua totalidade sete capítulos os quais foram divididos de forma a organizar os conteúdos sistematicamente. No primeiro capítulo tem-se uma introdução e uma apresentação dos motivos que levaram ao interesse de realizar o presente estudo. Logo em seguida, nos capítulos dois ao quatro, é feita uma revisão bibliográfica com os principais conceitos necessários para o entendimento do trabalho. No capítulo cinco, é apresentada a metodologia empregada para o cálculo do poder calorífico inferior e as simulações feitas para obtenção do desempenho e emissões de gases poluentes. Em seguida, no capítulo seis, tem-se os resultados gerados pelas simulações. Por último, tem-se as conclusões a que este trabalho convergiu.

2 Gás de Síntese

2.1 Histórico do gás de Síntese

A produção do syngas tem uma longa história datada de meados de 1800. Segundo [LIEUWEN](#), antes da vasta disponibilidade de energia elétrica e gás natural, o que era chamado de "town gas"(syngas) era gerado pela gaseificação do carvão. Tal gás era distribuído para iluminação das ruas, cozinhas residenciais e aquecimento de indústrias. Alguns fatos históricos interessantes da gaseificação são mostrados na Tabela 1.

Tabela 1 – Alguns fatos históricos da gaseificação

Data	Fato histórico
1804	Primeira patente em iluminação usando gás oriundo do carvão
1813	Ponte Westminster (Londres) iluminada com "town gas"na noite de ano novo através de tubos de madeira
1816	Baltimore, Maryland (EUA) se torna a primeira cidade norte-americana a utilizar "town gas"como fonte de energia para iluminação das ruas urbanas
1800s	Luz proveniente do "town gas"substitui lâmpadas, fazendo possível turnos noturnos

Desde então, eletricidade e gás natural substituíram a utilização dos syngas, porém a crescente demanda por energia e produtos químicos renovou o interesse no estudo dos syngas. Há dois principais motivos que levaram a essa demanda:

Primeiro, syngas pode ser obtido por vários processos de diferentes matérias-primas, promovendo grandes chances de baixo custo e por ser uma energia renovável. Segundo, syngas pode ser usado flexivelmente para geração de potência, produção de combustíveis ou manufatura química. Além disso, o carbono associado a matéria-prima pode ser convertido em CO₂ e separado por sequestro geológico.

Ao longo dos anos, uma diversa gama de processos de gaseificação vem sendo desenvolvidos e alguns deles carregam a terminologia da época usada. Alguns deles estão listados na Tabela 2. Ao longo desse trabalho, o termo syngas será destinado aos produtos gerados pela gaseificação de combustível sólido, independente do processo.

Tabela 2 – Terminologias antigas para vários tipos de syngas

Termo	Modo de obtenção
Town Gas	Proveniente do carvão e usado para iluminação nos anos 1800s
Water Gas	Syngas gerado pela reação do coque com o vapor
Producer Gas	Syngas gerado pela reação do coque com ar úmido alta concentração de nitrogênio

2.2 Processos de obtenção do gás de síntese

2.2.1 Gaseificação de carvão

De acordo com [LIEUWEN \(2009\)](#) a gaseificação do carvão é um processo de dois estágios que envolve a produção de syngas através da própria gaseificação do carvão, ilustrado pela Figura 4, e a conversão do gás de síntese em hidrocarbonetos através da síntese de Fischer-Tropsch (FT) a qual será abordada posteriormente. Esse primeiro processo é possível devido ao calor emitido pela oxidação do carbono o qual sustenta a reação de gaseificação. O combustível sólido é misturado com o oxidante (ar ou oxigênio) para gaseificar o combustível. Água ou vapor é adicionado para controlar a temperatura de reação e, em alguns casos, participa das reações de gaseificação.

Em termos práticos, os detalhes dessa conversão são complicados e múltiplos produtos além do hidrogênio e monóxido de carbono seriam originados como o metano e o alcatrão. O alcatrão é uma mistura complexa de hidrocarbonetos que pode condensar na descarga do equipamento se não removido ou processado e utilizado posteriormente. Impurezas oriundas da matéria prima, como componentes de enxofre, nitrogênio, cloro e outros, produzem resíduos que necessitam sua remoção. Resíduos de cinza sólidas, material não comburente e inorgânico resultante do combustível sólido, devem ser igualmente removidos. O syngas é comumente resfriado para remoção das impurezas, promovendo calor sensível que poderá ser usado para geração de vapor e conseqüentemente geração de potencia.

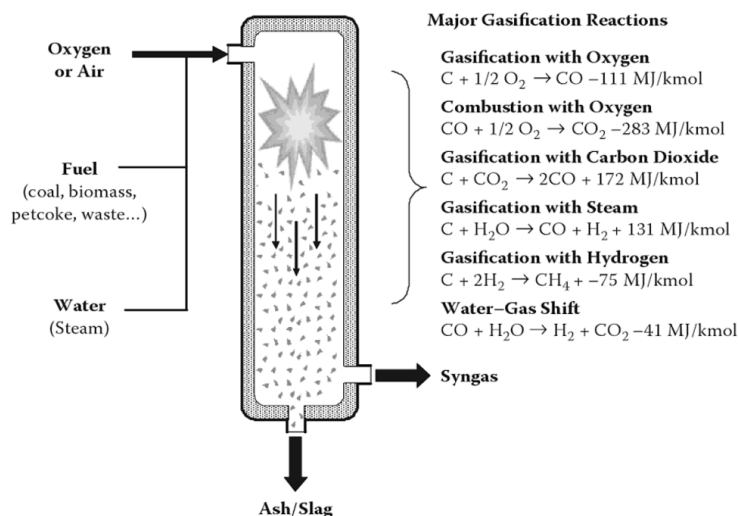


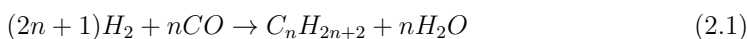
Figura 4 – Processo de gaseificação de combustível sólido

2.2.2 Síntese de Fischer-Tropsch

De acordo com (STEYNBERG, 2004), a tecnologia da síntese de Fischer-Tropsch pode ser definida como um meio de converter gás sintético contendo hidrogênio e monóxido de carbono em hidrocarbonetos leves como as parafinas e as oleofinas. Atualmente esse processo é operado comercialmente pela Sasol Corporation of South Africa, produzindo 40000 barris por dia de líquido combustível.

O processo foi inventado na Alemanha (país deficiente em reservas de petróleo porém abundante em minas de carvão) pelos cientistas alemães Franz Fischer e Hans Tropsch no instituto Kaiser Wihelm. Tal processo foi largamente empregado na segunda guerra mundial para produção de combustíveis alternativos.

O mecanismo químico final é descrito pela seguinte equação química geral:



O processo FT é quimicamente catalisado no qual hidrogênio e monóxido de carbono são convertidos em hidrocarbonetos líquidos de várias formas. Os catalisadores utilizados (geralmente baseados em ferro ou cobalto) são componentes químicos que aceleram a taxa de velocidade de uma reação química sem comprometer o resultado final. A figura 5 ilustra o processo em questão.

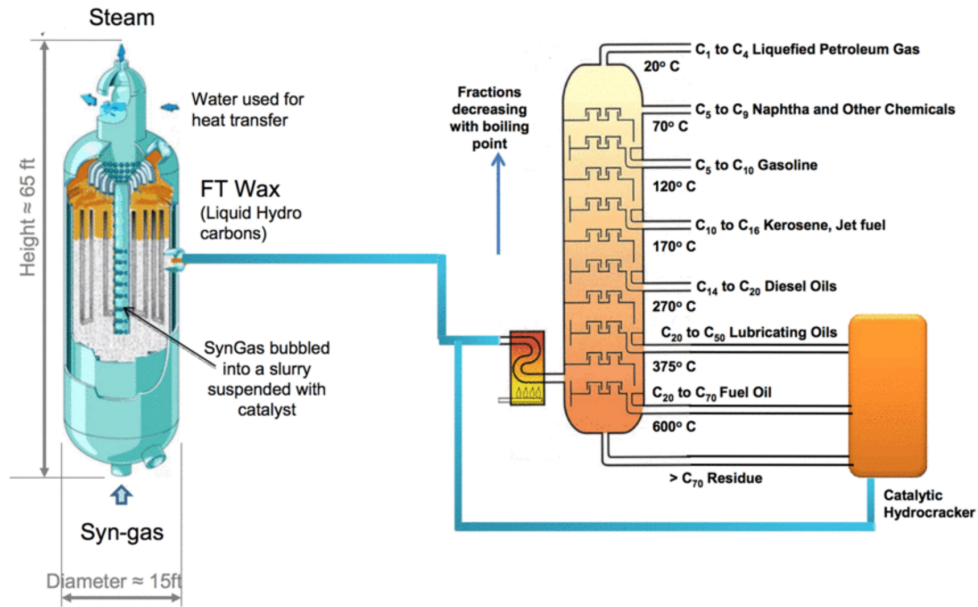


Figura 5 – Processo Fischer-Tropsch

Como o gás de síntese possui pequenas concentrações de metano (um tipo de gás liquefeito de petróleo), a síntese de Fischer-Tropsch acaba sendo um processo secundário a gaseificação do carvão na obtenção do syngas.

3 Desempenho de Turbinas a Gás

3.1 Ciclo ideal de uma turbina a gás

3.1.1 Conceitos gerais de turbina a gás

Dentre os dispositivos de geração de energia, as turbinas a gás são as que apresentam maior destaque devido à diversos motivos, sendo um deles a estabilidade dinâmica quando comparadas com os dispositivos rotativos tais como motores à diesel e gasolina. Além da elevada estabilidade, possuem grande potencial de geração de energia e flexibilidade de instalação, já que não dependem de grandes reservatórios de água e quedas d'água como as turbinas hidráulicas.

Tais máquinas de extração de energia apresentam três elementos principais onde o fluido de trabalho terá suas propriedades físicas e termodinâmicas alteradas: compressor, câmara de combustão e turbina. Na figura 6 tem-se uma planta de uma turbina a gás.

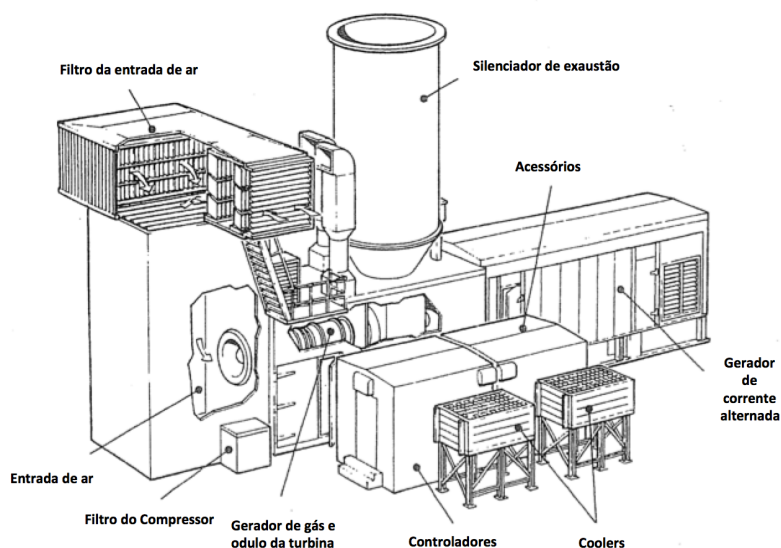


Figura 6 – Planta de uma turbina a gás

Na figura 6, tem-se em destaque os componentes periféricos e auxiliares ao motor de uma planta como filtro de entrada de ar, entrada de ar, filtro do compressor, gerador de gás e módulo da turbina, controladores, coolers, acessórios e gerador de corrente alternada.

3.1.2 Ciclo ideal simples de uma turbina a gás

O ciclo ideal para uma turbina a gás de ciclo simples, também conhecido como ciclo Brayton, é comumente representado pelo diagrama da figura 7. Os índices mostrados nessa figura servirão de referência para o restante deste trabalho e ilustram a entrada e saída de cada componente do motor de uma turbina a gás. Sendo assim, pode-se defini-los como:

- 1 entrada da compressor
- 2 saída do compressor e entrada da câmara de combustão
- 3 saída da câmara de combustão e entrada da turbina
- 4 saída da turbina

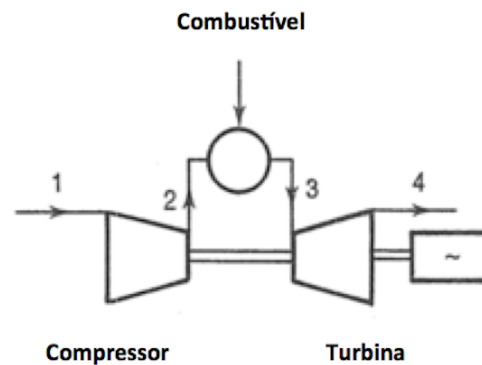


Figura 7 – Ciclo simples de uma turbina a gás

Para um melhor entendimento das condições em que o fluido de trabalho se encontra em cada componente é necessário gerar os diagramas P-v e T-s do ciclo Brayton. No diagrama P-v tem-se no eixo das ordenadas o valor da pressão P do fluido de trabalho em função do volume específico v (figura 8a). Já no diagrama T-s tem-se no eixo das ordenadas o valor da temperatura do fluido de trabalho T em função da entropia específica s (figura 8b).

Segundo (SARAVANAMUTTOO, 1996), os ciclos ideais obedecem às seguintes premissas:

- a) As etapas de compressão e expansão são processos adiabáticos e reversíveis, ou seja isentrópicos.

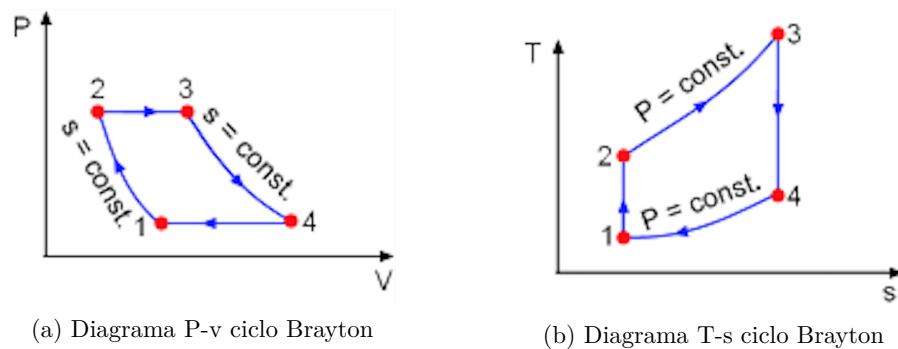


Figura 8 – Diagramas P-v e T-s ciclo Brayton

- b) A mudança de energia cinética do fluido de trabalho entre a entrada e saída de cada componente é desprezível.
- c) Não há perda de pressão na entrada de dutos, câmaras de combustão, trocadores de calor, intercoolers, saída de dutos e conexões tubulares.
- d) O fluido de trabalho possui a mesma composição durante todo o ciclo e é um gás ideal com calor específico constante.
- e) O fluxo de massa durante o ciclo é constante
- f) A transferência de calor no trocador de calor de fluxo reverso é completa, ou seja, essa premissa junto com (d) e (e) garantem a máxima transferência de calor do lado aquecido para o lado frio, sendo a queda e acréscimo de temperatura equivalentes em magnitude.

O que foi assumido em (d) e (e) implica que a câmara de combustão, em que o combustível é introduzido e queimado, pode ser considerado como um trocador de calor com fonte de alimentação externa. Por essa razão, desde que o cálculo da performance do ciclo ideal seja levado em consideração, não há diferença em denominar o ciclo como aberto ou fechado.

Ar entra axialmente pelo compressor no ponto 1 nas condições ambientes as quais o motor se encontra. Tais condições de temperatura, pressão e humidade são sujeitas à mudanças e por isso é necessário um padrão a ser implantado, também conhecido como padrão ISO de temperatura e pressão. Quando se fala que um ponto está nas condições ISO, significa dizer que o mesmo possui temperatura de 15°C , 101.325 kPa e 60 % de umidade.

No ponto 1, o fluido de trabalho (ar atmosférico) é comprimido a razões de pressão elevadas que chegam a 35:1. Nesse processo, representado pela linha 1-2, não há transferência de calor externas para o fluido, apenas o trabalho de compressão das paletas do

compressor axial. No entanto, no processo de compressão, há aumento de temperatura fazendo com que no ponto 2 o fluido de trabalho esteja a alta temperatura e pressão.

Saindo do compressor, o ar entra na câmara de combustão onde combustível é injetado, uma faísca é gerada e então ocorre a expansão dos gases. Esse processo de combustão ocorre essencialmente a pressão constante (processo 2-3). Apesar de atingir temperaturas extremamente altas, podendo chegar a $2200K$, a câmara de combustão de uma turbina a gás deixa os gases de exaustão da combustão a temperaturas mais baixas - $800K$. Isso acontece devido às diferentes etapas e zonas de diluição nesse componente.

Na turbina em si, os gases quentes provindos da combustão são expandidos e então trabalho é gerado na turbina (processo 4-1). Esse trabalho é gerado simploriamente em duas etapas. Na primeira etapa, na seção próxima ao bico, os gases quentes são expandidos e energia térmica é convertida em energia cinética. Na etapa seguinte, parte dessa energia cinética é transformada em energia rotacional e então trabalho de eixo.

Pela primeira lei da termodinâmica aplicada a um volume de controle fixo, temos o fluxo permanente de energia dado pela equação:

$$Q = (h_2 - h_1) + \frac{1}{2}(C_2^2 - C_1^2) + W \quad (3.1)$$

Em que:

Q = transferência de calor para o volume de controle

W = trabalho exercido pelo volume de controle

h_1 = entalpia na entrada do volume de controle

h_2 = entalpia na saída do volume de controle

C_1 = velocidade na entrada do volume de controle

C_2 = velocidade na saída do volume de controle

Aplicando a equação 3.1 em cada componente, tendo em mente os preceitos detalhados em (b) tem-se:

$$W_{12} = -(h_2 - h_1) = -c_p(T_2 - T_1) \quad (3.2)$$

$$Q_{23} = (h_3 - h_2) = c_p(T_3 - T_2) \quad (3.3)$$

$$W_{34} = (h_3 - h_4) = c_p(T_3 - T_4) \quad (3.4)$$

Nas formulações explicadas acima tem-se que:

W_{12} = trabalho exercido no compressor

Q_{23} = transferência de energia térmica do combustível para o fluido de trabalho através da combustão do mesmo

W_{34} = trabalho exercido pela turbina

c_p = calor específico do fluido de trabalho a pressão constante

h_1 = entalpia na entrada do compressor

h_2 = entalpia na saída do compressor

h_3 = entalpia na entrada da câmara de combustão

h_4 = entalpia na saída da câmara de combustão

T_1 = temperatura na entrada do compressor

T_2 = temperatura na saída do compressor

T_3 = temperatura na entrada da câmara de combustão

T_4 = temperatura na saída da câmara de combustão

A eficiência do ciclo, então pode ser dada como:

$$\eta = \frac{\text{trabalho de saída líquido}}{\text{calor fornecido}} = \frac{c_p(T_3 - T_4) - c_p(T_2 - T_1)}{c_p(T_3 - T_2)} \quad (3.5)$$

Fazendo uso da relação isentrópica $p - T$, tem-se que:

$$T_2/T_1 = r^{(\gamma-1)/\gamma} = T_3/T_4 \quad (3.6)$$

Em que: r é a razão de pressão definida por:

$$r = \frac{p_2}{p_1} = \frac{p_3}{p_4} \quad (3.7)$$

A eficiência do ciclo é então redefinida pela seguinte expressão:

$$\eta = 1 - \left(\frac{1}{r}\right)^{(\gamma-1)/\gamma} \quad (3.8)$$

A partir dessa relação, nota-se que a eficiência depende apenas da razão de pressão r e a natureza do gás representada por γ , sendo esta a razão entre o calor específico a pressão constante pelo calor específico a volume constante.

3.2 Método de cálculo de desempenho no ponto de projeto

3.2.1 Premissas adotadas

Após definido o ciclo ideal simples de uma turbina a gás, deve-se levar em consideração os parâmetros que divergem o mesmo do ciclo real. Para isso, (SARAVANAMUTTOO, 1996) define os motivos pelos quais isso acontece:

- a) nas turbinas a gás, as velocidades de entrada e saída de cada componente são na ordem de 100 m/s e, portanto, não se pode ignorar a parcela de energia cinética de cada componente.
- b) existe uma perda de pressão em cada componente devido ao atrito do fluido de trabalho com as paredes desses componentes. Como exemplo pode-se citar as perdas de pressão dos dutos de entrada, saída e na câmara de combustão.
- c) trabalho extra será necessário para suprimir as perdas por ineficiência mecânica dos rolamentos e para acionar os componentes auxiliares
- d) os valores de c_p e γ devem ser calculados variando a temperatura e, na combustão interna, de acordo com a composição dos constituintes
- e) o fluxo de massa do fluido de trabalho é diferente para compressor e turbina devido à adição de combustível na câmara de combustão.

As premissas, adotadas acima são de elevada importância para o cálculo de desempenho no ponto de projeto de uma turbina a gás. A seguir, cada componente do ciclo do motor de uma turbina a gás será visto e analisado no ponto de projeto bem como alguns conceitos necessários.

3.2.2 Propriedades de estagnação

Na equação de fluxo de energia, o termo de energia cinética pode ser obtido implicitamente fazendo uso do conceito de estagnação ou entalpia total. Fisicamente, a entalpia de estagnação h_0 pode ser entendida como a entalpia de uma corrente de fluido com entalpia h e velocidade C a qual passaria por um volume de controle adiabaticamente e sem trabalho envolvido. Isso pode ser equacionado da seguinte forma:

$$(h_0 - h) + \frac{1}{2}(0 - C^2) = 0 \quad (3.9)$$

Ou seja:

$$h_0 = h + \frac{C^2}{2} \quad (3.10)$$

Quando se tem um fluido considerado como gás ideal, pode se substituir h por $c_p T$, e o correspondente conceito de estagnação ou temperatura total é definido por:

$$T_0 = T + \frac{C^2}{2c_p} \quad (3.11)$$

Usando do mesmo conceito para uma compressão adiabática, a equação de energia se torna:

$$W = -c_p(T_2 - T_1) - \frac{1}{2}(C_2^2 - C_1^2) = -c_p(T_{02} - T_{01}) \quad (3.12)$$

Similarmente para um processo de aquecimento sem trabalho sendo realizado:

$$Q = c_p(T_{02} - T_{01}) \quad (3.13)$$

Quando o fluido ativo tem a sua velocidade reduzida e temperatura aumentada há, simultaneamente, um acréscimo de pressão. A pressão de estagnação é definida de forma análoga a temperatura de estagnação T_0 porém com uma restrição: o fluido é levado ao repouso adiabaticamente e isentropicamente. Tem-se assim a pressão de estagnação:

$$\frac{p_0}{p} = \left(\frac{T_0}{T}\right)^{\gamma/(\gamma-1)} \quad (3.14)$$

Substituindo a equação 3.11 em 3.14 e fazendo o uso dos conceitos de gás ideal onde $c_p = \frac{\gamma R}{\gamma-1}$ e $p = \rho RT$ em que ρ é a densidade do fluido de trabalho, tem-se que:

$$p_0 = p \left(1 + \frac{\rho C^2}{2p} \times \frac{\gamma-1}{\gamma}\right)^{\gamma/(\gamma-1)} \quad (3.15)$$

Aplicando ainda a equação 3.14 em uma compressão isentrópica entre a entrada e saída do compressor tem-se a razão de pressão de estagnação dada por:

$$\frac{p_{02}}{p_{01}} = \frac{p_{02}}{p_2} \times \frac{p_1}{p_{01}} \times \frac{p_2}{p_1} = \left(\frac{T_{02}}{T_2} \times \frac{T_1}{T_{01}} \times \frac{T_2}{T_1}\right)^{\gamma/(\gamma-1)} = \left(\frac{T_{02}}{T_{01}}\right)^{\gamma/(\gamma-1)} \quad (3.16)$$

Como a pressão e temperatura na entrada são estáticas:

$$\frac{p_{02}}{p_1} = \frac{T_{02}^{\gamma/(\gamma-1)}}{T_1} \quad (3.17)$$

Portanto, p_0 e T_0 podem ser usados da mesma forma que se usou as temperaturas e pressões estáticas no ciclo ideal, ou seja, quando se tem processos isentrópicos. Pressão e temperatura de estagnação são propriedades do fluxo de fluido de trabalho as quais podem ser usadas de forma a calcular as outras propriedades termodinâmicas e mecânicas do ciclo.

3.2.3 Eficiência do compressor e turbina

Eficiência Isentrópica

Para qualquer máquina cujo objetivo seja a produção ou absorção de trabalho, a eficiência é normalmente expressa em termos da razão entre o trabalho real pelo ideal. Devido à característica adiabática das turbomáquinas, o processo de trabalho dos mesmos se faz de forma isentrópica o que gerou o nome de eficiência isentrópica. Fazendo uso dos conceitos de entalpia e temperatura de estagnação, para modelar termodinamicamente o compressor tem-se:

$$\eta_c = \frac{W'}{W} = \frac{\Delta h'_0}{\Delta h_0} \quad (3.18)$$

Para os gases perfeitos em que $c_p \Delta T_0 = \Delta h_0$ cuja relação se aproxima dos gases reais relatados neste estudo:

$$\eta_c = \frac{T'_{02} - T_{01}}{T_{02} - T_{01}} \quad (3.19)$$

Similarmente, a eficiência isentrópica de uma turbina pode ser dada como:

$$\eta_t = \frac{W}{W'} = \frac{T_{03} - T_{04}}{T_{03} - T'_{04}} \quad (3.20)$$

Nas equações 3.19 e 3.20 os termos com apóstrofe (') foram usados para o trabalho ideal do processo. Nos procedimentos de cálculo do desempenho das turbinas a gás, os valores de eficiência e razão de compressão são fornecidos pelos fabricantes e, portanto, as temperaturas devido ao trabalho requerido pelo ciclo serão calculadas da forma:

$$T_{02} - T_{01} = \frac{1}{\eta_c} (T'_{02} - T_{01}) = \frac{T_{01}}{\eta_c} \left(\frac{T'_{02}}{T_{01}} - 1 \right) \quad (3.21)$$

Tem-se assim para os compressores:

$$T_{02} - T_{01} = \frac{T_{01}}{\eta_c} \left[\left(\frac{p_{02}}{p_{01}} \right)^{\gamma/(\gamma-1)} - 1 \right] \quad (3.22)$$

Similarmente para as turbinas:

$$T_{04} - T_{03} = \eta_t T_{03} \left[1 - \left(\frac{1}{p_{03}/p_{04}} \right)^{(\gamma-1)/\gamma} \right] \quad (3.23)$$

Quando o compressor é parte de uma turbina a gás estacionária, tendo como partida o próprio compressor, os termos p_{01} e T_{01} na equação 3.22 serão substituídos pelas medidas de pressão e temperatura do ambiente em que a máquina se encontra, visto que a velocidade do ar será zero.

A mesma ideia deve ser aplicada a turbina de uma turbina a gás estacionária. Como esta terá o seu bocal de saída para a atmosfera, a energia cinética dos gases de

exaustão é desperdiçada na atmosfera. Portanto, na equação 3.23 a eficiência da turbina seria melhor calculada levando-se em consideração a pressão estática p_4 ao invés da pressão de estagnação p_{04} . Por sua vez, a pressão estática na saída da turbina p_4 pode ser dada como a pressão ambiente p_a . Redefinindo a equação 3.20 com as conclusões feitas e o uso de 3.23:

$$\eta_t = \frac{T_{03} - T_{04}}{T_{03} \left[1 - \left(\frac{1}{p_{03}/p_a} \right)^{(\gamma-1)/\gamma} \right]} \quad (3.24)$$

3.2.4 Perdas de pressão

Bocal de entrada e difusor de saída

As perdas de pressão no bocal de entrada e no difusor saída dos componentes de uma turbina a gás são estimados e fornecidos pelos fabricantes e geralmente podem ser dados pela formulação:

$$p_{01} = p_a - \Delta p_i \quad (3.25)$$

Onde p_{01} é a pressão de estagnação no bocal de entrada, p_a é a pressão ambiente e Δp_i é a perda de pressão a ser encontrada. Existem vários meios de calcular essa perda e uma delas seria através da instalação de um tubo de Venturi na saída do bocal. Geralmente essas perdas de pressão devido ao bocal de entrada e difusor de saída de uma turbina a gás são insignificantes.

Câmara de combustão

Nas câmaras de combustão as perdas de pressão de estagnação são causadas pela resistência aerodinâmica da chama e devido aos dispositivos de mistura. Outro fator que contribui para essas perdas seria a perda de momento gerado pelas reações altamente exotérmicas produzidas pela combustão dos combustíveis. Para as câmaras de combustão das turbinas a gás estacionárias de ciclo simples sem trocadores de calor a perda de pressão é calculada de formula análoga à perda de pressão nos bocais de entrada:

$$p_{03} = p_{02} - \Delta p_b \quad (3.26)$$

Em que a perda de pressão na câmara de combustão é dada pelo termo Δp_b . Essas perdas são dimensionadas pelos fabricantes e ficam na faixa de 2 a 3 % para as turbinas estacionárias.

3.2.5 Perdas mecânicas

Nas turbinas a gás a transmissão de potência da turbina para o compressor é feita de forma direta sem a intervenção de engrenagens. Portanto, todo o atrito mecânico gerado será devido às perdas de rolamento e resistência do ar. Tais perdas são pequenas e

geralmente são estimadas a 1% da potência necessária para girar o compressor. Tem-se assim a o trabalho gerado pela turbina levando-se em conta a eficiência mecânica η_m :

$$W = \frac{1}{\eta_m} c_{p12} (T_{02} - T_{01}) \quad (3.27)$$

Em que o termo c_{p12} é definido como o calor específico a pressão constante durante a compressão.

3.2.6 Razão combustível-ar, eficiência de combustão e eficiência do ciclo

A performance de ciclos no ponto de projeto pode ser estimada em termos do consumo de combustível específico, ou seja, fluxo de combustível por unidade de potência gerada. Para se obter essa relação, a razão ar combustível precisa ser encontrada. Pelas definições de razão de pressão e os conceitos abordados até então de eficiência isentrópica do compressor, é possível calcular a temperatura de estagnação na saída do compressor T_{02} . Além disso, a temperatura de estagnação na entrada da turbina T_{03} é dimensionada de acordo com as limitações das paletas da mesma. O problema se torna então encontrar a razão combustível-ar f necessária para transformar uma unidade de massa de ar a temperatura T_{02} e f kg de combustível a temperatura T_f em $(1 + f)$ kg de produto a uma temperatura T_{03} . Sabe-se que esse processo é adiabático sem realização de trabalho e, portanto, se torna:

$$\sum (m_i h_{i03}) - (h_{a02} + f h_f) = 0 \quad (3.28)$$

Em que:

m_i = massa de produto i por unidade de massa de ar

h_i = entalpia específica dos combustíveis

h_a = entalpia específica do ar

De acordo com (ROGERS; MAYHEW, 1992), pode-se fazer uso da entalpia de reação do combustível a uma dada temperatura de 25 °C (ΔH_{25}) e expressar a equação como:

$$(1 + f) c_{pg} (T_{03} - 298) + f \Delta H_{25} + c_{pa} (298 - T_{02}) + f c_{pf} (298 - T_f) = 0 \quad (3.29)$$

Onde c_{pg} é o calor específico médio dos produtos variando a temperatura de 298 K a T_{03} e ΔH_{25} a entalpia de reação de combustível com água na fase vapor no produto, uma vez que a temperatura T_{03} é maior do que a temperatura de ebulição da água.

Finalmente, pode-se encontrar o valor da razão combustível ar (f) de um determinado combustível sabendo-se a sua entalpia de reação e os valores de temperatura de estagnação T_{02} e T_{03} .

De posse do valor encontrado da razão combustível ar para uma dada variação de temperatura, pode-se agora estimar a eficiência da combustão fazendo a relação do f' teórico com o f real:

$$\eta_b = \frac{f'}{f} \quad (3.30)$$

Em que ambos são relativos a mesma variação de temperatura ($T_{03} - T_{02}$). Em termos práticos, a combustão é um processo bastante eficiente chegando a níveis de 99%.

Uma vez encontrada a razão combustível-ar, o consumo de combustível m_f pode ser mensurado como o produto $f \times m_a$ em que m_a denota-se a vazão de ar e o consumo específico de combustível pode finalmente ser dado como (SFC - do inglês *Specific Fuel Consumption*):

$$SFC = \frac{f}{W_N} \quad (3.31)$$

Em que o W_N refere-se ao trabalho específico

De posse dos parâmetros definidos, pode-se mensurar então a eficiência térmica do ciclo a qual é dada em potência de saída pela energia proveniente da combustão. Levando-se em consideração que o combustível é queimado sob condições ideais, pode-se mensurar a taxa de energia liberada como:

$$m_f PCI = f m_a PCI \quad (3.32)$$

Em que o termo PCI é o poder calorífico inferior e será explicado no tópico seguinte. Portanto, a eficiência do ciclo pode ser vista como:

$$\eta = \frac{W}{f m PCI} \quad (3.33)$$

A qual em muitos casos pode ser dada graficamente em função do trabalho específico (W_e):

$$W_e = \frac{W}{m_a + m_f} \quad (3.34)$$

3.3 Cálculo do poder calorífico inferior (PCI)

O poder calorífico de um material combustível é de suma importância pois ele pode ser usado para avaliar a efetividade do mesmo como combustível em programas de desempenho de motores como o DESTUR. Outra finalidade do poder calorífico de combustíveis seria no projeto de equipamentos químicos onde eles serão usados. O poder calorífico pode ser definido como a quantidade de calor liberado pela completa combustão de certa quantidade de massa de um combustível com oxigênio. No caso de combustíveis gasosos, objetivo de estudo deste trabalho, o poder calorífico pode ser dado tanto em

quilogramas quanto em quantidade de volume, por exemplo o metro cúbico (m^3). O que não ocorre para os demais, sendo estes calculados por unidade de massa.

Em geral, calcula-se para os combustíveis sólidos ou líquidos o poder calorífico superior (PCS) o qual é obtido à volume constante. O PCS é definido como a quantidade de calor por unidade de massa quando o produto final da combustão conter água na fase líquida. Já para os combustíveis gasosos, o que interessa é o poder calorífico inferior (PCI), o qual é obtido à pressão constante e tem como produto da combustão água na fase gasosa.

O poder calorífico de um combustível depende do tipo de reação exotérmica (reações em que há liberação de calor) e da quantidade de calor que a mesma libera. O calor da combustão é medido pelo calor liberado na reação química de oxidação do combustível. Tal valor é determinado através das mudanças de entalpia a pressão e temperatura constantes pela seguinte formulação (SARKAR, 2009):

$$\Delta H = \Delta U + RT\Delta n \quad (3.35)$$

Em que:

ΔH = variação de entalpia

ΔU = variação de energia interna

R = constante universal dos gases $\left(8,314 \frac{J}{molK}\right)$

Δn = variação do número de mols

Como visto, a variação da entalpia pode ser determinada de acordo com as mudanças na energia interna e no número de mols de uma reação. A variação da energia interna devido a variação de temperatura é conhecido como:

$$\left(\frac{dU}{dT}\right)_p = \Delta c_v \quad (3.36)$$

Ou ainda:

$$\Delta U_2 - \Delta U_1 = \int_{T_1}^{T_2} \Delta c_v dT \quad (3.37)$$

$$\Delta U_2 - \Delta U_1 = \Delta c_v(T_2 - T_1) \quad (3.38)$$

Pelo princípios termodinâmicos sabe-se que:

$$\left(\frac{dH}{dT}\right)_p = \Delta c_p \quad (3.39)$$

E, de forma análoga:

$$\Delta H_2 - \Delta H_1 = \int_{T_1}^{T_2} \Delta c_p dT \quad (3.40)$$

$$\Delta H_2 - \Delta H_1 = \Delta c_p (T_2 - T_1) \quad (3.41)$$

Nas equações utilizadas acima tem-se as seguintes definições:

T_1 = temperatura média do reagente

T_2 = temperatura média do produto

ΔU_1 = variação de energia interna do reagente

ΔU_2 = variação de energia interna do produto

ΔH_1 = variação de entalpia do reagente

ΔH_2 = variação de entalpia do produto

Δc_v = variação média do calor específico a volume constante

Δc_p = variação média do calor específico a pressão constante

O calor gerado pela reação de combustão pode ser calculado utilizando-se as equações 3.38 e 3.41. Nelas utiliza-se tanto para o calor específico a volume constante quanto para o calor específico a pressão constante a média dos mesmos, algo que torna os cálculos menos precisos. O calor liberado pelas reações pode ser calculado através dos valores de calor específico de cada reagente e produto. Como já enfatizado, para determinar o poder calorífico inferior será utilizado o calor específico a pressão constante (3.41). O mesmo é uma propriedade termodinâmica extensiva dependente da temperatura. Em alguns casos essa relação é dada pelo seguinte polinômio:

$$c_p = A + BT + CT^2 + DT^3 \quad (3.42)$$

Em que os valores para as constantes A, B, C e D são disponibilizados na literatura.

O poder calorífico inferior pode ser determinado pela soma de todos os valores de energia liberada durante um processo de combustão. Esse processo é facilmente aplicado aos combustíveis gasosos, como o metano e o gás de síntese. Os passos para determinação do PCI são descritos a seguir:

Primeiramente, necessita-se de saber a composição molar de cada espécie química do combustível. Em sequência, a energia de combustão pode ser determinada pela entalpia de formação dos produtos e reagentes. O somatório de todo calor liberado pelas reações é usado para obter o calor de combustão em MJ por mol o qual pode ser convertido em MJ por unidade de massa sabendo as frações molares do combustível. A formulação a

seguir ilustra o método de cálculo da energia de combustão, também conhecida como poder calorífico inferior:

$$\Delta H_r^0 = \sum_{\text{produtos}} \Delta H_{f,j}^0 - \sum_{\text{reagentes}} \Delta H_{f,i}^0 \quad (3.43)$$

Nessa equação, utilizou-se o conceito de entalpia de formação padrão que, segundo (SARKAR, 2009), é definido como a mudança de entalpia de um mol de uma determinada espécie química nas condições padrões de temperatura e pressão.

A equação 3.43 será amplamente utilizada nos algoritmos de cálculo do PCI como será visto nas seções subsequentes.

4 Modelagem usando pacote *Cantera*

4.1 Pacote *Cantera* aplicado a linguagem Python

Para o cálculo do PCI de cada combustível bem como a modelagem da câmara de combustão foi usado a linguagem de programação Python a qual possui maior fluidez e agilidade nos processamentos com o pacote *Cantera*. Esse pacote se caracteriza por ser uma coleção de ferramentas de objetos orientados os quais podem ser utilizados para resolver problemas de cinética química, termodinâmica e processos de transporte como transferência de calor e massa. O pacote *Cantera* possui a qualidade de ter uma interface bem diversa a qual se enquadra não só na linguagem Python mas também em Matlab, Fortran 90 e C++.

Cantera trabalha com objetos que representam componentes de uma simulação, tais como misturas gasosas, reatores, modelos cinéticos, superfícies, equações de estado, chamas, métodos numéricos de resolução de equações diferenciais, diagramas envolvendo as diferentes etapas de uma reação e entre outros. Dessa forma, modelos numéricos são construídos de uma maneira intuitiva pelo arranjo dos objetos.

Outra versatilidade do pacote seria a robustez em se trabalhar com problemas complexos necessários em projetos de pesquisa como algoritmos de compilação rápida, capacidade de trabalhar com mecanismos de reação extensos e interface com as diferentes linguagens de programação. Além disso, *Cantera* é software totalmente aberto e gratuito o que o torna altamente flexível de acordo com o trabalho que o desenvolvedor está necessitando.

A figura ?? mostra a interface de programação em Python utilizada neste trabalho. O código é escrito na janela a esquerda, também conhecida como script e o resultado é gerado na janela de comando a direita.

```

Python 2.7.13 Shell
Python 2.7.13 (default, Jan 14 2017, 16:39:48)
[GCC 4.2.1 Compatible Apple LLVM 7.0.2 (clang-700.1.81)] on darwin
Type "copyright", "credits" or "license()" for more information.
>>>
RESTART: /Users/rodolfospinelli@teixeira/Desktop/Calculo do PCI/LLV e HHV - Meta
no.py
PCI do metano = 50.02500 (MJ/Kg)
>>>

LLV e HHV - Metano.py - /Users/rodolfospinelli@teixeira/Desktop/Calculo do PCI/LLV...
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Cálculo do poder calorífico inferior do Metano
"""
# carregamento das bibliotecas necessárias
import sys
import numpy as np
import cantera as ct
# carregamento do mecanismo GRI30 utilizado
g = ct.Solution('gri30.cti')
# condições iniciais de 300K e 101325 Pa e input de coeficientes
# de reagente e produto
g.TPX = 300, 101325, 'CH4:1, O2:2, N2:7.52'
# index das espécies químicas trabalhadas
iCH4=g.species_index('CH4')
iH2O=g.species_index('H2O')
iO2=g.species_index('O2')
iCO2=g.species_index('CO2')
# cálculo da entalpia de formação em MJ/kg
Delta_H_CH4=g.standard_enthalpies_RT[iCH4]*g.T*ct.gas_constant/1000000
Delta_H_H2O=g.standard_enthalpies_RT[iH2O]*g.T*ct.gas_constant/1000000
Delta_H_CO2=g.standard_enthalpies_RT[iO2]*g.T*ct.gas_constant/1000000
Delta_H_CO2=g.standard_enthalpies_RT[iCO2]*g.T*ct.gas_constant/1000000
# cálculo do poder calorífico superior
HHV=abs((Delta_H_CO2+2*Delta_H_H2O)-(Delta_H_CH4+2*Delta_H_O2))
# cálculo do poder calorífico inferior
LHV=HHV/g.molecular_weights[iCH4]
# saída do programa
print(' PCI do metano = %5.5f (MJ/Kg) ' % (LHV))

```

Ln: 25 Col: 0

Ln: 7 Col: 4

Figura 9 – Exemplo de código escrito em Python

4.2 Mecanismo químico detalhado

Com a finalidade de se ter um estudo qualitativo das emissões de óxidos de nitrogênio (NO_x), simulou-se com o pacote *Cantera* uma câmara de combustão a pressão constante semelhante a um modelo do fabricante *General Electric* MS5001 com câmara de combustão convencional. Como dados de entrada do programa, além das características do combustor, é necessário informações detalhadas dos mecanismos químicos dos combustíveis como propriedades termodinâmicas, cinética química e transportes. Sendo assim, dois mecanismos foram levados em consideração: GRI-Mech 3.0 e USC Mech Version II elaborado por (WANG, 2017), porém esse último não leva em consideração a formação de óxidos de nitrogênio o que o torna inviável para este trabalho.

Mecanismo do metano

Para o metano foi usado o mecanismo otimizado GRI-Mech 3.0 (SMITH, 2017) desenvolvido para a combustão de gases naturais incluindo a formação de óxidos de nitrogênio. O processo de otimização foi desenvolvido para fornecer a melhor previsibilidade de princípios básicos de termodinâmica. Tal mecanismo possui 325 reações e 53 espécies químicas em sua totalidade e um banco de dados para cada reação e espécie química. Por exemplo para a reação de número 35, onde tem-se a seguinte equação química reversível:



tem-se como dados termodinâmicos e de cinética química as seguintes relações:

Temp (K)	delta-S (cal/mol K)	delta-H (kcal/mol)	kf ---- (mol, cm3, s) -----	kr -----	Keq (cm3/mol)
300	-21.7	-49.1	1.48E+17	5.59E-19	2.64E+35
500	-23.4	-49.8	1.00E+17	5.63E-05	1.78E+21
1000	-25.1	-51.0	5.90E+16	1.61E+06	3.68E+10
1500	-25.7	-51.7	4.34E+16	4.31E+09	1.01E+07
2000	-26.0	-52.2	3.49E+16	2.03E+11	1.72E+05
2500	-26.1	-52.4	2.94E+16	1.91E+12	1.55E+04
3000	-26.2	-52.6	2.57E+16	8.05E+12	3.19E+03

Figura 10 – Dados para reação de número 35 no mecanismo GRI-Mech 3.0

Na figura 10 tem-se nas colunas da esquerda para a direita: temperatura, entropia, entalpia, taxa de formação dos produtos, taxa de formação dos reagentes e taxa de equilíbrio. Esses dados, junto com os dados alocados nas outras 324 reações, foram usados para modelar as reações químicas que ocorrem dentro de uma câmara de combustão do modelo estudado.

4.3 Modelagem da câmara de combustão no *Cantera*

De posse do mecanismo químico a ser utilizado com dados fornecidos para a câmara de combustão, pode-se determinar numericamente os valores em ppm (parte por milhão) dos óxidos de nitrogênio na saída da câmara em relação a quantidade de combustível inserida.

A câmara de combustão é definida por componentes criados pela biblioteca do *Cantera* os quais são descritos a seguir (GOODWIN; MOFFAT; SPETH, 2017):

Reservatórios

O reservatório pode ser pensado como um volume infinitamente grande, em que todos os estados são predefinidos e não tem seus valores iniciais alterados. Tipicamente, representa um recipiente para definir a temperatura e a composição de uma corrente de massa que flui para um reator ou o fluido ambiente que envolve a rede do reator. Além disso, o fluxo de fluido final de um reator deve fluir para um reservatório. No último caso, o estado do reservatório (exceto a pressão) é irrelevante. Na modelagem deste trabalho, três reservatórios foram usados, sendo um representando os gases vindo do compressor, outro representando o reservatório de combustível e por último um representando o reservatório final dos gases de escape.

Controladores de fluxo de massa

Um controlador de fluxo de massa mantém uma taxa de fluxo de massa especificada independente das condições a montante e a jusante. A equação utilizada para calcular a taxa de fluxo em massa é:

$$\dot{m} = \max(\dot{m}_0, 0) \quad (4.2)$$

Em que \dot{m}_0 é uma constante que irá representar o fluxo em massa de combustível ou ar. Tem-se que para valores negativos a vazão mássica será considerada zero já que fluxo reverso não é validado por esse objeto.

Válvula de escape

No presente trabalho terá a função de controlar a pressão de saída da câmara de modo que não haja queda de pressão entre o reservatório de saída e a câmara de combustão.

Combustor de gás ideal

No caso do combustor para gases ideais, a temperatura do comustor T é usada em vez da energia interna total U como uma variável de estado. Para um gás ideal, podemos reescrever a energia interna total em termos de frações de massa e temperatura:

$$U = m \sum_k Y_k u_k(T) \quad (4.3)$$

Aplicando a forma diferencial e sabendo que m é a massa total no combustor:

$$\frac{dU}{dt} = u \frac{dm}{dt} + mc_v \frac{dT}{dt} + m \sum_k u_k \frac{dY_k}{dt} \quad (4.4)$$

Da primeira lei da termodinâmica para um volume de controle:

$$\frac{dU}{dt} = -p \frac{dV}{dt} - \dot{Q} + \sum_e \dot{m}_e h_e - h \sum_s \dot{m}_s \quad (4.5)$$

Substituindo as derivadas correspondentes da equação 4.4 na equação 4.5:

$$mc_v \frac{dT}{dt} = -p \frac{dV}{dt} - \dot{Q} + \sum_e \dot{m}_e \left(h_e - \sum_e u_k Y_{k,e} \right) - \frac{pV}{m} \sum_s \dot{m}_s - \sum_k \dot{m}_{k,ger} u_k \quad (4.6)$$

Em que:

Y_k = fração em massa da espécie química k

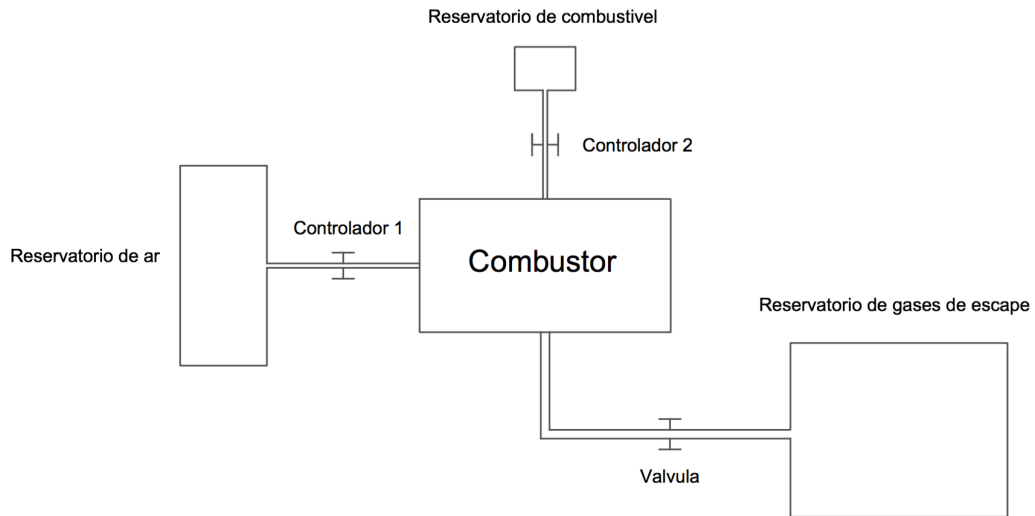
e = subscrito referente a entrada no volume de controle

s = subscrito referente a saída do volume de controle

$m_{k,ger}$ = massa da espécie química k gerada

A equação descrita acima será resolvida pelo software ao longo do tempo de combustão para cada reação química desse processo de oxidação. Sendo assim, para cada valor de temperatura tem-se as condições termodinâmicas da reação, semelhante a figura 10.

De forma a se ter uma visualização simples da modelagem feita no *Cantera*, fez-se um desenho em CAD do esquema dos componentes descritos acima:

Figura 11 – Desenho em CAD do combustor modelado no *Cantera*

Na figura 11 tem-se o reservatório de ar a esquerda representando os gases provenientes do compressor. Uma linha conecta esse reservatório através do controlador de fluxo de massa (controlador 1) ao combustor. O reservatório de combustível segue da mesma forma acima do combustor, apresentando também um controlador de fluxo de massa (controlador 2). O combustor de gás ideal é representado pelo retângulo no meio com nome combustor e nele ocorre as reações de combustão entre os gases do ar e combustível. Na linha de escape, localizada abaixo do combustor, tem-se a válvula de escape a qual conecta o combustor ao reservatório final de gases de escape.

5 Metodologia

De posse das formulações e teorias abordadas até então, é possível calcular no ponto de projeto as condições de eficiência de diferentes turbinas a gás para três combustíveis distintos. Sendo assim, será simulado e comparado as eficiências de ciclo no ponto de projeto de turbinas a gás com diferentes características. Para isso, o software DESTUR desenvolvido em (ALVES, 2003) foi adaptado para os combustíveis empregados e usado como ferramenta de validação. Como input desse programa, necessita-se do PCI de cada combustível. Além do desempenho em ponto de projeto, será modelado uma câmara de combustão pelo *Cantera* a qual será usado também para o cálculo do PCI.

5.1 Simulação numérica para cálculo do PCI

O gás metano por ser um combustível amplamente utilizado em plantas de energia térmicas possui dados como o PCI facilmente encontrados na literatura. Sendo assim, o PCI do metano será utilizado para a validação do algoritmo usado neste trabalho.

Como descrito na seção anterior, primeiramente será necessário conhecer a composição do combustível, ou seja as frações molares de cada espécie química. De maneira a se preencher uma lacuna de dados científicos como apontado em (MATHIEU, 2013), tem-se como foco o estudo de dois tipos de gás de síntese: Coal-Syngas proveniente do carvão e o Bio-Syngas gerado a partir da biomassa. A tabela 3 abaixo mostra a porcentagem em massa das espécies químicas dos combustíveis utilizados neste trabalho.

Espécie Química	Metano	Bio-Syngas	Coal-Syngas
CH_4	100%	15,0 %	7,4 %
CO	0%	42,5%	55,56 %
H_2	0%	42,5%	37,04%

Tabela 3 – Composição molar em porcentagem para os combustíveis utilizados

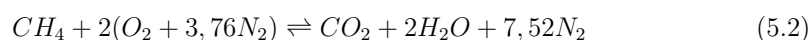
Tendo os valores de cada constituinte do combustível, é possível fazer o balanço de combustão completa, ou seja, combustão estequiométrica de um mol de combustível com o ar atmosférico afim de se obter os coeficientes dos reagentes e produtos para alimentar os dados de entrada do algoritmo de cálculo do PCI. Essa rotina de cálculo, a qual pode ser vista em anexo, foi escrita em linguagem Python com dados termodinâmicos fornecidos pelo pacote *Cantera*. Segundo (LEFEBVRE; BALLAL, 2010) o balanceamento das reações químicas pode ser dada usando o princípio da conservação das massas:

$$\sum \dot{m}_r Y_r = \sum \dot{m}_p Y_p \quad (5.1)$$

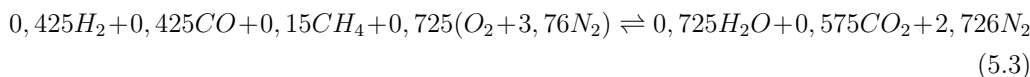
Em que:

De posse da equação 5.1 pode-se aplicá-la aos gases de estudo: metano, Bio-Syngas e Coal-Syngas para a obtenção dos coeficientes dos reagentes e produtos. Sendo assim, segue o balanço químico desses combustíveis ao se aplicar a combustão estequiométrica dos mesmos:

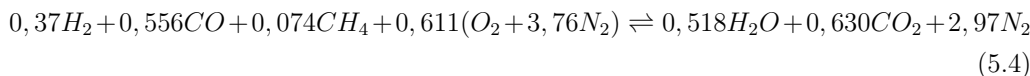
Metano



Bio-Syngas



Coal-Syngas



Segundo dados extraídos da base em (STANDARD; TECHNOLOGY, 2017) o PCI de um combustível pode ser calculado de diversas formas e uma delas foi utilizada neste trabalho. Nesse banco de dados encontrou-se para o metano PCI na ordem de 50 MJ/kg, já o algoritmo utilizado neste trabalho ficou na ordem de 50,025 MJ/kg, mostrando assim a robustez da rotina de cálculo utilizada.

A tabela a seguir, mostra os resultados gerados pelo algoritmo e seus respectivos combustíveis:

Combustível	PCI (MJ/kg)
Metano	50,025
Bio-Syngas	22,642
Coal-Syngas	17,490

Tabela 4 – PCI gerado pela rotina em Python dos combustíveis utilizados

De posse dos valores expressos na tabela 4, pode-se agora alimentar o programa DESTUR com o valor do poder calorífico inferior dos diferentes combustíveis. Esses dados de entrada são de importância ímpar para a determinação do desempenho de turbinas a gás utilizando os combustíveis estudados.

5.2 Simulação usando DESTUR para cálculo de desempenho no ponto de projeto

Como frisado anteriormente, será calculado o desempenho em ponto de projeto de diferentes turbinas a gás para os combustíveis metano, Bio-Syngas e Coal-Syngas. Para isso, dados de alimentação inseridos no DESTUR serão fornecidos ao programa tendo como base a literatura corrente e dados técnicos dos componentes.

Parâmetros	Magnitude em ponto de projeto
Temperatura ambiente [K]	288,15
Pressão ambiente [Pa]	101325
Vazão de ar na tomada do compressor [kg/s]	100
Razão de compressão	10: 20: 30
Eficiência isentrópica do compressor [%]	88
Rotação do compressor [rpm]	3600
Vazão de ar na tomada do compressor [kg/s]	100
Perda de pressão na câmara de combustão [%]	2
Eficiência térmica da combustão [%]	98
Temperatura de saída da câmara (T_{03})[K]	1100: 1250: 1400
PCI do combustível [MJ/kg]	50,025: 22,642: 17,490
Eficiência isentrópica da turbina [%]	90
Eficiência mecânica compressor-turbina [%]	99
Rotação da turbina [rpm]	3600

Tabela 5 – Parâmetros utilizados para alimentação do DESTUR

Portanto, serão simulados 9 tipos diferentes de turbinas a gás com os 3 combustíveis já referidos, totalizando 27 pontos no mapa de eficiência das turbinas a gás. Os dados de saída do DESTUR foram gerados em arquivo texto e então lidos por rotinas escritas na linguagem *Matlab* para a plotagem dos resultados. Essa conversão foi feita com a finalidade de se ter uma manipulação mais precisa dos objetos gráficos bem como maior nitidez dos pontos gerados através de curvas.

5.3 Simulação da câmara de combustão no pacote *Cantera*

O pacote *Cantera* possui uma extensa biblioteca de exemplos e simulações envolvendo desde cálculos simples como a extração de propriedades termodinâmicas de um determinado gás até cálculos mais complexos de velocidade de chama de difusão. Dessa biblioteca, adaptou-se o exemplo de um combustor a pressão constante de forma a simular o que acontece na câmara de combustão de uma turbina a gás e, com isso, estimar qualitativamente a emissão de óxidos de nitrogênio.

Tem-se na tabela a seguir as seguintes características que servirá como dado de entrada para a simulação do sistema segundo (STRAND, 2006) para uma câmara de combustão de uma a gás modelo LM5001:

Parâmetros	Magnitude
Temperatura do combustível [K]	300
Pressão do combustível [Pa]	101325
Temperatura do ar vindo do compressor [K]	699
Pressão do ar vindo do compressor [Pa]	1785000
Temperatura na saída da câmara de combustão [K]	1570
Volume da câmara de combustão [m^3]	0,179
ϕ_{global} Metano/Bio-Syngas/Coal-Syngas	0,407/1,0/1,15

Tabela 6 – Parâmetros utilizados para alimentação da câmara de combustão no *Cantera*

Na tabela 6 na última linha tem-se o parâmetro ϕ_{global} também conhecido como razão de equivalência global. Esse termo é dado como a razão combustível ar do presente estado dividido pela razão combustível ar estequiométrica. Por sua vez, a razão combustível ar estequiométrica é definida como a quantidade necessária de ar para a queima completa de um mol de combustível.

De posse dessas informações é possível simular a câmara de combustão para os combustíveis estudados no presente trabalho. Os códigos em linguagem Python são encontrados em anexo e foram adaptados de acordo com as condições estipuladas pelo fabricante em (STRAND, 2006).

6 Resultados

Para as condições em ponto de projeto definidas até então e os dados fornecidos pela literatura corrente, simulou-se usando o software DESTUR a eficiência de ciclo a qual pode ser dada em função da potência específica. A figura 12 mostra os resultados obtidos pelas simulações:

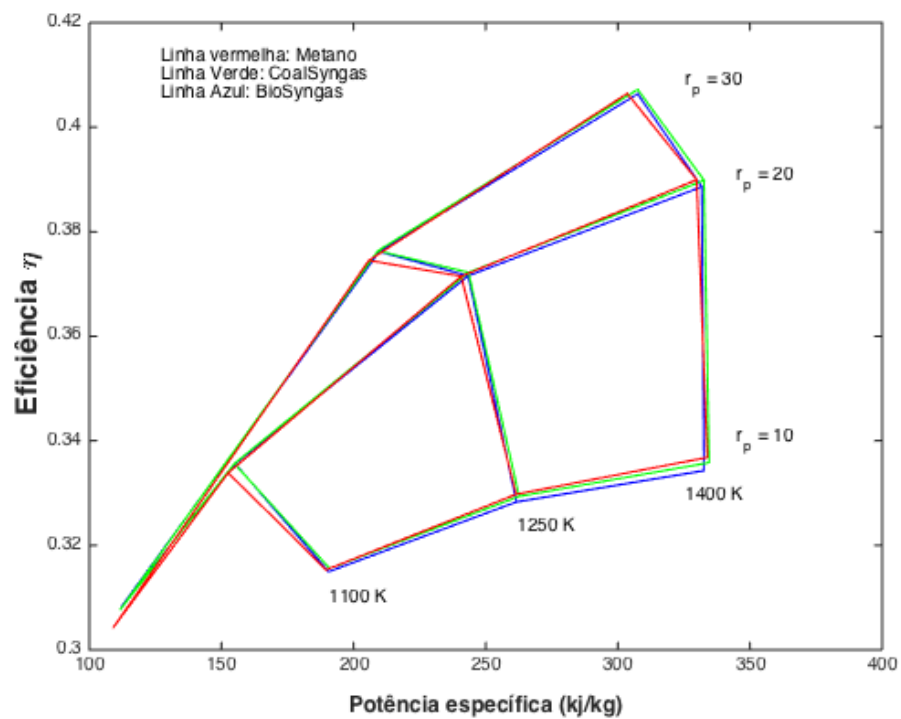


Figura 12 – Resultado simulações DESTUR

Observa-se a partir desse gráfico que as variações de eficiência são pequenas, já que se tem uma proximidade grande entre as linhas de cada combustível para os diferentes modelos simulados. Torna-se, portanto, necessário quantificar essa variação de eficiência entre o metano e o syngas ($\Delta\eta$), bem como a variação do trabalho específico entre o metano e o syngas (ΔW_e).

As figuras que seguem mostram graficamente essas relações percentuais para a eficiência do ciclo:

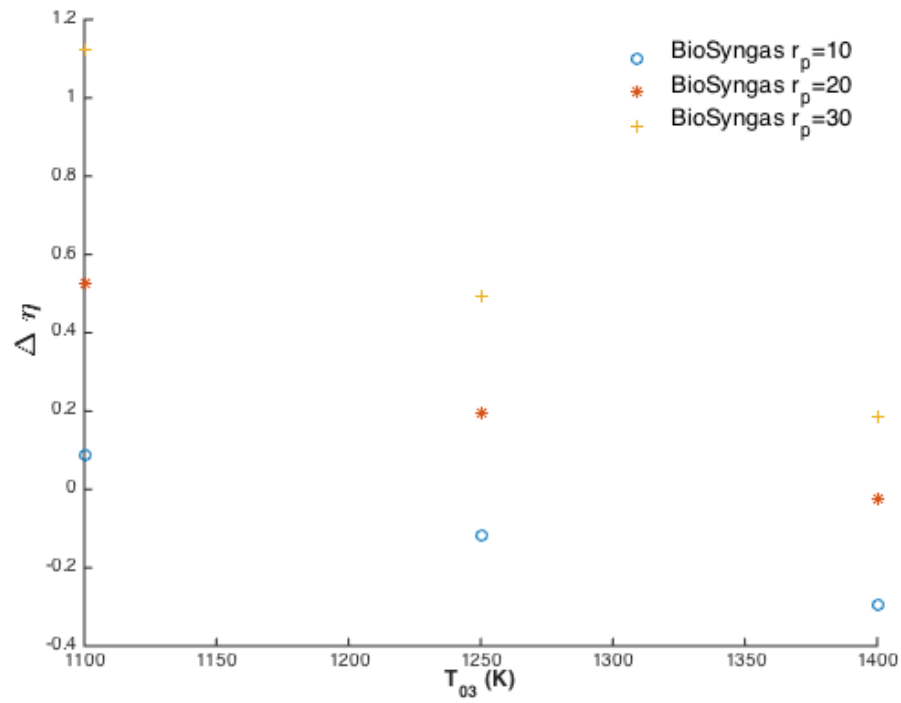


Figura 13 – Variação percentual da eficiência de ciclo para Bio-Syngas

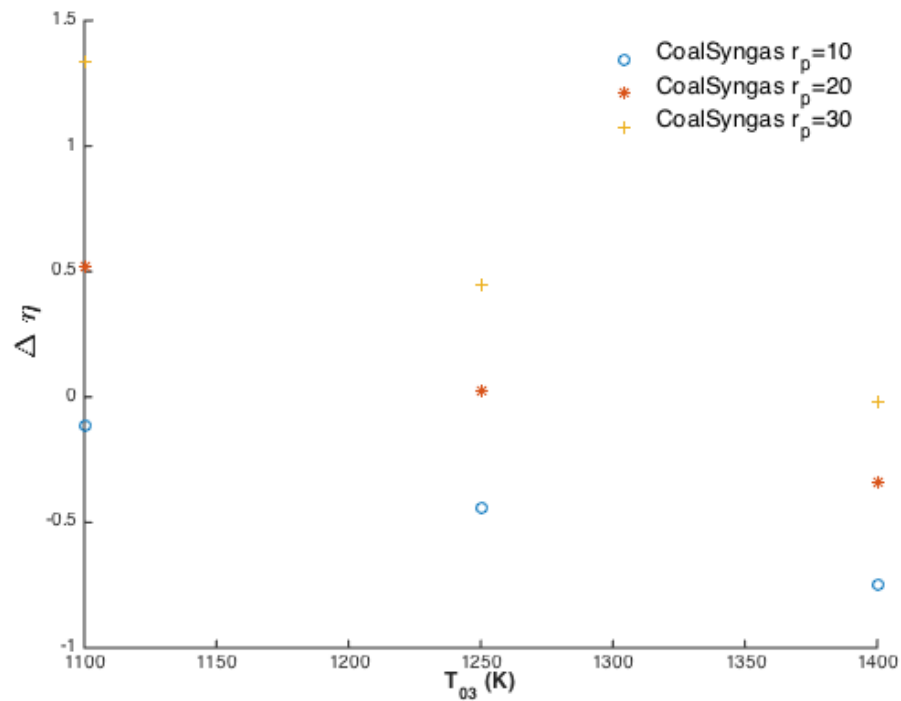


Figura 14 – Variação percentual da eficiência de ciclo para Coal-Syngas

Nas figuras 13 e 14, tem-se a variação percentual da eficiência de ciclo em função da temperatura de estagnação na entrada da turbina (T_{03}) para diferentes razões de pressão (r_p). Nota-se que para o Bio-Syngas essa variação é negativa, tornando esse combustível menos eficiente que o metano, em configurações onde a razão de pressão é baixa e a temperatura na entrada da turbina é alta (acima de 1250 K). Comportamento semelhante acontece para o Coal-Syngas com destaque para a curva de razão de pressão de 10 em que esta apresentou variação de eficiência negativa independente da temperatura de entrada na turbina.

Da mesma forma, tem-se nas figuras 15 e 16 as variações percentuais para o trabalho específico:

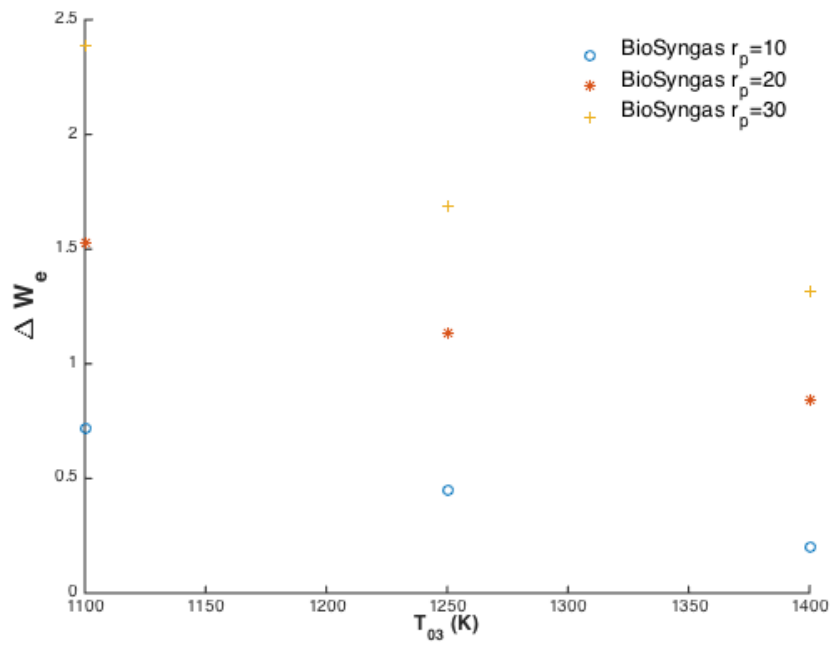


Figura 15 – Variação percentual do trabalho específico para Bio-Syngas

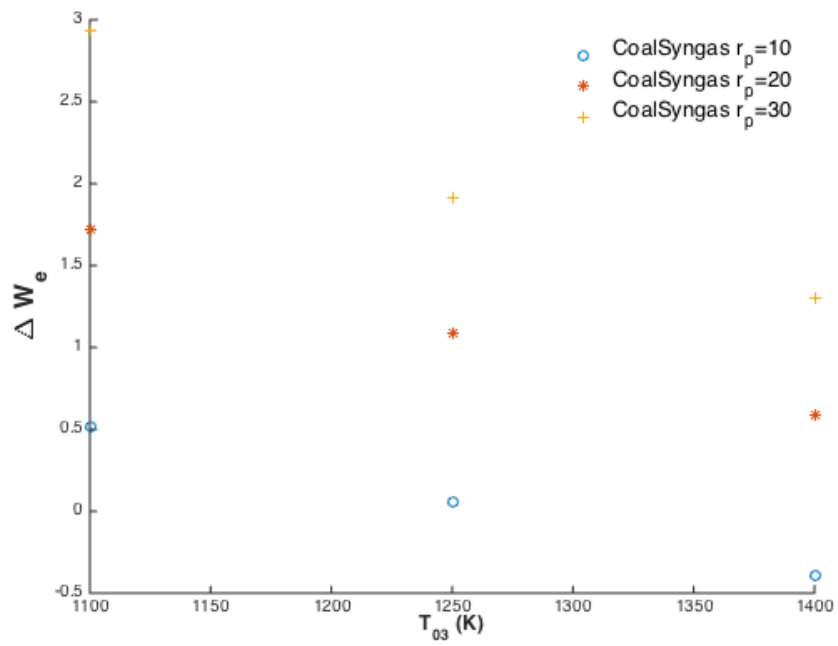


Figura 16 – Variação percentual do trabalho específico para Coal-Syngas

Nas figuras 15 e 16, tem-se a variação percentual do trabalho específico em função da temperatura de estagnação na entrada da turbina (T_{03}) para diferentes razões de pressão (r_p). O mesmo comportamento observado na eficiência do ciclo é observado também para o trabalho específico e isso se deve à relação direta de ambos com a potência do motor. Tem-se uma variação positiva do trabalho específico tanto para o Bio-Syngas quanto para o Coal-Syngas com exceção do ponto para este último com temperatura na entrada da turbina de $1400K$ e razão de pressão de 10.

Pelas condições definidas na seção Metodologia, pode-se então fazer uma análise qualitativa das emissões de óxidos de nitrogênio que são liberados da câmara de combustão em questão usando o pacote *Cantera* na linguagem Python. Tem-se na tabela a seguir os dados de saída gerados:

Combustível	ϕ_{global}	PCI [MJ/kg]	NO_x [ppm]
Metano	0,4	50,025	16,200
Bio-Syngas	1,0	22,642	38,40
Coal-Syngas	1,1	17,490	51,30

Tabela 7 – Emissões de NO_x para a turbina selecionada

Pela tabela 7 nota-se que há uma relação direta entre a quantidade de óxido de nitrogênio gerada e a razão de equivalência global de cada combustível. Por sua vez, a razão de equivalência mais elevada se explica pelo baixo poder calorífico inferior dos gases de síntese.

7 Conclusões

Máquinas de fluxo são comumente empregadas na produção de energia como as turbinas a gás. Tais máquinas fazem uso da energia química presente nos combustíveis para mover os seus componentes e converter energia química em mecânica e esta em elétrica. Devido a sua versatilidade em geração de energia por diferentes tipos de combustíveis, as turbinas a gás vêm sendo amplamente utilizadas. Este trabalho tem como finalidade avaliar o uso do gás de síntese nessas máquinas de fluxo e fazer uma análise das eficiências comparando com o metano. Para isso, foi desenvolvido um algoritmo para o cálculo do PCI de cada combustível empregado. Como objetivo secundário, buscou-se uma análise qualitativa das emissões de óxidos de nitrogênio para uma determinada câmara de combustão movida pelos combustíveis estudados. Chega-se então as seguintes conclusões:

Para o algoritmo desenvolvido no cálculo do poder calorífico inferior de cada combustível encontrou-se uma robustez e confiabilidade elevada, chegando a 0.05% o erro relativo a outros valores encontrados na literatura.

No desempenho para ponto de projeto, observou-se que o Bio-Syngas foi mais eficiente quando comparado com o metano em casos em que a razão de pressão foi alta e a temperatura na entrada da turbina baixa ($r_p = 30$ e $T_{03} = 1100$ K). Chegando a um pico de 1,12 % maior quando comparado com o metano. Comportamento semelhante foi observado também para o Coal-Syngas, em que este apresentou um pico de eficiência de 1,33 % maior também quando comparado com o metano. Em ambos os casos esse desempenho se deu devido ao comportamento desses gases nessas condições, ou seja, apresentaram maior variação de entalpia que o metano e conseqüentemente maior eficiência.

Uma situação antagônica acontece quando se tem uma razão de pressão baixa e uma temperatura na entrada da turbina alta ($r_p = 10$ e $T_{03} = 1400$ K). Ou seja, tem-se uma variação de eficiência negativa quando comparado o gás de síntese com o metano e, portanto, uma maior eficiência do metano quando comparada com os gases de síntese. O metano apresentou uma melhor eficiência que o Bio-Syngas, chegando a um pico de 0,30 % maior. O mesmo acontece quando se compara o metano com o Coal-Syngas nessas mesmas condições. O metano apresentou uma eficiência maior em 0,75 % nessa comparação.

Nos resultados usando o pacote *Cantera* para emissões de NO_x , observou-se uma emissão desses gases poluentes mais elevada quando comparada com o metano. O Bio-Syngas teve um acréscimo de mais de 58 % quando comparado com o metano. Esse acréscimo é ainda maior quando comparado o Coal-Syngas com o metano, chegando a mais de 68 %. Sendo assim não seria uma saída ecologicamente correta o uso desses gases de síntese para o modelo de câmara de combustão convencional selecionado.

Referências

- ALVES, M. A. da C. *Transitório não-adiabático de turbinas a gás*. Tese (Doutorado) — Instituto Tecnológico da Aeronáutica, 2003. Citado na página 43.
- GOODWIN, D. G.; MOFFAT, H. K.; SPETH, R. L. *Cantera: An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes*. 2017. [Http://www.cantera.org](http://www.cantera.org). Citado na página 40.
- LEE, M. C. Gas turbine combustion performance test of hydrogen and carbon monoxide synthetic gas. *Elsevier Ltd*, 2009. Citado na página 15.
- LEFEBVRE, A. H.; BALLAL, D. R. *Gas turbine Combustion Alternative Fuels and Emissions*. [S.l.]: CRC Press, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 43.
- LIEUWEN, T. *Synthesis Gas Combustion: Fundamentals and Applications*. [S.l.]: CRC Press, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 20.
- LIU, K. *Hydrogen and Syngas Production and Purification Technologies*. Hoboken, New Jersey: John Wiley and Sons, 2010. Citado na página 15.
- MATHIEU, O. *Numerical Study on the Effect of Real Syngas Compositions on Ignition Delay Times and Laminar Flame Speeds at Gas Turbine Conditions*. [S.l.]: JOURNAL OF ENGINEERING FOR GAS TURBINES AND POWER, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 43.
- ROGERS, G. F. C.; MAYHEW, Y. *Engineering thermodynamics, work and heat transfer*. 4th edition. ed. [S.l.]: Pearson, 1992. Citado na página 32.
- SARAVANAMUTTOO, H. *Gas Turbine Theory*. 4th edition. ed. [S.l.]: Longman Group Limited, 1996. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 28.
- SARKAR, S. *Fuels and combustion*. [S.l.]: Universities Press, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 34 e 36.
- SMITH, G. P. 2017. Disponível em: <http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/>. Citado na página 39.
- STANDARD, N. I. of; TECHNOLOGY. *NIST Chemistry WebBook*. 2017. Disponível em: <<http://webbook.nist.gov/chemistry/>>. Citado na página 44.
- STEYNBERG, A. *Fischer-Tropsch Technology*. [S.l.]: Elsevier, 2004. Citado na página 21.
- STRAND, T. *Design of a gas turbine combustion system*. torsten.strand@siemens.com, 2006. Citado na página 46.
- WANG, H. *High-Temperature Combustion Reaction Model of H₂/CO/C₁-C₄ Compounds*. 2017. Disponível em: <http://ignis.usc.edu/USC_Mech_II.htm,May2007>. Citado na página 39.

Anexos

ANEXO A – Rotina de cálculo do PCI dos combustíveis estudados

A.1 Rotina de cálculo do metano

```
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Cálculo do poder calorífico inferior do Metano
"""
# carregamento das bibliotecas necessárias
import sys
import numpy as np
import $Cantera$ as ct
# carregamento do mecanismo GRI30 utilizado
g = ct.Solution('gri30.cti')
# condições iniciais de 300K e 101325 Pa e input de coeficientes
# de reagente e produto
g.TPX = 300, 101325, 'CH4:1,O2:2,N2:7.52'
# index das espécies químicas trabalhadas
iCH4=g.species_index('CH4')
iH2O=g.species_index('H2O')
iO2=g.species_index('O2')
iCO2=g.species_index('CO2')
# cálculo da entalpia de formação em MJ/kg
Delta_H_CH4=g.standard_enthalpies_RT[iCH4]*g.T*ct.gas_constant/1000000
Delta_H_H2O=g.standard_enthalpies_RT[iH2O]*g.T*ct.gas_constant/1000000
Delta_H_O2=g.standard_enthalpies_RT[iO2]*g.T*ct.gas_constant/1000000
Delta_H_CO2=g.standard_enthalpies_RT[iCO2]*g.T*ct.gas_constant/1000000
# cálculo do poder calorífico superior
HHV=abs((Delta_H_CO2+2*Delta_H_H2O)-(Delta_H_CH4+2*Delta_H_O2))
# cálculo do poder calorífico inferior
LHV=HHV/g.molecular_weights[iCH4]
# saída do programa
print(' PCI do metano = %5.5f (MJ/Kg) ' % (LHV))
```


A.2 Rotina de cálculo do Bio-Syngas

```

# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Cálculo do poder calorífico inferior do Bio-Syngas
"""
# carregamento das bibliotecas necessárias
import sys
import numpy as np
import $Cantera$ as ct
# carregamento do mecanismo GRI30 utilizado
g = ct.Solution('gri30.cti')
# condições iniciais de 300K e 101325 Pa e input de coeficientes
# de reagente e produto
g.TPX = 298, 101325, 'H2:0.4250,CO:0.4250,CH4:0.15'
cH2=0.4250; cCO=0.4250 ;cCH4=0.15; cO2=0.725; cH2O=0.725; cCO2=0.575
# index das espécies químicas trabalhadas
iCH4=g.species_index('CH4')
iH2O=g.species_index('H2O')
iCO=g.species_index('CO')
iH2=g.species_index('H2')
iO2=g.species_index('O2')
iCO2=g.species_index('CO2')
# cálculo da entalpia de formação em MJ/kg
Delta_H_CH4=g.standard_enthalpies_RT[iCH4]*g.T*ct.gas_constant/1000000
Delta_H_H2O=g.standard_enthalpies_RT[iH2O]*g.T*ct.gas_constant/1000000
Delta_H_CO=g.standard_enthalpies_RT[iCO]*g.T*ct.gas_constant/1000000
Delta_H_H2=g.standard_enthalpies_RT[iH2]*g.T*ct.gas_constant/1000000
Delta_H_O2=g.standard_enthalpies_RT[iO2]*g.T*ct.gas_constant/1000000
Delta_H_CO2=g.standard_enthalpies_RT[iCO2]*g.T*ct.gas_constant/1000000
# cálculo do poder calorífico superior
HHV=abs((cCO2*Delta_H_CO2+cH2O*Delta_H_H2O)-
(cCH4*Delta_H_CH4+cO2*Delta_H_O2+cCO*Delta_H_CO+cH2*Delta_H_H2))
# cálculo do poder calorífico inferior
LHV=HHV/(cH2*g.molecular_weights[iH2]+cCO*g.molecular_weights[iCO]
+cCH4*g.molecular_weights[iCH4])
# saída do programa
print(' PCI do Bio-Syngas = %5.5f (MJ/Kg) ' % (LHV))

```

A.3 Rotina de cálculo do Coal-Syngas

```
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Cálculo do poder calorífico inferior do Coal-Syngas
"""
# carregamento das bibliotecas necessárias
import sys
import numpy as np
import $Cantera$ as ct
# carregamento do mecanismo GRI30 utilizado
g = ct.Solution('gri30.cti')
# condições iniciais de 300K e 101325 Pa e input de coeficientes
# de reagente e produto
g.TPX = 298, 101325, 'H2:0.37,CO:0.556,CH4:0.074'
cH2=0.37; cCO=0.556 ;cCH4=0.074; cO2=0.661; cH2O=0.518; cCO2=0.63
# index das espécies químicas trabalhadas
iCH4=g.species_index('CH4')
iH2O=g.species_index('H2O')
iCO=g.species_index('CO')
iH2=g.species_index('H2')
iO2=g.species_index('O2')
iCO2=g.species_index('CO2')
# cálculo da entalpia de formação em MJ/kg
Delta_H_CH4=g.standard_enthalpies_RT[iCH4]*g.T*ct.gas_constant/1000000
Delta_H_H2O=g.standard_enthalpies_RT[iH2O]*g.T*ct.gas_constant/1000000
Delta_H_CO=g.standard_enthalpies_RT[iCO]*g.T*ct.gas_constant/1000000
Delta_H_H2=g.standard_enthalpies_RT[iH2]*g.T*ct.gas_constant/1000000
Delta_H_O2=g.standard_enthalpies_RT[iO2]*g.T*ct.gas_constant/1000000
Delta_H_CO2=g.standard_enthalpies_RT[iCO2]*g.T*ct.gas_constant/1000000
# cálculo do poder calorífico superior
HHV=abs((cCO2*Delta_H_CO2+cH2O*Delta_H_H2O)-
(cCH4*Delta_H_CH4+cO2*Delta_H_O2+cCO*Delta_H_CO+cH2*Delta_H_H2))
# cálculo do poder calorífico inferior
LHV=HHV/(cH2*g.molecular_weights[iH2]+cCO*g.molecular_weights[iCO]+
cCH4*g.molecular_weights[iCH4])
print(' PCI do Coal-Syngas = %5.5f (MJ/Kg) ' % (LHV))
```

ANEXO B – Rotina de modelagem da câmara de combustão no *Cantera*

B.1 Rotina de modelagem para Metano

```
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Dois fluxos separados: um metano puro e outro ar, com temperatura e pressão
diferentes, se juntam em fluxo em uma câmara de combustão adiabática a
pressão constante.
Interessa apenas a solução estável no final do processo. Um ignitor será
responsável pelo início da combustão o qual é composto por um fluxo
de radicais de hidrogênio. Após a ignição o sistema se aproxima da estabiliza
ção a qual é procurada

"""

import math
import csv

import cantera as ct

# mecanismo utilizado: GRI-Mech 3.0

gas = ct.Solution('gri30.xml')

# cria um reservatório para o combustível (metano) em condições ISO
gas.TPX = 300.0, 101325, 'CH4:1.0'
fuel_in = ct.Reservoir(gas)
fuel_mw = gas.mean_molecular_weight

# usa função pre definida para o ar 'air.xml'
# condições na saída do compressor segundo turbina
air = ct.Solution('air.xml')
air.TP=699, 1785000
air_in = ct.Reservoir(air)
```

```
air_mw = air.mean_molecular_weight

# para iniciar a combustão um pulso de radicais será utilizado
# o resultado final será independente de qual forma se dará essa
# ignição, portanto uma corrente atômica de hidrogênio será usada
gas.TPX = 300.0, 101325, 'H:1.0'
igniter = ct.Reservoir(gas)

# cria um combustor inicialmente com N2
gas.TPX = 300.0, ct.one_atm, 'N2:1.0'
combustor = ct.IdealGasReactor(gas)
combustor.volume = 0.179

# cria um reservatório de exaustão
exhaust = ct.Reservoir(gas)

# combustão pobre phi=0.535
equiv_ratio = 0.407

# calcula razão mássica de combustível e ar de acordo
# com dados do fabricante
factor = 0.235
air_mdot = factor * 9.52 * air_mw
fuel_mdot = factor * equiv_ratio * fuel_mw
# cria e instala controladores de fluxo em massa constantes m1 e m2
# m3 irá prover o pulso Gaussiano para iniciar a combustão
m1 = ct.MassFlowController(fuel_in, combustor, mdot=fuel_mdot)

m2 = ct.MassFlowController(air_in, combustor, mdot=air_mdot)

fwhm = 0.2
amplitude = 0.1
t0 = 1.0
igniter_mdot = lambda t: amplitude * math.exp(-(t-t0)**2 * 4 * math.log(2)
/ fwhm**2)
m3 = ct.MassFlowController(igniter, combustor, mdot=igniter_mdot)

# coloca uma válvula de descarga para manter pressão constante
v = ct.Valve(combustor, exhaust, K=1.0)
```

```
# a simulação contém apenas um reator
sim = ct.ReactorNet([combustor])

# loops até 6s com dados escritos em arquivo CSV
tfinal = 6.0
tnow = 0.0
Tprev = combustor.T

tprev = tnow
states = ct.SolutionArray(gas, extra=['t','tres'])

while tnow < tfinal:
    tnow = sim.step()
    tres = combustor.mass/v.mdot(tnow)
    Tnow = combustor.T
    if abs(Tnow - Tprev) > 1.0 or tnow-tprev > 2e-2:
        tprev = tnow
        Tprev = Tnow
        states.append(gas.state, t=tnow, tres=tres)

states.write_csv('combustor_metano.csv', cols=('t','T','tres','X'))
```

B.2 Rotina de modelagem para Bio-Syngas

```
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Dois fluxos separados: um BioSyngas puro e outro ar, com temperatura e pressão
diferentes, se juntam em fluxo em uma câmara de combustão adiabática a
pressão constante.
Interessa apenas a solução estável no final do processo. Um ignitor será
responsável pelo início da combustão o qual é composto por um fluxo
de radicais de hidrogênio. Após a ignição o sistema se aproxima da estabiliza
ção a qual é procurada
"""

import math
import csv
```

```
import cantera as ct

# mecanismo utilizado: GRI-Mech 3.0

gas = ct.Solution('gri30.cti')

# cria um reservatório para o combustível (metano) em condições ISO
gas.TPX = 300.0, 101325, 'H2:0.4250,CO:0.4250,CH4:0.15'
fuel_in = ct.Reservoir(gas)
fuel_mw = gas.mean_molecular_weight

# usa função pre definida para o ar 'air.xml'
# condições na saída do compressor segundo turbina
air = ct.Solution('air.xml')
air.TP=699, 1785000
air_in = ct.Reservoir(air)
air_mw = air.mean_molecular_weight

# para iniciar a combustão um pulso de radicais será utilizado
# o resultado final será independente de qual forma se dará essa
# ignição, portanto uma corrente atômica de hidrogênio será usada
gas.TPX = 300.0, 101325, 'H:1.0'
igniter = ct.Reservoir(gas)

# cria um combustor inicialmente com N2
gas.TPX = 300.0, ct.one_atm, 'N2:1.0'
combustor = ct.IdealGasReactor(gas)
combustor.volume = 0.179

# cria um reservatório de exaustão
exhaust = ct.Reservoir(gas)

# combustão com razão de equivalente de 1 de acordo com
# especificações do fabricante
equiv_ratio = 1

# calcula razão mássica de combustível e ar de acordo
# com dados do fabricante
```

```
factor = 0.235
air_mdod = factor * 9.52 * air_mw
fuel_mdod = factor * equiv_ratio * fuel_mw
# cria e instala controladores de fluxo em massa constantes m1 e m2
# m3 irá prover o pulso Gaussiano para iniciar a combustão
m1 = ct.MassFlowController(fuel_in, combustor, mdot=fuel_mdod)

m2 = ct.MassFlowController(air_in, combustor, mdot=air_mdod)

fwhm = 0.2
amplitude = 0.1
t0 = 1.0
igniter_mdod = lambda t: amplitude * math.exp(-(t-t0)**2 * 4 * math.log(2) / fwhm**2)
m3 = ct.MassFlowController(igniter, combustor, mdot=igniter_mdod)

# coloca uma válvula de descarga para manter pressão constante
v = ct.Valve(combustor, exhaust, K=1.0)

# a simulação contém apenas um reator
sim = ct.ReactorNet([combustor])

# loops até 6s com dados escritos em arquivo CSV
tfinal = 6.0
tnow = 0.0
Tprev = combustor.T

tprev = tnow
states = ct.SolutionArray(gas, extra=['t', 'tres'])

while tnow < tfinal:
    tnow = sim.step()
    tres = combustor.mass/v.mdot(tnow)
    Tnow = combustor.T
    if abs(Tnow - Tprev) > 1.0 or tnow-tprev > 2e-2:
        tprev = tnow
        Tprev = Tnow
        states.append(gas.state, t=tnow, tres=tres)

states.write_csv('combustor_biosyngas.csv', cols=('t', 'T', 'tres', 'X'))
```

B.3 Rotina de modelagem para Coal-Syngas

```
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Dois fluxos separados: um CoalSynga puro e outro ar, com temperatura e pressão
diferentes, se juntam em fluxo em uma câmara de combustão adiabática a
pressão constante.
Interessa apenas a solução estável no final do processo. Um ignitor será
responsável pelo início da combustão o qual é composto por um fluxo
de radicais de hidrogênio. Após a ignição o sistema se aproxima da estabiliza
ção a qual é procurada
"""

import math
import csv

import cantera as ct

# mecanismo utilizado: GRI-Mech 3.0

gas = ct.Solution('gri30.cti')

# cria um reservatório para o combustível (metano) em condições ISO
gas.TPX = 300.0, 101325, 'H2:0.37,CO:0.556,CH4:0.074'
fuel_in = ct.Reservoir(gas)
fuel_mw = gas.mean_molecular_weight

# usa função pre definida para o ar 'air.xml'
# condições na saída do compressor segundo turbina
air = ct.Solution('air.xml')
air.TP=699, 1785000
air_in = ct.Reservoir(air)
air_mw = air.mean_molecular_weight

# para iniciar a combustão um pulso de radicais será utilizado
# o resultado final será independente de qual forma se dará essa
# ignição, portanto uma corrente atômica de hidrogênio será usada
gas.TPX = 300.0, 101325, 'H:1.0'
```



```
igniter = ct.Reservoir(gas)

# cria um combustor inicialmente com N2
gas.TPX = 300.0, ct.one_atm, 'N2:1.0'
combustor = ct.IdealGasReactor(gas)
combustor.volume = 0.179

# cria um reservatório de exaustão
exhaust = ct.Reservoir(gas)

# combustão pobre phi=0.535
equiv_ratio = 1.15

# calcula razão mássica de combustível e ar de acordo
# com dados do fabricante
factor = 0.235
air_mdot = factor * 9.52 * air_mw
fuel_mdot = factor * equiv_ratio * fuel_mw
# cria e instala controladores de fluxo em massa constantes m1 e m2
# m3 irá prover o pulso Gaussiano para iniciar a combustão
m1 = ct.MassFlowController(fuel_in, combustor, mdot=fuel_mdot)

m2 = ct.MassFlowController(air_in, combustor, mdot=air_mdot)

fwhm = 0.2
amplitude = 0.1
t0 = 1.0
igniter_mdot = lambda t: amplitude * math.exp(-(t-t0)**2 * 4 * math.log(2) / fwhm**2)
m3 = ct.MassFlowController(igniter, combustor, mdot=igniter_mdot)

# coloca uma válvula de descarga para manter pressão constante
v = ct.Valve(combustor, exhaust, K=1.0)

# a simulação contém apenas um reator
sim = ct.ReactorNet([combustor])

# loops até 6s com dados escritos em arquivo CSV
tfinal = 6.0
tnow = 0.0
```

```
Tprev = combustor.T

tprev = tnow
states = ct.SolutionArray(gas, extra=['t','tres'])

while tnow < tfinal:
    tnow = sim.step()
    tres = combustor.mass/v.mdot(tnow)
    Tnow = combustor.T
    if abs(Tnow - Tprev) > 1.0 or tnow-tprev > 2e-2:
        tprev = tnow
        Tprev = Tnow
        states.append(gas.state, t=tnow, tres=tres)

states.write_csv('combustor_coalsyngas.csv', cols=('t','T','tres','X'))
```

ANEXO C – Termo de Autenticidade



UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
FACULDADE DE ENGENHARIA

Termo de Declaração de Autenticidade de Autoria

Declaro, sob as penas da lei e para os devidos fins, junto à Universidade Federal de Juiz de Fora, que meu Trabalho de Conclusão de Curso do Curso de Graduação em Engenharia Mecânica é original, de minha única e exclusiva autoria. E não se trata de cópia integral ou parcial de textos e trabalhos de autoria de outrem, seja em formato de papel, eletrônico, digital, áudio-visual ou qualquer outro meio.

Declaro ainda ter total conhecimento e compreensão do que é considerado plágio, não apenas a cópia integral do trabalho, mas também de parte dele, inclusive de artigos e/ou parágrafos, sem citação do autor ou de sua fonte.

Declaro, por fim, ter total conhecimento e compreensão das punições decorrentes da prática de plágio, através das sanções civis previstas na lei do direito autoral⁷ e criminais previstas no Código Penal⁸, além das cominações administrativas e acadêmicas que poderão resultar em reprovação no Trabalho de Conclusão de Curso.

Juiz de Fora, ____ de _____ de 20____.

NOME LEGÍVEL DO ALUNO (A)

Matrícula

ASSINATURA

CPF

⁷ LEI N° 9.610, DE 19 DE FEVEREIRO DE 1998. Altera, atualiza e consolida a legislação sobre direitos autorais e dá outras providências.

⁸ Art. 184. Violar direitos de autor e os que lhe são conexos: Pena - detenção, de 3 (três) meses a 1 (um) ano, ou multa.