

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**AVALIAÇÃO DO DESEMPENHO DE UM SISTEMA INTEGRADO MOTOR
CICLO OTTO/GASEIFICADOR CO-CORRENTE UTILIZANDO
MODELAGEM MATEMÁTICA**

FELIPE ORLANDO CENTENO GONZÁLEZ

Itajubá, agosto de 2010.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

FELIPE ORLANDO CENTENO GONZÁLEZ

AVALIAÇÃO DO DESEMPENHO DE UM SISTEMA INTEGRADO MOTOR
CICLO OTTO/GASEIFICADOR CO-CORRENTE UTILIZANDO MODELAGEM
MATEMÁTICA

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica como parte dos requisitos para obtenção do Título de Mestre em Ciências em Engenharia Mecânica.

Área de Concentração: Conversão de energia

Orientador: Prof. Dr. Electo Eduardo Silva Lora
Co-orientador: Prof. Dr. Rubenildo Vieira Andrade

Agosto de 2010.

Itajubá - MG

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Mauá –
Bibliotecária Margareth Ribeiro- CRB_6/1700

C397a

Centeno González, Felipe Orlando

Avaliação do desempenho de um sistema integrado Motor Ciclo Otto/Gaseificador Co-corrente utilizando modelagem matemática / Felipe Orlando Centeno González. -- Itajubá, (MG) : [s.n.], 2010. 156 p. : il.

Orientador: Prof. Dr. Electo Eduardo Silva Lora.

Coorientador: Prof. Dr. Rubenildo Vieira Andrade.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Itajubá.

1. Gaseificação. 2. Leito fixo. 3. Co-corrente. 4. Motor de combustão interna de ignição por centelha. 5. Modelagem matemática. I. Lora, Electo Eduardo Silva, orient. II. Andrade, Rubenildo Vieira, coorient. III. Universidade Federal de Itajubá. IV. Título.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
INSTITUTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Avaliação do Desempenho de um Sistema Integrado
Motor Ciclo Otto/Gaseificador Co-corrente
Utilizando Modelagem Matemática

Autor: **Felipe Orlando Centeno González**

Orientador: **Prof. Dr. Electo Eduardo Silva Lora**

Co-orientador: **Prof. Dr. Rubenildo Vieira Andrade**

Composição da Banca Examinadora:

Prof. Dr. Caio Glauco Sanchez - DETF/FEM/UNICAMP

Prof. Dr. Vladimir Melian Cobas – IEM/UNIFEI

Prof. Dr. Rubenildo Vieira Andrade - NEST/IEM/UNIFEI

Prof. Dr. Electo Eduardo Silva Lora, Presidente - IEM/UNIFEI

Dedicatória

A todos meus familiares e amigos.

Agradecimentos

Ao meu Orientador, Prof. Dr. Electo Eduardo Silva Lora e ao meu Co-orientador, Prof. Dr. Rubenildo Vieira Andrade, pela competência, dedicação, paciência e amizade.

Ao Prof. Dr. René Lesme Jaén, da Universidade de Oriente (Cuba) pela colaboração e amizade.

Ao Prof. Dr. Khamid Mahkamov, de University of Durham (Reino unido) pela colaboração na modelagem do motor de combustão interna, pela competência, dedicação, paciência e amizade.

Ao Prof. Dr. Caio Glauco Sanchez da Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) e ou Prof. Dr. Vladimir Melian Cobas da Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI), membros da banca examinadora, pelas suas revisões, comentários e sugestões.

À Prof. Dra. Donna L. Giltrap, pela sua boa disposição para esclarecer dúvidas relativas à sua tese de doutorado de Massey University (Nova Zelândia).

A todos meus colegas do Núcleo de Excelência em Geração Termelétrica e Distribuída - NEST, pelo seu apoio e acompanhamento, também aos funcionários da biblioteca Mauá (UNIFEI) pelo seu enorme apoio na aquisição de material bibliotecário externo.

Ao Instituto de Engenharia Mecânica da UNIFEI, representado pelos seus dedicados professores e funcionários, pela oportunidade que me concedeu na realização deste trabalho, e aos meus colegas alunos desse instituto, pelo convívio profissional.

Aos programas de bolsas da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG), pelo apoio financeiro.

Sonhe, busque e conquiste, só assim serás feliz na Vida.

Resumo

CENTENO, G. F. O. (2010), *Avaliação Do Desempenho de um Sistema Integrado Motor Ciclo Otto/Gaseificador Co-corrente Utilizando Modelagem Matemática*, dissertação Mestrado em Engenharia Mecânica, IEM Universidade Federal de Itajubá, 166 p.

Apresenta-se um modelo matemático para avaliação do desempenho de um sistema integrado motor ciclo Otto/gaseificador de biomassa leito fixo co-corrente. Para tal fim tem-se criado um modelo matemático de três zonas (secagem - pirólise, oxidação e redução) para o gaseificador, o qual foi validado com dados experimentais reportados na literatura, também se tem modificado um modelo matemático de motor ciclo Otto para que possa aceitar como combustível gás de biomassa seco, composto de CO, CH₄, CO₂, H₂ e N₂; o modelo foi solucionado utilizando o software comercial Matlab[®]. Observou-se mediante simulação com o modelo que o poder calorífico do gás de biomassa aumenta com a diminuição do fator de ar (na faixa entre 0,25 e 0,40) e com o aumento de umidade para baixos conteúdos desta última. O modelo do conjunto também mostra que na operação do motor usando gás de biomassa como combustível pode-se obter entre 60 e 65% da potência que seria obtida na operação com gasolina.

Palavras-chave

Gaseificação, leito fixo, co-corrente, motor de combustão interna de ignição por centelha, modelagem matemática.

Abstract

CENTENO, G. F. O. (2010), *Performance Evaluation of Integrated spark engine / downdraft gasifier by Mathematical Modeling*, disertation Master in Mechanical Engineering, IEM Universidade Federal de Itajubá, 166 p.

It is present a mathematical model to evaluate the performance of the integrated internal combustion engine cycle Otto / downdraft fixed bed biomass gasifier. To this end it has established a mathematical model of three zones (drying - pyrolysis, oxidation and reduction) for the gasifier, which was validated with experimental data reported in literature, also a mathematical model of the Otto cycle engine has been modified to accept dry produced gas which has been considered composed of CO, CH₄, CO₂, H₂ and N₂; the model was solved using the commercial software Matlab©. By simulation of the model it was observed that the calorific value of produced gas increases with decreasing air factors and the increase moisture (for low content of the moisture). The model also shows that the operation of the engine using synthesis gas as fuel can be obtained between 60 and 65% of the power that would be obtained when operating with gasoline.

Keywords

Gasification, fixed bed, downdraft, spark engine, mathematical modelling.

Sumário

DEDICATÓRIA	I
AGRADECIMENTOS	II
RESUMO	V
ABSTRACT	VI
SUMÁRIO	VII
LISTA DE FIGURAS	XII
LISTA DE TABELAS	XIV
SIMBOLOGIA	XVI
LETRAS LATINAS	XVI
LETRAS GREGAS	XIX
SOBRESCRITOS	XIX
SUBSCRITOS	XX
ABREVIATURAS	XX
SIGLAS	XXI
CAPÍTULO 1	1
INTRODUÇÃO	1
1.1 MOTIVAÇÃO	1
1.2 OBJETIVOS	3
1.2.1 Objetivo Geral	3
1.2.2 Objetivos Específicos	3
1.3 CONTEÚDO	4
CAPÍTULO 2	6

ESTADO DA ARTE	6
2.1 BIOMASSA	6
2.1.1 BIOMASSA COMO FONTE DE ENERGIA	6
2.1.2 TIPOS DE BIOMASSA	7
2.1.3 CARACTERIZAÇÃO DA BIOMASSA	8
2.1.3.1 Composição Imediata	9
2.1.3.2 Composição Elementar	11
2.1.3.3 Poder Calorífico	15
2.1.3.4 Características de Fusão das Cinzas	16
2.1.4 BENEFÍCIOS DO USO DA BIOMASSA PARA ENERGIA	17
2.1.5 CUIDADOS DO USO DA BIOMASSA PARA ENERGIA	18
2.2 GASEIFICAÇÃO	18
2.2.1 GENERALIDADES	18
2.2.2 TIPOS DE GASEIFICADORES	21
2.2.2.1 Gaseificação em Reator de Leito Fixo	21
2.2.2.2 Gaseificação em Reator de Leito Fluidizado	25
2.2.2.3 Gaseificação em Reator de Leito Arrastado	27
2.3 REVISÃO BIBLIOGRAFICA DA MODELAGEM DE GASEIFICADORES LEITO FIXO CO-CORRENTES	29
CAPÍTULO 3	33
MODELO MATEMÁTICO DE REGIME PERMANENTE PARA UM GASEIFICADOR DE BIOMASSA TIPO LEITO FIXO CO-CORRENTE	33
3.1 DESCRIÇÃO FÍSICA DO MODELO	33
3.2 CÁLCULOS PRELIMINARES	35
3.2.1 Cálculo da Fórmula Simplificada da Molécula de Biomassa Seca	35
3.2.2 Cálculo do Coeficiente de Umidade da Biomassa	38
3.2.3 Cálculo da Entalpia de Formação da Biomassa	39
3.2.4 Cálculos do Fator de Ar ϕ , Relação Equivalente φ e Relação Ar Combustível <i>AFr</i> .	40
3.2.5 Cálculo das Concentrações dos Gases	42
3.2.6 Cálculo da Massa Específica do Ar	42
3.2.7 Cálculo da Massa Específica do Gás	43
3.3 SUBMODELO SECAGEM-PIRÓLISE	43

3.3.1 Reação Estequiométrica-----	43
3.3.2 Balanço Atômico-----	43
3.3.3 Suposições -----	44
3.3.4 Resolução do Balanço Atômico-----	45
3.3.5 Balanço de Energia para do Submodelo da Zona Secagem-Pirólise -----	47
3.4 SUBMODELO OXIDAÇÃO -----	48
3.4.1 Reação Estequiométrica-----	48
3.4.2 Balanço Atômico-----	49
3.4.3 Suposições -----	49
3.4.4 Balanço de Energia para o Submodelo da Zona de Oxidação-----	55
3.5 SUBMODELO REDUÇÃO-----	56
3.6 VALIDAÇÃO DO MODELO DO GASEIFICADOR -----	58
3.7 EVOLUÇÃO DAS CONCENTRAÇÕES DAS ESPECIES NO GÁS DE BIOMASSA NA ZONA DE REDUÇÃO -----	64
CAPITULO 4 _____	65
MODELO MATEMÁTICO DO MOTOR DE COMBUSTÃO INTERNA, ALTERNATIVO DE IGNIÇÃO POR CENTELHA _____	65
4.1 FORMULAÇÃO GERAL DO MODELO -----	67
4.2 PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO COMBUSTÍVEL -----	69
4.3 FUNCIONAMENTO DOS CÓDIGOS DO MODELO -----	74
4.4 VALIDAÇÃO DO MODELO DO MOTOR -----	76
CAPÍTULO 5 _____	78
RESULTADOS E DISCUSSÕES _____	78
5.1 EVOLUÇÃO DA TEMPERATURA DOS GASES E O FLUXO DE CALOR NO MOTOR EM RELAÇÃO AO ÂNGULO DA DA MANIVELA -----	79
5.2 EVOLUÇÃO DA PRESSÃO NO INTERIOR E O TRABALHO DO MOTOR COM RELAÇÃO AO ÂNGULO DA MANIVELA -----	81
5.3 POTÊNCIA INDICADA COM RELAÇÃO À VELOCIDADE DE ROTAÇÃO DO MOTOR-----	83
5.4 POTÊNCIA INDICADA COM RELAÇÃO À QUANTIDADE DE AR FORNECIDO AO MOTOR-----	85

5.5 POTÊNCIA INDICADA COM RELAÇÃO A O ÂNGULO DE INÍCIO DA QUEIMA -----	86
5.6 POTÊNCIA INDICADA CONTRA RELAÇÃO DE COMPRESSÃO DO MOTOR	88
5.7 PODER CALORÍFICO INFERIOR DO GÁS DE BIOMASSA CONTRA FATOR DE AR DO GASEIFICADOR E UMIDADE DA BIOMASSA -----	90
5.8 POTÊNCIA INDICADA DO MOTOR COM RELAÇÃO AO FATOR DE AR DO GASEIFICADOR E UMIDADE DA BIOMASSA -----	92
CAPÍTULO 6 _____	93
CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS _____	93
6.1 CONCLUSÕES -----	93
6.2 RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS -----	94
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS _____	95
APÊNDICE A _____	104
CÓDIGOS DA PROGRAMAÇÃO DO GASEIFICADOR EM MATLAB _____	104
A.1 gaseificador.m -----	104
A.2 reducao.m -----	114
APÊNDICE B _____	118
CÓDIGOS DA PROGRAMAÇÃO DO MOTOR EM MATLAB _____	118
B.1 ahrind.m -----	118
B.3 calcq.m -----	126
B.4 ecp.m -----	128
B.5 enginedata.m -----	134
B.6 farg.m -----	136
B.7 fueldata.m -----	139
B.8 plotresults.m -----	146
B.9 RatesComb.m -----	149
B.10 RatesComp.m -----	151
B.11 RatesExp.m -----	153
B.12 Tadiabatic.m -----	155
ANEXO A _____	157
TABELAS TERMODINÂMICAS _____	157
A.1 Água -----	158

A.2 Dióxido de Carbono -----	159
A.3 Hidrogênio -----	160
A.4 Metano-----	161
A.5 Monóxido de Carbono-----	162
A.6 Nitrogênio-----	163
A.7 Oxigênio-----	164

Lista de Figuras

Figura 1- Relação entre a composição elementar e imediata de um combustível (Adaptado de: Cortez <i>et al.</i> , 2008) -----	11
Figura 2 - Gaseificador de leito fixo de fluxo cruzado. Adaptado de: Ming (2009). -----	23
Figura 3 - Gaseificador de leito fixo contra corrente. Adaptado de: Ming (2009).-----	24
Figura 4 - Gaseificador de leito fixo co-corrente. Adaptado de: Ming (2009). -----	25
Figura 5 - Gaseificador de leito fluidizado borbulhante. Adaptado de: Ming (2009). -----	26
Figura 6 - Gaseificador de leito fluidizado circulante. Adaptado de: Ming (2009). -----	27
Figura 7 - Gaseificador de leito arrastado com alimentação superior. -----	28
Figura 8 - Esquema geral do modelo-----	34
Figura 9 - Gráfico de barras das concentrações no gás.-----	59
Figura 10 - Comparação perfil (evolução com a altura z) de temperaturas na zona de redução.60	
Figura 11 - Comparação de concentrações com vários modelos e resultados experimentais--	61
Figura 12 - Concentrações das espécies na zona de redução. -----	64
Figura 13 - Geometria básica do motor. -----	66
Figura 14 - Ciclo Otto de quatro tempos. -----	66
Figura 15 - Comparação das potências eléctricas medidas por Martinez (2009) contra as potências eléctricas previstas pelo modelo.-----	77
Figura 16 - Temperatura v.s. ângulo da manivela. -----	79
Figura 17 - Fluxo de calor v.s. ângulo da manivela. -----	80
Figura 18 - Transferência de calor v.s. ângulo da manivela. -----	81
Figura 19 - Pressao v.s. ângulo da manivela. -----	82
Figura 20 - Trabalho v.s. ângulo da manivela. -----	83
Figura 21 - Variação da potência com relação à rotação do motor. -----	84

Figura 22 - Variação da potência indicada em relação com a relação de ar-----	86
Figura 23 - Potência Indicada v.s. Ângulo de Início da Combustão (1800 rpm)-----	87
Figura 24 - Potência Indicada v.s. Relação de compressão.-----	89
Figura 25 - Variação do poder calorífico inferior com o fator de ar do gaseificador e a umidade da biomassa.-----	90
Figura 26 - Variação da potência indicada no motor com o fator de ar do gaseificador e a umidade da biomassa.-----	92

Lista de Tabelas

Tabela 1 - Composição imediata de algumas biomassas fornecidas pela literatura -----	10
Tabela 2 - Expressões para o cálculo da composição elementar para modificação da base (Cortez <i>et al.</i> , 2008) -----	13
Tabela 3 - Composição elementar de algumas biomassas fornecidas pela literatura -----	14
Tabela 4 - Poder calorífico superior de alguns tipos de biomassa. -----	16
Tabela 5 - Temperatura de fusão das cinzas de madeira e casca. -----	17
Tabela 6 - Processos básicos da gaseificação. -----	19
Tabela 7 - Fator de frequência e energia de ativação -----	57
Tabela 8 - Composição imediata da Seringueira (“ <i>Hevea Brasiliensis</i> ”). -----	58
Tabela 9 - Composição elementar da Seringueira (“ <i>Hevea Brasiliensis</i> ”). -----	58
Tabela 10 - Comparação das concentrações experimentais de Jayah (2003) contra as concentrações preditas pelo modelo do NEST na saída do reator em base seca. -----	59
Tabela 11 - Composição imediata da biomassa utilizada (Casca de <i>Pseudotsuga</i>). -----	60
Tabela 12 - Composição elementar da biomassa utilizada (Casca de <i>Pseudotsuga</i>). -----	60
Tabela 13 - Parâmetros usados durante o processo de gaseificação-----	61
Tabela 14 - Comparação das concentrações experimentais de Martínez (2009) contra as concentrações preditas pelo modelo do NEST. -----	62
Tabela 15 - Composição imediata da lenha de Eucalipto. -----	62
Tabela 16 - Composição elementar da lenha de Eucalipto -----	62
Tabela 17 - Valores de referencia para entalpia e entropia de alguns combustíveis. -----	70
Tabela 18 - Descrição dos arquivos de programação em Matlab do modelo do motor-----	75
Tabela 19 – Comparação das potências eléctricas medidas por Martinez (2009) contra as potências eléctricas preditas pelo modelo.-----	76

Tabela 20 - Parâmetros geométricos usados na simulação -----	78
Tabela 21 - parâmetros de operação do motor para simular <i>Pind v. s. RPM</i> -----	84
Tabela 22 - Parâmetros de operação do motor para simular <i>Pind v. s. phi</i> -----	85
Tabela 23 - Parâmetros de operação do motor para simular <i>Pind v. s. thetas</i> -----	87
Tabela 24 - Parâmetros de operação do motor para simular <i>Pind v. s. r</i> -----	88
Tabela 25 - Resultados experimentais de Jayah, Aye et al. (2003) ordenados para relação ar-combustível ascendente. -----	91

Simbologia

Letras Latinas

a	Moles de oxigênio no ar ingressando ao reator	mol
a_t	Moles de ar teóricos	mol
A	Área de seção transversal	m^2
A^a	Conteúdo de cinzas em base analítica	%
A^s	Conteúdo de cinzas em base seca	%
A^t	Conteúdo de cinzas em base de trabalho	%
A_i	Fator de frequência da reação i	
AF_r	Relação Ar Combustível	
C^a	Conteúdo de carbono em base analítica	%
C^c	Conteúdo de carbono em base combustível	%
C^s	Conteúdo de carbono em base seca	%
C^t	Conteúdo de carbono em base de trabalho	%
CRF	Fator de reatividade do carvão	
c_x	Capacidade calorífica molar da espécie x	$J \text{ mol}^{-1} K^{-1}$
E_i	Energia de ativação da reação i	$J \cdot \text{mol}^{-1}$

F^a	Carbono fixo em base analítica	%
F^s	Carbono fixo em base seca	%
F^t	Carbono fixo em base de trabalho	%
FA_{estq}	Relação combustível ar estequiométrica	
FA_{real}	Relação combustível ar real	
H^a	Conteúdo de hidrogênio em base analítica	%
H^c	Conteúdo de hidrogênio em base combustível	%
H^s	Conteúdo de hidrogênio em base seca	%
H^t	Conteúdo de hidrogênio em base de trabalho	%
\bar{h}_{comb}	Entalpia de combustão	kJ/mol
\bar{h}_e	Entalpia dos produtos da combustão	kJ/mol
\bar{h}_{fb}	Entalpia de formação da biomassa	kJ/mol
\bar{h}_i	Entalpia dos reagentes da combustão	kJ/mol
\overline{HHV}_b	Poder calorífico superior da biomassa	kJ/mol
K_i	Constante de equilíbrio da reação i	
\dot{m}_a	Fluxo mássico de ar	kg/s
\dot{m}_f	Fluxo mássico de combustível	kg/s
M_{ar}	Peso molecular do ar	g/mol
n	Concentração molar de todas as espécies gasosas	$mol \cdot m^{-3}$
n_e	Moles dos produtos	mol
n_i	Moles dos reagentes	mol
N^a	Conteúdo de nitrogênio em base analítica	%
N^c	Conteúdo de nitrogênio em base combustível	%
N^s	Conteúdo de nitrogênio em base seca	%
N^t	Conteúdo de nitrogênio em base de trabalho	%
n_{ox_i}	Número de moles da espécie i produzidos na zona de oxidação	mol
n_{p_i}	Número de moles da espécie i produzidos na zona de pirólise	mol
n_x	Concentração molar da espécie x	$mol \cdot m^{-3}$
w	Moles de água na biomassa por mol de carbono na biomassa	mol
O^a	Conteúdo de oxigênio em base analítica	%
O^c	Conteúdo de oxigênio em base combustível	%
O^s	Conteúdo de oxigênio em base seca	%

O^t	Conteúdo de oxigênio em base de trabalho	%
P	Pressão total	Pa
P_i	Pressão parcial da espécie i	Pa
P_x	Pressão parcial da espécie x	Pa
PCI	Poder calorífico inferior	kJ/kg
PCS	Poder calorífico superior	kJ/kg
Q_p	Calor perdido na zona de pirólise do reator	kJ
Q_{ox}	Calor perdido na zona de oxidação	kJ
r_i	Velocidade da reação i	$mol\ m^{-3}\ s^{-1}$
R	Constante dos gases	$J\ mol^{-1}\ K^{-1}$
R_x	Velocidade neta de criação da espécie x	$mol\ m^{-3}\ s^{-1}$
S^a	Conteúdo de enxofre em base analítica	%
S^c	Conteúdo de enxofre em base combustível	%
S^s	Conteúdo de enxofre em base seca	%
S^t	Conteúdo de enxofre em base de trabalho	%
T	Temperatura	K
v	Velocidade do gás	$m\ s^{-1}$
V^a	Matéria volátil em base analítica	%
V^s	Matéria volátil em base seca	%
V^t	Matéria volátil em base de trabalho	%
W^a	Umidade em base analítica	%
W^{ext}	Umidade externa	%
W^t	Umidade em base de trabalho	%
$\overline{\Delta h}_{f_{ox,x}}$	Entalpia da espécie x na temperatura de oxidação	$kJ\ mol^{-1}$
$\overline{\Delta h}_{f_{p,x}}$	Entalpia da espécie x na temperatura da pirólise	$kJ\ mol^{-1}$

Letras Gregas

Δ	Incremento de alguma variável	
ρ_{air}	Massa específica do ar	$kg \cdot m^{-3}$
ρ_{ar}	Massa específica do ar	$kg \cdot m^{-3}$
ρ_{gas}	Massa específica do gás	$kg \cdot m^{-3}$
\emptyset	Fator de Ar	
φ	Relação equivalente	

Sobrescritos

a	Base analítica
c	Base combustível
s	Base seca
t	Base de trabalho

Subscritos

<i>bH</i>	Moles de hidrogênio totais por mol de carbono na biomassa.
<i>bnvC</i>	Moles de carbono não volátil na biomassa por mol de carbono total.
<i>bO</i>	Moles de oxigênio totais por mol de carbono na biomassa.
<i>bvC</i>	Moles de carbono volátil por moles de biomassa.
<i>bvH</i>	Moles de hidrogênio voláteis por mol de carbono na biomassa
<i>bvO</i>	Moles de oxigênio voláteis por mol de carbono na biomassa
<i>estq</i>	Estequiométrica
<i>real</i>	Real

Abreviaturas

<i>Tab.</i>	Tabela
<i>Fig.</i>	Figura
<i>estq</i>	Estequiométrica

Siglas

<i>IPCC</i>	Intergovernmental Panel on Climate Change.
<i>NEST</i>	Núcleo de exigência em geração termelétrica e distribuída.
<i>UNIFEI</i>	Universidade Federal de Itajubá
<i>IEM</i>	Instituto de Engenharia Mecânica
<i>UNICAMP</i>	Universidade Estadual de Campinas

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

1.1 MOTIVAÇÃO

Para conseguir o objetivo de reduzir as emissões que contribuem para o efeito estufa, é necessária a busca de novas alternativas de energias limpas. Entre as fontes de energia renováveis encontra-se a biomassa. A qual se pode definir como toda matéria orgânica que se originou em um processo biológico, espontâneo ou provocado, e que pode ser utilizada como uma fonte de energia. Existem processos termoquímicos que convertem a energia química da biomassa em energia térmica. Dentro destes processos estão a combustão e a gaseificação.

A gaseificação é um processo termoquímico no qual um substrato com alto teor de carbono (por exemplo: carvões, biomassa, plásticos, etc.) é transformado em um gás combustível por uma série de reações que ocorrem na presença de um agente gaseificador (ar, oxigênio ou vapor de água). A composição do gás é muito dependente das condições nas quais se realiza a gaseificação. O material de alimentação e o fluido gaseificador são os parâmetros que determinam se o conteúdo de energia do gás (poder calorífico) é maior ou menor. A gaseificação ocorre dentro de um reator chamado gaseificador e este pode ser de tipos diferentes (leito fixo, leito fluidizado, leito arrastado, etc.).

Uma grande vantagem da gaseificação de biomassa em comparação com a combustão direta, é que o gás combustível produzido pode ser usado para alimentar motores de combustão interna, e o motor pode ser usado para geração de energia ou como energia mecânica para outra aplicação. Quando o gás da gasificação vai ser utilizado como combustível para um motor de combustão interna é aconselhável o uso de um gaseificador leito fixo co-corrente, devido a sua configuração que levar menor quantidade de alcatrão junto com o gás, o que é desejável para a proteção do motor (Andrade, 2007; Visagie, 2009).

O uso do gás de biomassa como combustível para motores de combustão interna é uma tecnologia que se tem utilizado durante mais de um século. Os motores de ignição por centelha, normalmente alimentados com gasolina são capazes de funcionar alimentando unicamente com gás pobre. Os motores a Diesel podem ser adaptados para funcionar com gás pobre reduzindo o índice de compressão (quando for necessário para evitar autoignição descontrolada do gás) e instalando um sistema de ignição por centelha (Fao, 1986).

Uma vez que a eficiência de um motor de combustão interna depende, especificamente, da qualidade do combustível fornecido (gás neste caso), da geometria e de alguns outros parâmetros de operação do motor, e ainda que a qualidade do gás de gaseificação dependa de alguns parâmetros do gaseificador (fator de ar, geometria do reator, características da biomassa, etc.), é desejável a construção de um modelo matemático que permita aperfeiçoar a operação do conjunto gaseificador co-corrente / motor de combustão interna.

1.2 OBJETIVOS

1.2.1 Objetivo Geral

- Avaliar o desempenho da operação integrada de um motor de combustão interna de ignição por centelha, acoplado a um gaseificador leito fixo co-corrente utilizando como ferramenta a modelagem matemática.

1.2.2 Objetivos Específicos

- Formular um modelo matemático para um gaseificador de leito fixo co-corrente operando em estado estacionário.
- Validar o modelo matemático proposto para o gaseificador de leito fixo co-corrente, mediante comparação dos dados do mesmo com resultados experimentais e de outros modelos.
- Formular um modelo matemático para um motor de combustão interna de ignição por centelha, alimentado com gás de biomassa.
- Validar o modelo matemático proposto para o motor, mediante comparação dos dados do mesmo com resultados experimentais.
- Realizar um estudo paramétrico verificando o comportamento da potência do motor com relação a alguns parâmetros do conjunto.

1.3 CONTEÚDO

No capítulo 1 é realizada uma introdução da temática, fala-se sobre a biomassa como fonte de energia, são descritos diversos tipos e fontes de biomassa, também apresenta uma descrição das diferentes análises para caracterizar a biomassa os quais são fundamentais na hora de modelar matematicamente o processo de gaseificação em reator de leito fixo co-corrente. As descrições das análises são complementadas com as respectivas referencias para as normas ASTM onde se detalham os métodos. Também são apresentados alguns dos benefícios e os cuidados para levar em conta na hora da utilização da biomassa com fins energéticos. Além disso é introduzida a gaseificação, mostrando as generalidades do processo, assim com também diferentes tipos de gaseificadores disponíveis mostrando características, vantagens e desvantagens com relação a outros tipos de reatores. Fianalmente é realizada uma revisão dos modelos matemáticos para gaseificadores de leito fixos co-correntes publicados na literatura. É mostrado em ordem cronológica a evolução dos modelos e cada um dos aportes mais significativos que cada um deles representa na temática.

O capítulo 2 apresenta um modelo matemático de regime permanente para gaseificadores de biomassa tipo leito fixo co-corrente, iniciando com a descrição física do modelo, seguindo com alguns cálculos preliminares necessários no início do modelo e detalhando logo cada uma das três etapas do modelo (secagem-pirólise, oxidação e redução). No final do capítulo se apresenta a validação do modelo a qual foi feita por comparação com dados experimentais e dados de outros modelos tomados da literatura.

No capítulo 3 descreve-se o modelo matemático escolhido para simular o motor de combustão interna, alternativo (ciclo Otto), se apresenta a formulação geral do modelo, se detalha a modificação feita no mesmo para funcionamento com gás de biomassa e finalmente se descreve a função de cada um dos arquivos da programação. No final do capítulo se apresenta a validação do modelo a qual foi feita por comparação com dados experimentais tomados por Martinez (2009) no laboratório do Nucleo de excelência em geração termelétrica e distribuída NEST da Universidade Federal de Itajubá.

No capítulo 4 são apresentados resultados de simulações do modelo (gaseificador - motor) e apresentadas discussões com base nas simulações.

O capítulo 5 finalmente apresenta as conclusões e recomendações para trabalhos futuros.

Capítulo 2

ESTADO DA ARTE

2.1 BIOMASSA

2.1.1 BIOMASSA COMO FONTE DE ENERGIA

A biomassa pode ser definida como a matéria orgânica que se originou em um processo biológico, espontâneo ou induzido, utilizável como uma fonte de energia (Adaptado da Real Academia Espanhola). A biomassa pode ser considerada como uma fonte indireta de energia solar, já que é resultado da conversão da energia solar em energia química através da fotossíntese, base dos processos biológicos dos organismos chamados fotoautotróficos, incluindo as plantas. Uma vantagem da biomassa é que a energia química que é armazenada como matéria orgânica, pode ser recuperada pela queima diretamente em fornos, queimadores e / ou caldeiras, transformá-la em gás combustível em gaseificadores ou então em combustível líquido com outros processos.

O uso da biomassa ou de seus derivados pode ser considerado neutro em termos de emissões líquidas de dióxido de carbono (CO₂), quando é usado apenas em quantidades, no máximo, igual à produção líquida de biomassa do ecossistema aproveitado. Como é o caso da

utilização tradicional (uso de aparas de jardim, com fogões de lenha, fogões de esterco, etc.) se não excede a capacidade do território. Além disso, a biomassa pode ser queimada, sem emitir grandes quantidades de óxidos de nitrogênio (NOx). Ainda mais, o teor de enxofre da biomassa é baixo e, portanto, também produz menores emissões de dióxido de enxofre (SO₂), especialmente quando é comparado com as emissões provenientes da queima de carvão mineral (Quaak *et al.*, 1999).

A biomassa oferece vantagens importantes como matéria-prima em sistemas de gaseificação e/ou combustão devido a sua alta volatilidade e alta reatividade (Demirbas, A, 2004). No entanto, convém notar que, em comparação com os combustíveis fósseis sólidos, a biomassa contém muito menos carbono e mais oxigênio, e portanto um menor poder calorífico.

Atualmente, a biomassa está sendo amplamente utilizada na geração de eletricidade, especialmente em sistemas de co-geração e no fornecimento de energia elétrica para comunidades isoladas da rede elétrica principal.

2.1.2 TIPOS DE BIOMASSA

À primeira vista, as árvores podem ser cortadas em tamanhos adequados para uso como combustível, mas às vezes a madeira é valiosa demais para ser queimada, por exemplo, a indústria da madeira poderia fazer melhor uso na sua utilização como material de construção. Verdadeiros resíduos como cascas, serragem, peças de sucata velha ou cortes são normalmente mais econômicos para uso como combustível. Também grande parte da madeira utilizada para a construção, torna-se então resíduo, esta tendência é maior em países industrializados, onde essa madeira pode ser obtida mais barata ou até mesmo as indústrias pagam pelo descarte dessa madeira. Infelizmente, este pode conter outros resíduos indesejáveis, tais como tintas, aço ou plástico, entre outros.

Muitos resíduos agrícolas também podem ser usados como combustíveis. Entre eles, pode-se mencionar a palha, as cascas de alguns produtos, troncos, bagaço de cana, sementes. Além disso, a utilização da biomassa como combustível poderia resolver os problemas ambientais relativos à eliminação destes. Indiretamente, o potencial de utilização destes

resíduos como fonte de energia pode criar incentivos para o cultivo de produtos que agora são pouco rentáveis.

Devido ao crescente interesse na utilização da biomassa para produção de energia há recentemente uma tendência a considerar a possibilidade de utilização de cultivo de biomassa apenas para energia (esta tendência é conhecida como cultivo de energia ou *energy cropping*). Podem ser encontrados na literatura vários estudos (Clair *et al.*, 2008; Heaton *et al.*, 2008; Paine *et al.*, 1996; Ranney e Mann, 1994) sobre as implicações econômicas e ambientais desta tendência.

2.1.3 CARACTERIZAÇÃO DA BIOMASSA

A caracterização da biomassa deve estar em correspondência com seu uso, fornecendo informações importantes sobre as propriedades, especiais para cada aplicação. As fases de análise, modelagem, simulação ou projeto de uso específico de biomassa para fins energéticos requer o conhecimento das propriedades desta (Sanchez, 1994). Neste estudo se ilustram as características da biomassa mais relevantes para processos termoquímicos, tais como a combustão e gaseificação.

Análise e modelagem de processos termoquímicos da biomassa exigem o conhecimento adequado da suas propriedades. Além disso, modelos computacionais detalhados exigem valores precisos das propriedades.

As propriedades da biomassa podem ser agrupadas em físicas, químicas, térmicas e propriedades minerais. Além disso, deve-se fazer uma distinção entre as propriedades da casca e propriedades da madeira (Ragland *et al.*, 1991a).

Os valores das propriedades físicas variam amplamente e as propriedades tais como massa específica, porosidade e superfície interna, são específicas para cada tipo de biomassa considerando a sua massa específica aparente; por outro lado o tamanho de partícula e a distribuição de forma dependem dos métodos de preparação do combustível.

Entre as propriedades químicas importantes dos processos termoquímicos da biomassa estão à análise da composição elementar, a análise da composição imediata e análise dos produtos da pirólise.

Os valores das propriedades térmicas, tais como calor específico, condutividade térmica, emissividade, poder calorífico variam de acordo com teor de umidade, temperatura e grau de degradação térmica, numa ordem de grandeza (Ragland *et al.*, 1991a). Outras propriedades térmicas são o calor da pirólise, o poder calorífico dos voláteis e do carvão.

Existem na literatura várias compilações sistemáticas de propriedades dos diferentes tipos de biomassa (Demirbas, A., 2004; Ragland *et al.*, 1991a) os quais podem ajudar na análise de engenharia e modelagem de sistema de conversão termoquímica da biomassa. No entanto, devido a variações nas propriedades acima mencionadas, deve-se destacar a necessidade de um estudo específico de propriedades para cada aplicação (Sánchez, 1994).

2.1.3.1 Composição Imediata

A composição imediata é um conjunto de testes pelo qual se determina a umidade (W), voláteis (V), cinzas (A) e carbono fixo (F) de uma amostra de combustível sólido. As normas ASTM (a partir do D-3172 até D-3175) detalham o processo de carvão e coque, e pode-se seguir um processo semelhante para a biomassa.

Em resumo, pode-se dizer que a primeira avaliação é a umidade, o que ocorre em uma estufa (ver ASTM D-3173). Neste estudo as amostras são secadas em uma estufa com circulação de ar natural a temperaturas entre 104°C e 110°C até que não ocorra mais mudança de peso. O tempo de secagem pode ser de algumas horas para amostras pequenas até 48 horas para alguns madeiras e frutos (Sánchez, 1994).

Os voláteis desempenham um papel importante durante as fases iniciais de ignição e combustão de qualquer combustível sólido (Cortez *et al.*, 2008). A fração volátil é determinada pelo aquecimento da amostra em um "cadinho coberto" por 6 minutos a uma temperatura de 950°C, de acordo com a norma ASTM D-3175.

A quantidade de cinzas é determinada pelo aquecimento da amostra a 750°C por duas horas ou para amostras ainda mais sensíveis a 600°C, de acordo com a norma ASTM D-3174.

O carbono fixo é determinado pela diferença (ASTM D-3172).

A Tabela 1 apresenta a composição imediata para algumas biomassas determinadas por diferentes autores.

Tabela 1 - Composição imediata de algumas biomassas fornecidas pela literatura

Tipo de biomassa	Composição imediata			Referência
	Voláteis (% b.s.)	Cinzas (% b.s.)	Carbono fixo (% b.s.)	
Bagaço de cana	73,78	11,27	14,95	(Jenkis, 1990)
Caroço de milho	87,4	1,1	11,5	(Demirbas, 2004)
Casca de amêndoa	74,0	3,3	22,7	(Demirbas, 2004)
Casca de arroz	65,47	17,89	16,67	(Jenkis, 1990)
Casca de avelã	76,3	1,5	21,2	(Demirbas, 1997)
Casca de coco	67,95	8,25	23,80	(Jenkis, 1990)
Casca de girassol	76,2	4,0	19,8	(Demirbas, A, 2004)
Casca de madeira Faia	65,0	5,7	29,3	(Demirbas, 2004)
Casca verde-oliva	77,5	4,1	18,4	(Demirbas, 2004)
Eucalipto	81,42	0,79	17,82	(Jenkis, 1990)
Híbridos de milho	84,0	5,1	21,2	(Paul e Buchele, 1980)
Madeira de carvalho	77,6	0,5	21,9	(Demirbas, 2004)
Madeira Faia	82,5	0,5	17,0	(Demirbas, 2004)
Madeira Spruce	80,2	1,7	18,1	(Demirbas, 2004)
Casca de Noz	59,3	2,8	37,9	(Demirbas, 2004)
Palha de trigo	66,3	13,7	21,4	(Demirbas, 2004)
Pedúnculo de Alfafa	61,0	6,5	17,4	(Tillman, 2000)
Pínus	82,54	0,29	17,70	(Jenkis, 1990)
Ramas de algodão	73,29	5,51	21,20	(Jenkis, 1990)
Resíduos de algodão	81,0	6,6	12,4	(Demirbas, 2004)
Resíduos de chá	85,5	1,5	13,0	(Demirbas, 2004)
Resíduos de Oliva	66,1	9,2	24,7	(Demirbas, 2004)
Sabugo de milho	80,10	1,36	18,54	(Jenkis, 1990)
Sementes de colza	78,1	6,5	15,4	(Demirbas, 2004)

2.1.3.2 Composição Elementar

A composição da composição elementar de uma amostra de combustível sólido é resultado de uma série de ensaios que fornecem as frações em peso dos constituintes da amostra. Entre os elementos analisados estão carbono, oxigênio, hidrogênio, nitrogênio, enxofre e cloro, além da umidade.

A composição elementar é a característica técnica mais importante do combustível e fornece a base para a análise dos processos de conversão termoquímica, tais como a vazão de ar, gases, entalpia e a determinação do poder calorífico do combustível (Cortez *et al.*, 2008).

Os conteúdos de carbono, hidrogênio, nitrogênio, enxofre e cloro são determinados a partir da ASTM D-3176, a umidade, como na composição imediata, é determinada pela ASTM D-3173. O oxigênio é determinado pela diferença.

Como resultado da composição elementar fica um resíduo que também é considerado primeiramente como cinzas. Raramente, a proporção destes resíduos é igual à proporção de cinzas, determinado pela composição imediata devido a pequenos erros de diferença entre as duas técnicas, em qualquer caso, uma amostra com alto teor de cinzas tem um alto resíduo correspondente (Jenkis, 1990).

Na Figura 1 é apresentada, a relação entre a composição elementar e a composição imediata de qualquer combustível.

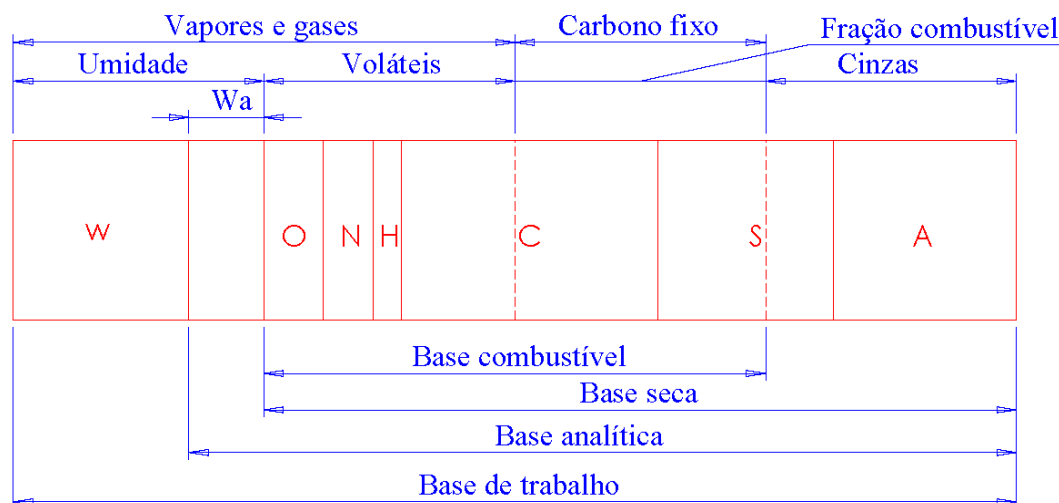


Figura 1- Relação entre a composição elementar e imediata de um combustível (Adaptado de: Cortez *et al.*, 2008)

Os dados da composição elementar e imediata dos diferentes tipos de combustíveis sólidos (incluindo biomassa) podem ser expressos dos seguintes modos:

Base de trabalho (como é usado: com umidade, cinzas, etc.)

$$C^t + H^t + O^t + N^t + S^t + A^t + W^t = 100\% \quad (1.1)$$

$$V^t + F^t + A^t + W^t = 100\% \quad (1.2)$$

Base analítica (Tal como o combustível é analisado, sem umidade externa W^{ext})

$$C^a + H^a + O^a + N^a + S^a + A^a + W^a = 100\% \quad (1.3)$$

$$V^a + F^a + A^a + W^a = 100\% \quad (1.4)$$

$$W^t = W^{ext} + W^a \quad (1.5)$$

A umidade externa W^{ext} é a que a amostra perde no trajeto ate o laboratório, só por estar exposta ao ambiente com menor umidade.

Base seca (Sem umidade)

$$C^s + H^s + O^s + N^s + S^s + A^s = 100\% \quad (1.6)$$

$$V^s + F^s + A^s = 100\% \quad (1.7)$$

Na literatura técnica, geralmente os dados de composição elementar e imediata se são apresentados em base seca, para torná-los de aplicação geral, independente da umidade. Embora se possa converter para outra base.

Base combustível (sem umidade e sem cinzas)

$$C^c + H^c + O^c + N^c + S^c = 100\% \quad (1.8)$$

$$V^c + F^c = 100\% \quad (1.9)$$

A Tabela 2 mostra as relações entre as diferentes bases. Note-se que para converter de base de trabalho para base analítica, só precisa assumir que a amostra está mudando seu conteúdo de umidade, ou seja, aplica-se o seguinte:

Para converter uma composição elementar e o poder calorífico em base de trabalho de W_1^t para W_2^t , multiplica-se por

$$\frac{100 - W_2^t}{100 - W_1^t}$$

E de A_1^t para A_2^t , multiplica-se por

$$\frac{100 - A_2^t}{100 - A_1^t}$$

Tabela 2 - Expressões para o cálculo da composição elementar para modificação da base
(Cortez *et al.*, 2008)

		Base do combustível que se deseja obter		
		Trabalho	Seca	Combustível
Base que se tem	Trabalho	1	$\frac{100}{100 - W^t}$	$\frac{100}{100 - W^t - A^t}$
	Seca	$\frac{100 - W^t}{100}$	1	$\frac{100}{100 - A^s}$
	Combustível	$\frac{100 - W^t - A^t}{100}$	$\frac{100 - A^s}{100}$	1

A Tabela 3 mostra uma compilação de composições elementares de diferentes tipos de biomassa tomados da literatura.

Tabela 3 - Composição elementar de algumas biomassas fornecidas pela literatura

Tipo de biomassa	Composição elementar (% b.s.)							Referência
	C	H	O	N	S	Cl	A	
Álamo	48,4	5,9	39,6	0,4	0,01	-	-	(Ebeling e Jenkins, 1985)
Algodão	42,8	5,4	35,0	1,4	0,5	-	-	(Lepori, 1980)
Bagaço de cana	44,80	5,35	39,55	0,38	0,01	-	9,79	(Jenkins, 1990)
Caroço de milho	49,0	5,4	44,5	0,5	0,2	-	-	(Demirbas, 2004)
Casca de amêndoa	47,8	6,0	41,5	1,1	0,06	0,1	-	(Demirbas, 2004)
Casca de arroz	40,96	4,30	35,86	0,40	0,02	-	18,34	(Jenkins, 1990)
Casca de avelã	52,8	5,6	42,6	1,4	0,04	-	-	(Demirbas, 1997)
Casca de coco	48,23	5,23	33,19	2,98	0,12	-	10,25	(Jenkins, 1990)
Casca de girassol	47,4	5,8	41,3	1,4	0,05	0,1	-	(Demirbas, 2004)
Casca de oliva	49,9	6,2	42,0	1,6	0,05	0,2	-	(Demirbas, 2004)
Eucalipto	49,00	5,87	43,97	0,30	0,01	-	0,72	(Jenkins, 1990)
Híbridos de milho	42,5	5,0	42,6	0,8	0,2	-	-	(Paul e Buchele, 1980)
Madeira de abeto	51,9	6,1	40,9	0,3	-	-	-	(Demirbas, 2004)
Madeira de carvalho vermelho	50,0	6,0	42,4	0,3	-	-	-	(Demirbas, 2004)
Madeira Faia	49,5	6,2	41,2	0,4	-	-	-	(Demirbas, A, 2004)
Casca de Noz	53,5	6,6	45,4	1,5	0,1	0,1	-	(Demirbas, 2004)
Palha de trigo	41,8	5,5	35,5	0,7	-	1,5	-	(Demirbas, 2004)
Pedúnculo Alfafa	45,4	5,8	36,5	2,1	0,09	-	-	(Tillman, 2000)
Pínus	49,25	5,99	44,36	0,06	0,03	-	0,3	(Jenkins, 1990)
Ramas de algodão	47,05	5,35	40,77	0,65	0,21	-	5,89	(Jenkins, 1990)
Resíduos de chá	48,0	5,5	44,0	0,5	0,06	0,1	-	(Demirbas, 2004)
Sabugo de milho	46,58	5,87	45,46	0,47	0,01	-	1,40	(Jenkins, 1990)
Semente de pêssego	53,0	5,9	39,1	0,3	0,05	-	-	(Ebeling e Jenkins, 1985)

2.1.3.3 Poder Calorífico

Antes de definir o Poder Calorífico, lembramos que a entalpia de combustão \bar{h}_{comb} de qualquer combustível é a diferença entre a entalpia dos produtos e a entalpia dos reagentes quando a combustão completa ocorre a uma dada temperatura e pressão:

$$\bar{h}_{comb} = \sum_{prod} n_e \bar{h}_e - \sum_{reac} n_i \bar{h}_i \quad (1.10)$$

Agora se pode dizer que o poder calorífico do combustível é um número positivo igual à magnitude da entalpia de combustão. Os dados tabulados são geralmente dados para condições normais de temperatura e pressão.

O poder calorífico e a quantidade de energia que uma unidade de massa de matéria pode liberar ao se produzir a reação química de oxidação (excluindo as reações nucleares, não químicas, de fusão nuclear, já que para elas é usada a fórmula $E=mc^2$).

O poder calorífico é a energia máxima que pode liberar a união química entre o combustível e o oxidante e é igual à energia que mantinha unidos os átomos nas moléculas de combustível, menos a energia utilizada na formação de novas moléculas nas matérias formadas na combustão (geralmente gases). A magnitude do poder calorífico pode variar conforme seja medida. Segundo a forma de fazer a medição utiliza-se a expressão poder calorífico superior (PCS) e poder calorífico inferior (PCI).

O poder calorífico superior: é a quantidade total de calor liberado na combustão completa de 1 kg de combustível quando o vapor de água proveniente da combustão é condensado e é quantificado, por conseguinte, é o calor desprendido nesta mudança de fase (líquido - vapor).

O poder calorífico inferior: é a quantidade total de calor liberado na combustão completa de 1 Kg de combustível sem contar a parte correspondente ou calor latente de vapor de água da combustão, já que não se produz mudança de fase, e se libera como vapor.

Quando existam dados suficientes de entalpias de formação de todos os reagentes e produtos, a entalpia de combustão poderá ser calculada diretamente por definição. Caso contrário, deve ser determinada experimentalmente, utilizando um calorímetro. Algumas das

normas ASTM para determinar o poder calorífico são: ASTM D3286-96, ASTM D2015-00, ASTM D5865 – 07, ASTM D5468 – 02, ASTM E711 - 87(2004). Além disso, ASTM E870 - 82(2006) “Standard Test Methods for Analysis of Wood Fuels” é uma boa coleção de métodos de análises da biomassa para energia.

A Tabela 4 mostra uma compilação de poderes caloríficos superior de algumas biomassas tomados da literatura.

Tabela 4 - Poder calorífico superior de alguns tipos de biomassa.

Tipo de Biomassa	PCS
	(MJ/kg)
Pínus	20,02
Eucalipto	19,42
Casca de arroz	16,14
Bagaço de cana	17,33
Casca de coco	19,04
Sabugo de milho	18,77
Ramas de algodão	18,26
Resíduos sólidos urbanos	19,87
Excrementos de gado	17,36

Fonte: (Jenkis, 1990)

2.1.3.4 Características de Fusão das Cinzas

A temperatura de fusão de cinzas, que é medida no laboratório de acordo com a norma ASTM D1857, é usada como um indicador da tendência de deposição dentro do reator.

A temperatura de fusão das cinzas é determinada misturando uma amostra de cinzas da composição imediata com uma solução de dextrin, para formar uma pasta dura que é pressionada em um pequeno molde em forma de cone. A temperatura do forno em que o cone é deformado primeiro é relatada como o início de fusão das cinzas. Além da temperatura de deformação inicial, também são relatados: a temperatura de amolecimento, temperatura hemisférica, e a temperatura do fluido. É utilizada tanto atmosfera oxidante (ar) como atmosfera de redução (60% CO e 40% CO₂). A madeira tem um alto ponto de fusão de cinzas em comparação com muitos carvões (Anon, 1972), o qual favorece o projeto de reatores para este tipo de biomassa. Entretanto, os testes detalhados são necessários para investigar incrustantes, escoria e aglomeração. A Tabela 5 mostra as características de fusão de cinzas de algumas biomassas.

Tabela 5 - Temperatura de fusão das cinzas de madeira e casca.

	Temperatura atmosfera de redução (°C)	Temperatura atmosfera de oxidação (°C)
Madeira		
Deformação inicial	1450 - 1515	-
Fluido	1500 - 1550	-
Casca de carvalho		
Deformação inicial	1477	1471
Amolecimento	1493	1499
Fluido	1504	1510
Casca de pinus		
Deformação inicial	1193	1210
Amolecimento	1226	1249
Fluido	1266	1288

Fonte: (Ragland *et al.*, 1991a)

2.1.4 BENEFÍCIOS DO USO DA BIOMASSA PARA ENERGIA

- Em geral, o uso de biomassa ou de seus derivados pode ser considerado neutro em termos de emissões líquidas de dióxido de carbono (CO₂), quando é usado apenas em quantidades, no máximo, igual à produção líquida de biomassa do ecossistema aproveitado. Na prática isto não é bem assim, pois o uso de combustíveis fósseis e fertilizantes agrega emissões de dióxido de carbono ao processo global, fazendo com que o saldo total de emissões de dióxido de carbono seja positivo e não neutro.
- Se a biomassa utilizada para energia é proveniente de resíduos, está ajudando a reduzir os problemas de disposição destes resíduos.
- Biomassa tem baixo teor de enxofre, o que significa que não contribuem para a formação de dióxido de enxofre, que provoca a chuva ácida.

2.1.5 CUIDADOS DO USO DA BIOMASSA PARA ENERGIA

- Deve-se considerar se com o uso da biomassa para energia há outras emissões de gases de efeito estufa. Por exemplo, na produção de biogás, uma liberação acidental pode arruinar o saldo zero de emissões, porque o metano tem um potencial 21 vezes maior do que o dióxido de carbono segundo o IPCC (“Intergovernmental Panel on Climate Change”, 2000).
- Verificar sempre se a produção de combustíveis é o melhor uso para um resíduo específico.
- Se a matéria-prima vem de cultivos, considerar se este é o melhor uso da terra em relação a alternativas (cultivos de alimentos, reflorestamento, etc.) Esta consideração depende das circunstâncias específicas de cada território.
- A biomassa contém densidade energética relativamente baixa, o que não justificaria o transporte para locais distantes para sua utilização. Geralmente, os processos de conversão de energia estão estabelecidos perto da fonte de biomassa.
- Deve-se evitar o uso indiscriminado de florestas naturais.

2.2 GASEIFICAÇÃO

2.2.1 GENERALIDADES

A gaseificação se refere a um grupo de processos para converter combustível sólido ou líquido em combustível gasoso. Geralmente a gaseificação é levada a cabo por reação entre combustíveis tais com carvão, biomassa, coque de petróleo, ou petróleo pesado, com uma restrita quantidade de oxigênio e freqüentemente em combinação com vapor. O calor das reações exotérmicas de oxigênio com o combustível serve para manter o gaseificador na temperatura de operação e conduzir certas reações endotérmicas tomando lugar dentro deste.

Vapor pode ser o único meio de gaseificação se uma fonte externa fornece o calor necessário para as reações endotérmicas de gaseificação.

A gaseificação oferece certas vantagens sobre combustão direta. Por exemplo: para uma dada vazão do combustível processado, o volume de gás obtido é muito menor em comparação a esse obtido com sistemas de combustão. O volume reduzido de gás possibilita a utilização de equipamentos menores, o qual resulta em baixos custos. Para pequenas capacidades de potência, uma unidade gasificador/motor de combustão interna é mais barata em comparação com caldeira, condensador, motor de vapor, etc. Então, os gasificadores oferecem uma opção atrativa para localizações remotas. Além disso, o combustível gasoso diferentemente do combustível sólido pode ser usado em outros equipamentos tais como: turbinas a gás, células de combustível, etc.

Tipicamente os seguintes processos ocorrem nos gasificadores:

Tabela 6 - Processos básicos da gaseificação.

Processo	Temperatura típica
Secagem	>150°C
Pirólise	150-700°C
Oxidação	700-1500°C
Redução (gaseificação)	800-1100°C

Onde os processos de secagem, pirólise e redução consomem calor produzido nas reações exotérmicas de combustão.

Secagem:

Na medida em que aumenta a temperatura no interior do reator, a umidade do combustível vai sendo liberado, este processo ocorre a partir dos 150°C.

Pirólise:

A pirólise ou volatilização às vezes é também chamada de gaseificação parcial. Ocorre uma série de complexos processos físicos e químicos, iniciando lentamente a temperaturas menores que 350°C, se acelera a uma velocidade quase instantânea a 700°C. A composição dos produtos é uma função da temperatura, pressão e composição do gás durante a

volatilização. O processo de pirólise é iniciado em torno de 230°C, quando os componentes termicamente instáveis são rompidos e evaporados com outros componentes voláteis.

A Pirólise geralmente produz os seguintes três produtos:

- Gases leves tais como: H₂, CO, CO₂, H₂O, CH₄.
- Alcatrão, um líquido preto, viscoso e corrosivo composto de moléculas orgânicas e inorgânicas pesadas.
- Carvão, um sólido contendo principalmente carbono.

A composição dos produtos de pirólise depende de muitos fatores incluindo a temperatura e a velocidade de aquecimento.

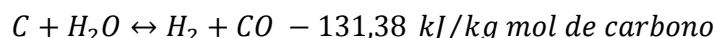
Combustão:

A oxidação ou combustão do carvão é uma reação muito importante dentro do gaseificador, em especial para os gaseificadores que não possuem fonte externa de calor, já que a oxidação fornece a energia necessária para os processos endotérmicos de secagem, pirólise e gaseificação. O oxigênio fornecido ao gaseificador reage com as substâncias combustíveis presentes, resultando na formação de CO₂ e H₂O,

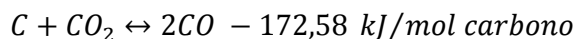
Gaseificação

O processo de gaseificação ou também chamado de redução envolve uma série de reações endotérmicas, que como mencionado antes, estão suportadas pelo calor produzido na combustão. Este processo produz gases combustíveis tais como: hidrogênio, monóxido de carbono, e metano através de uma série de reações dentre as quais se podem mencionar as quatro maiores:

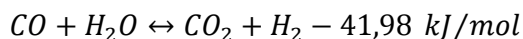
Reação água-gás



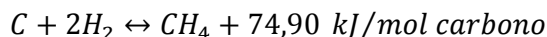
Reação de Boudouard



Reação de Shift



Metanação



2.2.2 TIPOS DE GASEIFICADORES

Existem diferentes configurações de reatores com os quais é possível gaseificar, cada um destes apresenta suas vantagens e desvantagens. Também, dependendo do reator, os quatro processos básicos da gaseificação (secagem, pirólise, combustão e redução) podem apresentar-se juntos ou separados em diferentes zonas do reator, trazendo as respectivas consequências. A seguir apresenta-se uma breve descrição de diferentes tipos de gaseificadores existentes.

2.2.2.1 Gaseificação em Reator de Leito Fixo

Este tipo de gaseificação é chamada de leito móvel devido ao fato de que em operação continua na medida em que o combustível é fornecido e as cinzas retiradas, o leito move-se do topo para o fundo do reator (Martínez, 2009), ou também podem ser chamados de leito fixo devido ao fato de que os sólidos no interior permitem o passo do agente gasificante sem separar-se uns dos outros. Nos gaseificadores de leito fixo, o agente de gaseificação passa por peças de combustível sólido (biomassa, lixo, carvão, etc.) apoiados sobre uma grade fixa.

Os gaseificadores de leito fixo são classificados em relação com a direção do fluxo gasoso no interior do reator; quer dizer, em corrente ascendente ou em corrente descendente. Também, pode ser classificada de acordo com as direções do fluxo do combustível a ser transformado (ou seja, carvão, biomassa, lixo, etc.), e o fluxo gasoso gerado. Sendo assim, o processo pode ser considerado como gaseificação contracorrente, co-corrente e fluxo cruzado. Dado que a biomassa é usualmente alimentada pelo topo deste tipo de reatores, é comumente aceito que a gaseificação em correntes ascendentes e descendentes seja chamada como contracorrente e co-corrente respectivamente (Martínez, 2009).

Este tipo de reator é considerado por alguns pesquisadores (Beenackers e M., 1999; Jain e Goss, 2000; Martínez, 2009; Tinaut et al., 2006) como a forma mais satisfatória de se obter energia mecânica a partir de motores alternativos de combustão interna, pelo fato do teor de alcatrão no gás produzido ser baixo no co-corrente. Segundo Bhattacharya (2001), as concentrações de alcatrão no gás produzido a partir da gaseificação de biomassa em leito móvel, estão na faixa de 10 a 100 g/m³ e de 0,05 a 0,5 g /m³ para gaseificadores tipo contracorrente e tipo co-corrente respectivamente.

2.2.2.1.1 Fluxo cruzado

Nos gaseificadores de fluxo cruzado o combustível é fornecido pela parte superior do reator, enquanto o ar é alimentado lateralmente. O gás gerado sai pelo lado oposto na mesma direção em que foi fornecido. As zonas de combustão e gaseificação (ou redução) estão próximas à entrada do ar e a saída do gás energético obtido (Figura 2.4). As cinzas são removidas pela parte inferior do reator e a temperatura de saída dos gases é em torno de 800 - 900°C como tem sido comprovado nos laboratórios do NEST e também por outros pesquisadores (Baxter, 1994; Visaguie, 2009). O equipamento possui relativa simplicidade de construção. O gás gerado apresenta um considerável conteúdo de alcatrão sendo a produção de energia térmica, sua aplicação mais imediata.

Na Figura 2 é apresentado um esquema geral deste tipo de reator, assim como as diferentes zonas de reação.

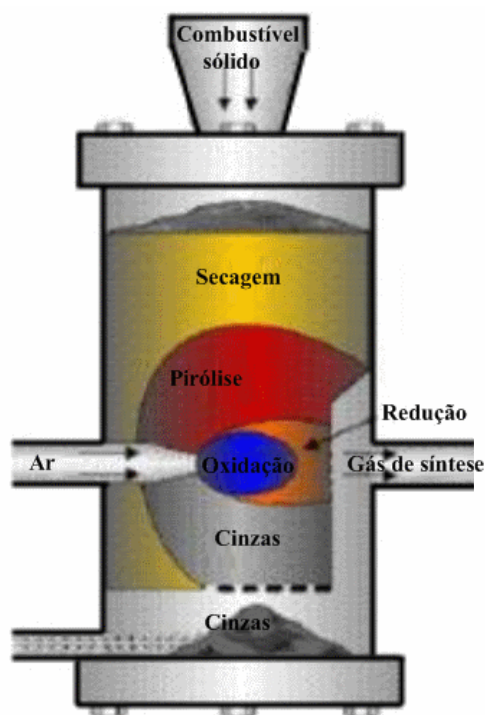


Figura 2 - Gaseificador de leito fixo de fluxo cruzado. Adaptado de: Ming (2009).

2.2.2.1.2 Contra corrente

Em gaseificadores de leito fixo, contra corrente, o agente de gaseificação (ar, oxigênio e/ou vapor) escoam através do leito fixo de combustível (biomassa, carvão, etc.) em sentido contrário à alimentação do sólido. Neste sentido, o combustível que está sendo gaseificado experimenta seguidamente os processos de secagem, pirólise, redução e combustão, na medida em que os gases gerados procuram a saída do reator localizada na parte superior do mesmo. Para formar um leito permeável este tipo de gaseificador requer um combustível que não se aglomere e tenha alta resistência mecânica, através de recentes avanços tem sido bastante reduzida a demanda sobre as especificações dos combustíveis.

Esta configuração permite que os gases gerados tenham um alto teor de alcatrão. As cinzas são removidas em forma de escoria ou pó seco; para que o gaseificador com escórias possa obter temperaturas maiores a temperatura de fusão das cinzas, é necessária uma grande quantidade de agente gaseificante. Segundo Belgiorno *et al.* (2003), a temperatura na zona de combustão pode ser superior aos 1200 °C. Geralmente as aplicações deste tipo de reatores concentram-se na produção de energia térmica por meio da combustão dos gases gerados na gaseificação.

Na Figura 3, é apresentado um esquema geral deste tipo de reator, assim como as diferentes zonas do processo de gaseificação.

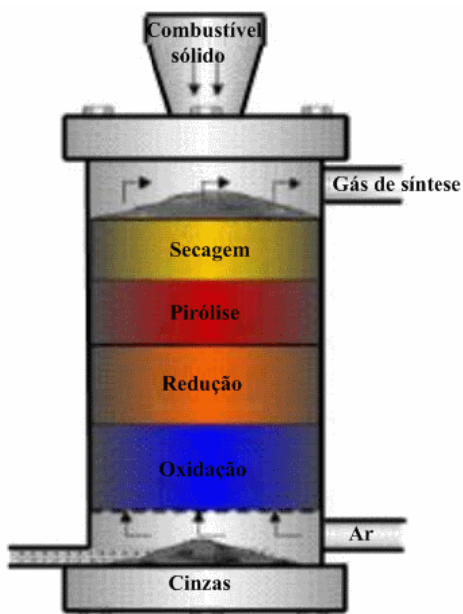


Figura 3 - Gaseificador de leito fixo contra corrente. Adaptado de: Ming (2009).

2.2.2.1.3 Co-corrente

Na gaseificação em leito móvel tipo co-corrente, o combustível é fornecido pela parte superior enquanto que o ar se movimenta em sentido descendente, podendo ser alimentado lateralmente ou pela parte superior do reator. Gaseificadores de leito fixo co-corrente são muito similares aos do tipo contra corrente, com a diferença do que o agente de gaseificação escoar no mesmo sentido do combustível (ou seja, em uma configuração descendente). O gás produzido sai do gaseificador a uma temperatura elevada, e a maioria do calor que sai com o gás é reaproveitado ao transferir-lo para o agente de gaseificação usando um trocador de calor. Níveis de alcatrão são significativamente mais baixos do que em gaseificadores contracorrente, uma vez que todo o alcatrão passa através do leito de carvão a alta temperatura (aproximadamente 1200°C) (Visagie, 2009). Não obstante, a utilização de gaseificadores tipo co-corrente está limitada a capacidades pequenas (García-Bacaicoa et al. 1994). Neste sentido, as capacidades máximas permissíveis reportadas na literatura são bastante heterogêneas, com valores desde 1 MWt (Klein, 2002) e 1,5 MWt (Maniatis, 2001) até 5 MWt (Knoef, 2002). Para reatores com garganta, Beenackers (1999), apresenta uma capacidade máxima de 1 MWe (Visagie, 2009).

Na Figura 4, é apresentado um esquema geral deste tipo de reator, assim como as diferentes zonas do processo de gaseificação.

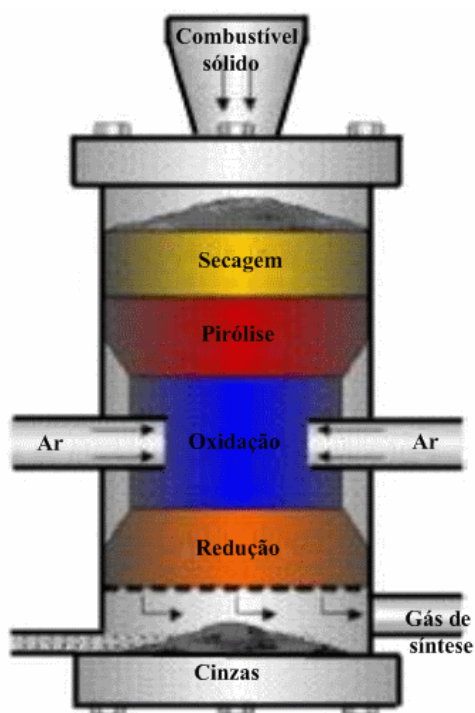


Figura 4 - Gaseificador de leito fixo co-corrente. Adaptado de: Ming (2009).

2.2.2.2 Gaseificação em Reator de Leito Fluidizado

Em gaseificadores de leito fluidizado, os gases reagentes passam através de partículas sólidas de baixa granulométrica causando um efeito de elevação e bolhas. Isso produz um leito com grande área superficial do conjunto de material carbonoso particulado. Leitos fluidizados não são adaptáveis a sólidos aglomerantes. No entanto, os atributos aglomerantes de alguns sólidos carbonosos podem ser reduzidos com pré-tratamento. Oxigênio, ar e/ou vapor são usados para fluidizar o leito, enquanto as cinzas são removidas secas ou como material aglomerado, pesado e não fluidizado. O combustível deve ser altamente reativo, uma vez que as temperaturas envolvidas são geralmente baixas. O aproveitamento do combustível em gaseificadores de leito fluidizado não é tão alto como em gaseificadores de fluxo arrastado, mas é mais alto que para os de leito fixo. A presença de material carbonoso e o fenômeno posterior de arraste de partículas finas (elutriação) faz com que a eficiência de

conversão seja muito baixa. A eficiência pode ser aumentada através da recirculação ou incineração destes sólidos (Ming, 2009). Combustíveis que normalmente geram cinzas altamente corrosivas (tais como a biomassa) e conseqüentemente danificam os lados dos gaseificadores de escorificação, são geralmente usados em leitos fluidizados (Visagie, 2008).

Os gaseificadores de leito fluidizado podem ser classificados em duas grandes categorias, leito fluidizado borbulhante e leito fluidizado circulante, na Figura 5 e Figura 6 são apresentados esquemas desses reatores:

2.2.2.2.1 Leito fluidizado borbulhante

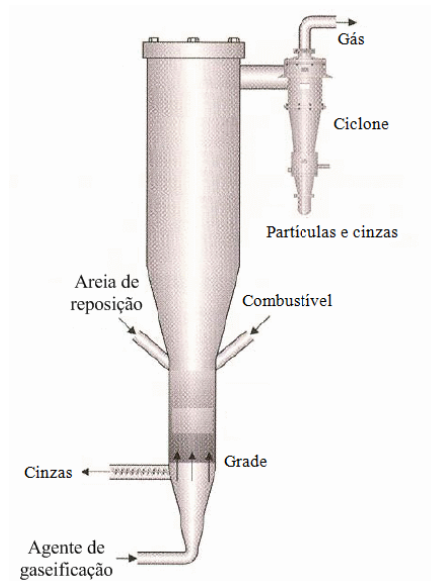


Figura 5 - Gaseificador de leito fluidizado borbulhante. Adaptado de: Ming (2009).

2.2.2.2.2 Leito fluidizado circulante

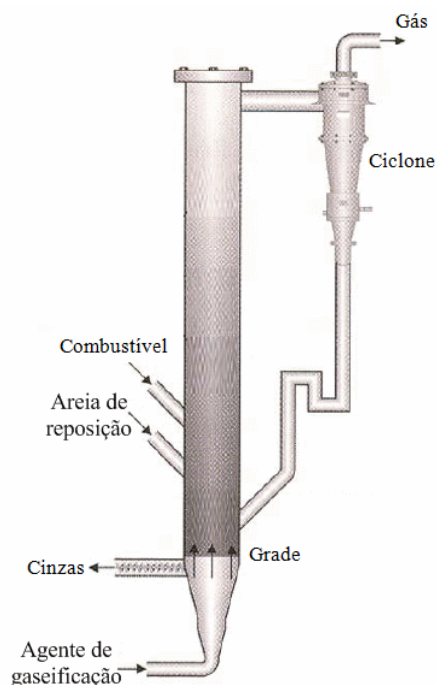


Figura 6 - Gaseificador de leito fluidizado circulante. Adaptado de: Ming (2009).

2.2.2.3 Gaseificação em Reator de Leito Arrastado

Os sistemas de leito arrastado gaseificam sólidos secos em pó, combustível atomizado líquido ou uma suspensão de combustíveis, com uma corrente de oxigênio (ou menos frequente com ar) e vapor em fluxo co-corrente. As cinzas se fundem nas altas temperaturas de operação do reator e são removidas como escória líquida. Alguns combustíveis têm cinzas com temperaturas de fusão muito elevadas. Neste caso, principalmente calcário é misturado com o combustível antes da gaseificação. Adicionar um pouco de calcário geralmente é suficiente para a redução da temperatura de fusão. Alguns combustíveis, em especial certos tipos de biomassa, podem formar escória que é corrosiva para as paredes internas de cerâmica que servem para proteger a parede exterior do gaseificador. No entanto, alguns tipos de gaseificadores de leito arrastado não possuem uma parede de cerâmica interna, mas tem uma parede interior de água ou vapor resfriado parcialmente coberto com escória solidificada. Estes tipos de gaseificadores não sofrem de corrosão a partir de escórias. As altas temperaturas também significam que o metano e alcatrão não estão presentes no gás

produzido, porém a exigência de oxigênio é maior do que para os outros tipos de gaseificadores.

Vários fabricantes oferecem gaseificadores de leito arrastado comerciais para aplicações em grande escala, tais como Texaco, Shell, e Koppers-Totzek. Estes gaseificadores tipicamente operam a pressões superiores a 35 bar e usam oxigênio como agente de gaseificação (Williams *et al.*, 2000). Gaseificadores de leito arrastado estão disponíveis para maiores capacidades (>1000 MWe) que outros tipos, mas estas são mais comumente usadas para combustíveis fósseis como carvão, resíduos de refinaria, etc. seu uso para gaseificação de biomassa é mais limitado, isso é devido a requer combustível em partículas muito finas (na ordem de 80 a 100 μm)(Basu, 2006). Muitas plantas de gaseificação integrada com ciclo combinado utilizam gaseificadores de leito arrastado. Na Figura 7, é apresentado um esquema geral deste tipo de reator de gaseificação.

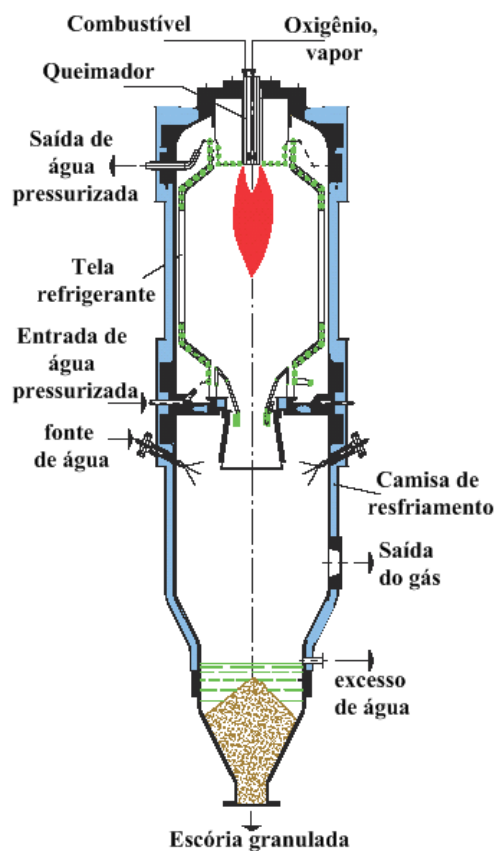


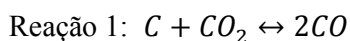
Figura 7 - Gaseificador de leito arrastado com alimentação superior.

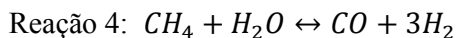
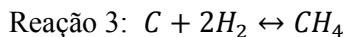
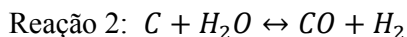
2.3 REVISÃO BIBLIOGRAFICA DA MODELAGEM DE GASEIFICADORES LEITO FIXO CO-CORRENTES

A gaseificação de carvão e em geral de combustíveis com altos teores de carbono e o uso do gás como combustível para motores de combustão interna é uma tecnologia que tem sido utilizado durante mais de um século. Os motores de ignição por centelha, normalmente alimentados com gasolina, são capazes de funcionar alimentando apenas com gás pobre. Os motores a Diesel podem ser adaptados para funcionar com gás pobre reduzindo o índice de compressão e instalando um sistema de ignição por centelhas (FAO, 1986). Também pode ser usado diesel como inicialdor da combustão.

Existem na literatura vários trabalhos de modelagem de gaseificadores do tipo co-corrente, os quais formulam relações matemáticas entre as características do gás de biomassa e os parâmetros do gaseificador e as características da biomassa (como umidade, fator de ar, tipo de biomassa, poder calorífico, etc.). Os modelos matemáticos de gaseificadores de leito fixo co-correntes coincidem ao dividir o modelo do reator em quatro áreas básicas nas quais ocorrem fenômenos físicos e químicos particulares (secagem, pirólise, oxidação e redução) e, em seguida juntar algumas delas, sendo assim é possível encontrar modelos de um, dois e até três zonas. Existem modelos de diferentes complexidades: os que utilizam somente conservação de massa e energia, os que adicionam equilíbrio termoquímico e os que também incluem considerações de cinética química. A seguir é apresentado um breve resumo cronológico de alguns dos modelos encontrados na literatura com seus respectivos aportes e limitações.

Wang e Kinoshita (1993) modelaram a cinética das reações ocorrendo na zona de redução de um gaseificador assumindo um dado tempo de residência e temperatura. Eles consideraram o seguinte grupo de reações e determinaram valores para os parâmetros cinéticos que davam a melhor aproximação com os resultados experimentais previamente obtidos (Wang e Kinoshita, 1992).





Wang e Kinoshita (1993) também consideraram a reação água-gás ($CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$) mas encontraram que tem pouco efeito sobre o resultado final. O modelo deles foi fisicamente similar a um leito fluidizado bem misturado. Contudo, em um gaseificador de leito fixo co-corrente o gás reage de forma descendente ao longo do leito, então uma variação unidimensional na composição e temperatura do gás.

Em 1997, Zainal *et al.* trabalharam desenvolvendo um modelo matemático para gaseificador co-corrente que foi publicado em 2001, o modelo é baseado em equilíbrio químico, pode-se considerar como um modelo bastante simplificado já que só considera duas reações de equilíbrio e supõe o gaseificador como um todo (modelo de só uma zona). O modelo não é capaz de gerar um perfil de temperaturas no gaseificador, somente uma temperatura média na zona de redução. O modelo apresenta duas equações úteis para evitar o uso de tabelas na determinação de propriedades: a primeira refere-se ao cálculo da variação das constantes de equilíbrio das duas reações consideradas com a temperatura e a segunda refere-se ao cálculo da variação do calor específico dos gases envolvidos, com a temperatura. Também é interessante anotar que este modelo apresenta uma metodologia para calcular a entalpia de formação da biomassa.

No ano 2003 foi publicado um artigo do modelo desenvolvido por Giltrap *et al.* como parte de uma tese de doutorado do Instituto de Ciências Fundamentais da Universidade de Massey na Nova Zelândia. Trata-se de um modelo fenomenológico de gaseificador de leito fixo co-corrente operando em estado estável que foi desenvolvido baseado em valores previamente publicados (Wang e Kinoshita, 1993) da cinética das reações na zona de redução. Este modelo já considera a existência das quatro zonas no gaseificador (secagem, pirólise, gaseificação e combustão), mas só desenvolve a zona de redução. Leva em conta efeitos de cinética química e não assume que o equilíbrio químico foi obtido, como acontece em outros modelos mais simples.

Eles desenvolveram um sistema de nove equações diferenciais para serem resolvidas simultaneamente: uma equação para cada uma das concentrações das seis espécies consideradas, uma equação para a velocidade do gás, uma para queda de pressão no leito e

outra para temperatura. Este modelo é capaz de predizer os perfis destas variáveis e não só os valores médios como acontece na maioria dos modelos. O modelo consegue uma aproximação razoável da composição do gás em relação com dados experimentais, exceto para o CH₄ cuja concentração predita estava acima da experimental. Uma desvantagem deste modelo é que ele só considera a zona de redução, fazendo-se necessário dados das condições iniciais (concentração de seis espécies, pressão, temperatura e velocidade) logo acima desta zona (logo embaixo da zona de oxidação).

Tinaut *et al.* (Wang e Kinoshita, 1993) desenvolveram um parâmetro chamado “qualidade do combustível do motor” (Engine Fuel Quality (EFQ)) para predizer a atuação de um motor de combustão interna trabalhando com gás de biomassa da biomassa de forma simplificada. O parâmetro depende das concentrações das espécies no gás de biomassa.

Em 2006 Babu e Sheth trabalharam sobre o modelo de Giltrap (2002; 2003) para tentar melhorar alguns aspectos, eles conseguem publicar um artigo (Babu e Sheth, 2006) onde se apresenta uma melhora no perfil de temperaturas predito pelo modelo em comparação com o perfil de temperaturas experimentais na zona de redução. Eles obtiveram esta melhora modificando o fator de reatividade do carvão para uma variação exponencial ao longo da zona de redução e não uma aproximação linear como foi proposto no modelo original (Giltrap, 2002; Giltrap *et al.*, 2003). A modificação da variação do fator de reatividade do carvão para exponencial é baseada na observação de que quando o carvão se move para baixo na zona de redução, o grau de queima incrementa. Devido às reações gás - carvão e ao encolhimento, o tamanho do carvão diminui e a porosidade aumenta, então os gases encontram mais espaços ativos e aumenta a velocidade das reações na zona de redução.

Jarungthammachote e Dutta (2007) apresentam um modelo que é praticamente igual ao modelo proposto por Zainal *et al.* (2002). O modelo também considera o gaseificador como um todo (modelo de só uma zona) e assume equilíbrio termoquímico propondo só duas reações de equilíbrio. O aporte deste modelo com relação ao modelo de Zainal *et al.* (2002) é que este apresenta formas alternativas para determinar as propriedades tais como constantes de equilíbrio das reações e poder calorífico dos gases envolvidos. Também, para o cálculo da entalpia de formação da biomassa utiliza uma formula alternativa originalmente encontrada no trabalho de Souza-Santos (2004). Outra variação importante é que Jarungthammachote e Dutta (2007) multiplicam as constantes de equilíbrio por fatores para tentar melhorar a predição das concentrações.

Em 2007 Ratnadhariya e Channiwala trabalharam sobre um modelo que seria publicado no ano (2009), o trabalho é na verdade uma melhora de um modelo anterior de duas zonas apresentado pelos mesmos autores (Ratnadhariya e Channiwala, 2002). O modelo de 2007 considera três zonas: primeira zona é constituída dos fenômenos combinados de secagem e pirólise, a segunda é a oxidação (combustão) e a terceira é a zona de redução. Para abordar cada área os autores apresentaram: reação química, equilíbrio estequiométrico e conservação de energia, juntamente com algumas hipóteses justificadas em observações experimentais. Devido a não considerar equilíbrio-termoquímico ou cinética explícita, este modelo apresenta elevada simplicidade matemática em comparação com outros modelos. O modelo não dá o perfil de temperaturas em cada zona, mas sim uma temperatura média para cada uma destas zonas, mesmo assim, entre os modelos existentes de pirolese este modelo é aplicavel a gaseificadores downdraft o qual não é possível (ou pelo menos não diretamente) com a grande maioria de modelos baseados em análise termogravimétricos (Koufopoulos *et al.*, 1989). Neste modelo pode-se chegar a uma boa aproximação na concentração de metano no gás de biomassa.

Gao e Li (2008) propõem a criação de um modelo de duas zonas (pirólise e redução), eles baseiam seu modelo da zona de pirólise no trabalho de Koufopoulos *et al.* (1989) e o modelo da zona de redução no trabalho de Giltrap *et al.*(2003). Este modelo tem o inconveniente de assumir proporções equivalentes para as concentrações dos gases que saem da zona de pirólise, já que o modelo cinético da zona de pirólise (Koufopoulos *et al.*, 1989) não é capaz de predizer concentrações das espécies.

Capítulo 3

MODELO MATEMÁTICO DE REGIME PERMANENTE PARA UM GASEIFICADOR DE BIOMASSA TIPO LEITO FIXO CO-CORRENTE

Neste capítulo são apresentados os detalhes da formulação do modelo matemático para gaseificador de biomassa tipo leito fixo co-corrente operando em regime permanente, a programação na linguagem de Matlab® pode ser vista nos arquivos: gaseificador.m e reducao.m do Apêndice A. O capítulo começa pela formulação física geral do modelo e logo apresenta uma descrição mais detalhada de cada zona do modelo.

3.1 DESCRIÇÃO FÍSICA DO MODELO

Como vimos anteriormente, em gaseificadores de leito fixo co-correntes, a biomassa é alimentada pela parte de acima, enquanto o ar geralmente entra numa altura média e se move em sentido descendente, devido a este fato, no interior deste tipo de reatores, os fenômenos típicos da gaseificação (secagem, pirólise, oxidação e redução) se distribuem como mostrado na Figura 4.

Isso é aproveitado para dividir o modelo em três submodelos:

- Secagem – pirólise.
- Oxidação.
- Redução.

Na Figura 8 é apresentado um esquema geral do modelo.

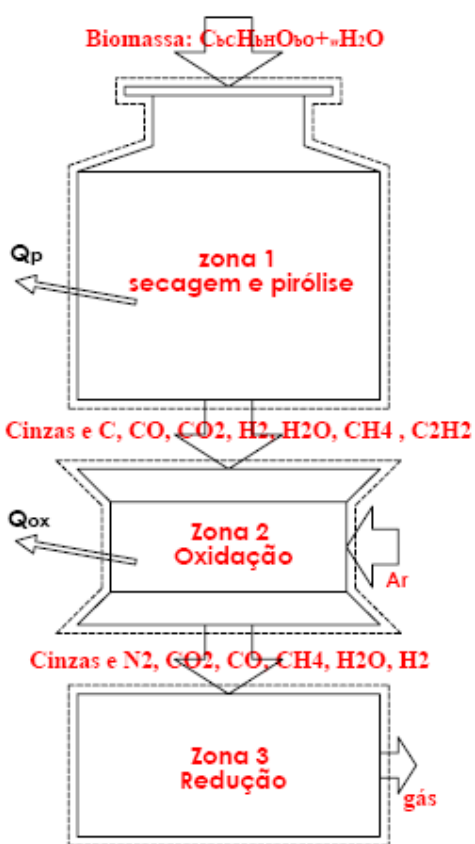


Figura 8 - Esquema geral do modelo

O submodelo superior corresponde aos fenômenos de secagem e pirólise juntos. Nesta zona ingressa biomassa pela parte superior e a medida que a temperatura aumenta a umidade vai sendo liberada e logo ocorre a decomposição térmica, resultando em carvão, vapor de água e uma série de espécies voláteis (CO, CO_2, H_2, CH_4 e C_2H_2). Nesta zona o modelo matemático considerado é zero dimensional e está baseado principalmente no submodelo da zona Secagem – Pirólise proposta no trabalho de Ratnadhariya e Channiwala (2009)

Na zona de oxidação ingressam os produtos da primeira zona (secagem-pirólise), além de ingressar ar; os gases combustíveis reagem com o oxigênio disponível do ar e saem como produtos: carvão, alcatrão e uma mistura de gases (CO , CO_2 , H_2 , CH_4 , H_2O e N_2) incluindo o nitrogênio do ar considerado inerte e vapor de água. Nesta zona o modelo matemático considerado é zero dimensional e está baseado principalmente no submodelo da zona de oxidação proposta nos trabalhos de Baxter (2004) e Ratnadhariya e Channiwala (2002; 2009).

Na parte inferior do reator encontra-se a zona de redução, também conhecida como zona de gaseificação, nessa zona ingressa os produtos da zona de oxidação e reagem entre eles, de acordo a quatro reações simultâneas (Boudouard, gás d'agua (primária), metanação e reforma a vapor), dando como resultado maior concentração de gases combustíveis. Aqui o nitrogênio e o alcatrão são considerados inertes. Os produtos gasosos desta zona são (CO , CO_2 , H_2 , CH_4 , H_2O e N_2). O submodelo desta zona considera variações das propriedades só no comprimento do eixo da zona de redução do reator (modelo unidimensional) e é baseado em vários trabalhos (Babu e Sheth, 2006; Baxter, 1994; Giltrap, 2002; Giltrap *et al.*, 2003).

3.2 CÁLCULOS PRELIMINARES

3.2.1 Cálculo da Fórmula Simplificada da Molecula de Biomassa Seca

Pela parte superior do reator ingressa a biomassa com as seguintes características:

a) Composição elementar (porcentagens em base seca).

Teor de Hidrogênio em massa ($H\%$).

Teor de Carbono em massa ($C\%$).

Teor de Oxigênio em massa ($O\%$).

Teor de cinzas em massa ($A\%$).

b) Composição imediata (porcentagens em base seca).

Teor de matéria volátil ($V_{\%}$).

Teor de cinzas ($A_{\%}$) (igual do que na composição elementar).

Teor de Carbono fixo ($F_{\%}$) (pode-se determinar por diferença).

Umidade (porcentagem em base seca) ($W_{\%}$).

E sendo:

bc Átomos de carbono na fórmula simplificada da molécula de biomassa.

bh Átomos de hidrogênio na fórmula simplificada da molécula de biomassa.

bo Átomos de oxigênio na fórmula simplificada da molécula de biomassa.

No caso de ingressar com a fórmula elementar da biomassa (bc, bh, bo)

$$\frac{H_{\%}}{100\% - A_{\%}} = \frac{bh}{12bc + bh + 16bo} \quad (2.1)$$

$$H_{\%} = \frac{bh(100\% - A_{\%})}{12bc + bh + 16bo} \quad (2.2)$$

$$\frac{C_{\%}}{100\% - A_{\%}} = \frac{12bc}{12bc + bh + 16bo} \quad (2.3)$$

$$C_{\%} = \frac{12bc(100\% - A_{\%})}{12bc + bh + 16bo} \quad (2.4)$$

$$\frac{O_{\%}}{100\% - A_{\%}} = \frac{16bo}{12bc + bh + 16bo} \quad (2.5)$$

$$O_{\%} = \frac{16bo(100\% - A_{\%})}{12bc + bh + 16bo} \quad (2.6)$$

A matéria volátil estará representada por todo o Hidrogênio, todo o oxigênio e só parte do Carbono, assim as porcentagens voláteis dos elementos serão:

Teor massico volátil de Hidrogênio ($H_{\%v} = H_{\%}$);

Teor massico volátil de Carbono ($C_{\%v} = V_{\%} - H_{\%} - O_{\%}$);

Teor massico volátil em peso de Oxigênio ($O_{\%v} = O_{\%}$);

E o teor massico não volátil de Carbono será:

$$C_{\%nv} = C_{\%} - C_{\%v} = C_{\%} - (V_{\%} - H_{\%} - O_{\%}) \quad (2.7)$$

Um grama de biomassa seca contém:

$$H_{mv} = \frac{H_{\%v}}{100} \text{ gramas de Hidrogênio;}$$

$$O_{mv} = \frac{O_{\%v}}{100} \text{ gramas de Oxigênio;}$$

$$C_{mv} = \frac{(V_{\%} - H_{\%} - O_{\%})}{100} \text{ gramas de Carbono volátil;}$$

$$C_{mnv} = \frac{C_{\%} - (V_{\%} - H_{\%} - O_{\%})}{100} \text{ gramas de Carbono não volátil;}$$

Ou em moles, um grama de biomassa seca contém:

$$H_{nv} = \frac{H_{\%v}}{100} \text{ moles de Hidrogênio;}$$

$$O_{nv} = \frac{O_{\%v}}{1600} \text{ moles de Oxigênio;}$$

$$C_{nv} = \frac{(V_{\%} - H_{\%} - O_{\%})}{1200} \text{ moles de Carbono volátil;}$$

$$C_{nnv} = \frac{C_{\%} - (V_{\%} - H_{\%} - O_{\%})}{1200} \text{ moles de Carbono não volátil;}$$

Também podemos expressar o número de moles de carbono totais em um grama de biomassa como:

$$C_{ntb} = C_{nv} + C_{nnv} = \frac{C_{\%}}{1200} \quad (2.8)$$

Normalmente, da composição elementar se pode gerar uma formula elementar para a biomassa a qual é separada em parte volátil e parte não volátil; assim:

$$C_{bC}H_{bH}O_{bO} \rightarrow C_{bvc}H_{bvH}O_{bvO} + C_{bnvc}$$

Os subscritos podem ser representados em termos das porcentagens das análises dos componentes da biomassa, assim teremos:

$$bC = \frac{C_{ntb}}{C_{ntb}} = 1 \quad (2.9)$$

$$bH = bvH = \frac{H_{nv}}{C_{ntb}} = \frac{\left(\frac{H_{\%v}}{100}\right)}{\left(\frac{C_{\%}}{1200}\right)} = \frac{12H_{\%}}{C_{\%}} \quad (2.10)$$

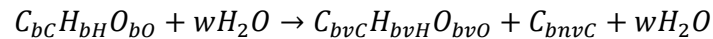
$$bO = bvO = \frac{O_{nv}}{C_{ntb}} = \frac{\left(\frac{O_{\%v}}{1600}\right)}{\left(\frac{C_{\%}}{1200}\right)} = \frac{12O_{\%}}{16C_{\%}} \quad (2.11)$$

$$bvC = \frac{C_{nv}}{C_{ntb}} = \frac{\frac{(V_{\%} - H_{\%} - O_{\%})}{1200}}{\left(\frac{C_{\%}}{1200}\right)} = \frac{(V_{\%} - H_{\%} - O_{\%})}{C_{\%}} \quad (2.12)$$

$$bnvc = \frac{C_{nvc}}{C_{ntb}} = \frac{\left[\frac{C_{\%} - (V_{\%} - H_{\%} - O_{\%})}{1200}\right]}{\left(\frac{C_{\%}}{1200}\right)} = \frac{C_{\%} - (V_{\%} - H_{\%} - O_{\%})}{C_{\%}} \quad (2.13)$$

3.2.2 Cálculo do Coeficiente de Umidade da Biomassa

É importante lembrar também que a biomassa pode ingressar com umidade, ou seja:



O coeficiente da umidade pode ser expresso em termos dos teores apresentados nas análises da biomassa, ou seja:

Para a porcentagem da umidade em base seca:

$$\frac{18w}{12bC + bH + 16bO} = \frac{W_{\%}}{100\% - A_{\%}} \quad (2.14)$$

$$\rightarrow w = \frac{W_{\%}(12bC + bH + 16bO)}{18(100\% - A_{\%})} \quad (2.15)$$

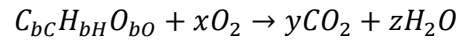
Para o teor de umidade em base úmida:

$$\frac{18w}{12bC + bH + 16bO} = \frac{W_{\%}}{100\% - A_{\%} - W_{\%}} \quad (2.16)$$

$$\rightarrow w = \frac{W_{\%}(12bC + bH + 16bO)}{18(100\% - A_{\%} - W_{\%})} \quad (2.17)$$

3.2.3 Cálculo da Entalpia de Formação da Biomassa

A reação de oxidação completa da biomassa será:



O balanço atômico:

$$bC = y \quad (2.18)$$

$$bH = 2z \quad (2.19)$$

$$bO + 2x = 2y + z \quad (2.20)$$

Resolvendo o balanço atômico:

$$y = bC \quad (2.21)$$

$$z = \frac{bH}{2} \quad (2.22)$$

$$x = bC + \frac{bH}{4} - \frac{1}{2}bO \quad (2.23)$$

Pela definição de poder calorífico superior da biomassa:

$$\overline{HHV}_b = \bar{h}_{fb} + x\bar{h}_{fO_2} - y\bar{h}_{fCO_2} - z\bar{h}_{fH_2O(l)} \quad (2.24)$$

$$\rightarrow \bar{h}_{fb} = \overline{HHV}_b + z\bar{h}_{fH_2O(l)} + y\bar{h}_{fCO_2} \quad (2.25)$$

$$\rightarrow \bar{h}_{fb} = \overline{HHV}_b + \left(\frac{bH}{2}\right) \bar{h}_{f_{H_2O(l)}} + (bC) \bar{h}_{f_{CO_2}} \quad (2.26)$$

A entalpia de formação da biomassa será:

$$\bar{h}_{fb} = \overline{HHV}_b + \left(\frac{bH}{2}\right) (-285,830 \text{ kJ/mol}) + (bC)(-393,505 \text{ kJ/mol}) \quad (2.27)$$

Fazendo uma revisão de unidades para adaptar a formula aos valores do poder calorífico superior normalmente expressado em $MJ/kg = kJ/g$

Sendo A_m a massa de cinzas que tem por cada mol de biomassa:

$$\frac{A_{\%}}{100\% - A_{\%}} = \frac{A_m}{12bC + bH + 16bO} \quad (2.28)$$

$$\rightarrow A_m = \frac{A_{\%}(12bC + bH + 16bO)}{100\% - A_{\%}} \quad (2.29)$$

$$\overline{HHV}_b \rightarrow kJ/mol_{biom}$$

$$12bC + bH + 16bO + 18w + A_m = M_{biom} \quad (2.30)$$

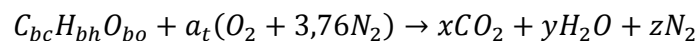
$$M_{biom} \rightarrow g_{biom}/mol_{biom}$$

$$\overline{HHV}_b = HHV \cdot M_{biom} = (12bC + bH + 16bO + 18w)HHV \quad (2.31)$$

Onde HHV está em kJ/g_{biom}

$$\bar{h}_{fb} = (12bC + bH + 16bO + 18w + A_m)HHV + \left(\frac{bH}{2}\right) (-285,830 \text{ kJ/mol}) + (bC)(-393,505 \text{ kJ/mol}) \quad (2.32)$$

3.2.4 Cálculos do Fator de Ar ϕ , Relação Equivalente φ e Relação Ar Combustível AF_r .



Cálculo dos moles de ar teóricos:

$$bc = x \quad (2.33)$$

$$bh = 2y \quad (2.34)$$

$$2(3,76)a_t = 2z \quad (2.35)$$

$$bo + 2a_t = 2x + y \quad (2.36)$$

$$bo + 2a_t = 2(bc) + \left(\frac{bh}{2}\right) \quad (2.37)$$

$$a_t = (bc) + \left(\frac{bh}{4}\right) - \frac{bo}{2} \quad (2.38)$$

A relação estequiométrica combustível/ar:

$$\begin{aligned} FA_{estq} &= \left(\frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_a}\right)_{estq} = \frac{12bC + bH + 16bO + 18w + A_m}{a_t[(2)(16) + 3,76(2)(14)]} \\ &= \frac{12bC + bH + 16bO + 18w + A_m}{137,28a_t} \end{aligned} \quad (2.39)$$

A relação real combustível/ar:

$$FA_{real} = \left(\frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_a}\right)_{real} = \frac{12bC + bH + 16bO + 18w + A_m}{137,28a} \quad (2.40)$$

Introduzindo a relação equivalente:

$$\varphi = \frac{FA_{real}}{FA_{estq}} = \frac{\left(\frac{12bC + bH + 16bO + 18w + A_m}{137,28a}\right)}{\left(\frac{12bC + bH + 16bO + 18w + A_m}{137,28a_t}\right)} = \frac{a_t}{a} \quad (2.41)$$

$$a = \frac{a_t}{\varphi} \quad (2.42)$$

Introduzindo o fator de ar como o inverso da relação equivalente:

$$\phi = \varphi^{-1} \quad (2.43)$$

Introduzindo a relação ar-combustível AF_r :

$$\varphi = \frac{FA_{real}}{FA_{estq}} \quad (2.44)$$

$$\rightarrow FA_{real} = \varphi FA_{estq} \quad (2.45)$$

$$\rightarrow AF_r = (FA_{real})^{-1} = \left(\frac{\dot{m}_a}{\dot{m}_f}\right)_{real} = \frac{1}{\varphi FA_{estq}} \quad (2.46)$$

$$\varphi = \frac{1}{(AF_r)(FA_{estq})} \quad (2.47)$$

3.2.5 Cálculo das Concentrações dos Gases

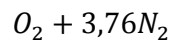
Para o cálculo das concentrações dos gases em $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$:

$$V = \frac{nRT}{P} \quad (2.48)$$

$$[c_x] = \frac{n_x}{V} = \frac{n_x}{n_t} \left(\frac{P}{RT}\right) \quad (2.49)$$

3.2.6 Cálculo da Massa Específica do Ar

Assumindo que as proporções do oxigênio e do nitrogênio no ar são:



O peso molecular do ar será:

$$M_{ar} = \frac{[(16)(2) + 3,76(2)(14)]g}{(1 + 3,76)mol} = 28,84 \text{ g/mol} = 0,02884 \text{ kg/mol}$$

Pela lei dos gases ideais:

$$P = \frac{nRT}{V} = \left(\frac{m}{M}\right) \frac{RT}{V} = \frac{\rho RT}{M} \quad (2.50)$$

$$\rightarrow \rho = \frac{PM}{RT} \quad (2.51)$$

3.2.7 Cálculo da Massa Específica do Gás

Para o cálculo da massa específica do gás de biomassa úmido, assumindo que somente contem: N_2 , CO_2 , CO , CH_4 , H_2O e H_2 . Usa-se a seguinte fórmula:

$$\rho_{ar} = 28[c_{N_2}] + 44[c_{CO_2}] + 28[c_{CO}] + 16[c_{CH_4}] + 18[c_{H_2O}] + 2[c_{H_2}] \quad (2.52)$$

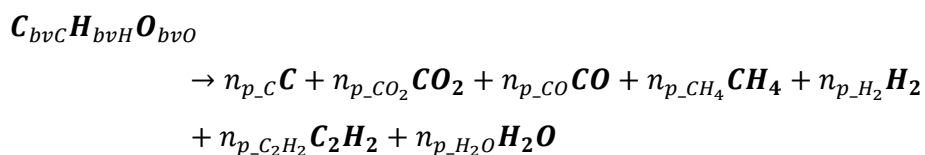
3.3 SUBMODELO SECAGEM-PIRÓLISE

Esta zona pode ser simbolicamente representada pela reação:



No processo de pirólise participa só a parte volátil da biomassa $C_{bvC}H_{bvH}O_{bvO}$, o Carbono não volátil segue sem volatilizar até a entrada da zona de oxidação, assim como o teor de umidade w da biomassa (Baxter, 1994). O carvão é modelado como carbono sólido (carbono não volátil)(Channiwala, 1992; Reed, 1981).

3.3.1 Reação Estequiométrica



3.3.2 Balanço Atômico

Balanço de Carbono

$$bvC = n_{p_C} + n_{p_CO_2} + n_{p_CO} + n_{p_CH_4} + 2n_{p_C_2H_2} \quad (2.53)$$

Balanço de Hidrogênio

$$bvH = 4n_{p_CH_4} + 2n_{p_H_2} + 2n_{p_C_2H_2} + 2n_{p_H_2O} \quad (2.54)$$

Balço de oxigênio

$$bvO = 2n_{p_CO_2} + n_{p_CO} + n_{p_H_2O} \quad (2.55)$$

3.3.3 Suposições

Para completar o sistema de equações é necessário fazer algumas suposições, as quais foram baseadas em observações experimentais.

Suposição 1: $\frac{4}{5}$ do oxigênio do combustível é associado com Hidrogênio do combustível para formar H_2O (Channiwala e Parikh, 2002; Mott e Spooner, 1940).

$$\frac{4}{5}bvO = n_{p_H_2O} \quad (2.56)$$

Suposição 2: $\frac{1}{5}$ do Oxigênio no combustível é associado com Carbono no combustível e libera CO e CO_2 (Channiwala e Parikh, 2002; Mott e Spooner, 1940).

$$\frac{1}{5}bvO = n_{p_CO} + 2n_{p_CO_2} \quad (2.57)$$

Suposição 3: A relação de moles de CO e CO_2 é inversamente relacionada com as suas massas moleculares $n_{p_CO}/n_{p_CO_2} = 44/28$ (Berends e Brem, 2002; Mastral *et al.*, 2002; Parikh *et al.*, 2002; Storm *et al.*, 1999; Van De Steene *et al.*, 2002).

$$n_{p_CO} = \frac{44}{28}n_{p_CO_2} \quad (2.58)$$

Suposição 4: 50% do Hidrogênio disponível é liberado como H_2 em decomposição (Parikh *et al.*, 2002; Storm *et al.*, 1999).

$$\frac{1}{2} \left(bvH - \frac{8}{5} bvO \right) = 2n_{p_{H_2}} \quad (2.59)$$

Suposição 5: O balanceado 50% de Hidrogênio disponível é liberado como CH_4 e C_2H_2 (Parikh *et al.*, 2002; Storm *et al.*, 1999).

$$\frac{1}{2} \left(bvH - \frac{8}{5} bvO \right) = 4n_{p_{CH_4}} + 2n_{p_{C_2H_2}} \quad (2.60)$$

Suposição 6: A relação de moles de CH_4 e C_2H_2 é inversamente relacionada com os seus pesos moleculares $n_{p_{CH_4}}/n_{p_{C_2H_2}} = 26,016/16,032$ (Berends e Brem, 2002; Mastral *et al.*, 2002; Parikh *et al.*, 2002; Storm *et al.*, 1999; Van De Steene *et al.*, 2002).

$$n_{p_{CH_4}} = \frac{26,016}{16,032} n_{p_{C_2H_2}} \quad (2.61)$$

3.3.4 Resolução do Balanço Atômico

De acordo com a equação (2.56):

$$n_{p_{H_2O}} = \frac{4}{5} bvO \quad (2.62)$$

De acordo com a equação (2.57):

$$\frac{1}{5} bvO = n_{p_{CO}} + 2n_{p_{CO_2}} \quad (2.63)$$

Substituindo a equação (2.58) na equação (2.57):

$$\rightarrow \frac{1}{5} bvO = \frac{44}{28} n_{p_{CO_2}} + 2n_{p_{CO_2}} \quad (2.64)$$

$$n_{p_{CO_2}} = \frac{7}{125} bvO \quad (2.65)$$

Substituindo $n_{p_CO_2}$ na equação (2.58), tem-se:

$$n_{p_CO} = \frac{44}{28} \left(\frac{7}{125} bvO \right) \quad (2.66)$$

$$n_{p_CO} = \frac{11}{125} bvO \quad (2.67)$$

De acordo com a equação (2.59):

$$\frac{1}{2} \left(bvH - \frac{8}{5} bvO \right) = 2n_{p_H_2} \quad (2.68)$$

$$n_{p_H_2} = \frac{1}{4} \left(bvH - \frac{8}{5} bvO \right) \quad (2.69)$$

Substituindo a equação (2.61) na equação (2.60):

$$\rightarrow \frac{1}{2} \left(bvH - \frac{8}{5} bvO \right) = 4 \left(\frac{26,016}{16,032} n_{p_C_2H_2} \right) + 2n_{p_C_2H_2} \quad (2.70)$$

$$n_{p_C_2H_2} = \frac{167}{2836} \left(bvH - \frac{8}{5} bvO \right) \quad (2.71)$$

Substituindo o $n_{p_C_2H_2}$ da equação (2.61):

$$n_{p_CH_4} = \frac{26,016}{16,032} \left[\frac{167}{2836} \left(bvH - \frac{8}{5} bvO \right) \right] \quad (2.72)$$

$$n_{p_CH_4} = \frac{271}{2836} \left(bvH - \frac{8}{5} bvO \right) \quad (2.73)$$

Isolando o n_{p_C} da equação (2.53):

$$bvC = n_{p_C} + n_{p_CO_2} + n_{p_CO} + n_{p_CH_4} + 2n_{p_C_2H_2} \quad (2.74)$$

$$\rightarrow n_{p_C} = bvC - n_{p_CO_2} - n_{p_CO} - n_{p_CH_4} - 2n_{p_C_2H_2} \quad (2.75)$$

Substituindo $n_{p_CO_2}$, n_{p_CO} , $n_{p_CH_4}$ e $n_{p_C_2H_2}$:

$$\begin{aligned} \rightarrow n_{p_C} = bvC - \left[\frac{7}{125} bvO \right] - \left[\frac{11}{125} bvO \right] - \left[\frac{271}{2836} \left(bvH - \frac{8}{5} bvO \right) \right] \\ - 2 \left[\frac{167}{2836} \left(bvH - \frac{8}{5} bvO \right) \right] \end{aligned} \quad (2.76)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow n_{p_C} = bvC - \left[\frac{7}{125} bvO \right] - \left[\frac{11}{125} bvO \right] - \left[\frac{271}{2836} bvH - \frac{542}{3545} bvO \right] \\ - 2 \left[\frac{167}{2836} bvH - \frac{334}{3545} bvO \right] \end{aligned} \quad (2.77)$$

$$n_{p_C} = bvC + \frac{59}{299} bo - \frac{16}{75} bh \quad (2.78)$$

O número de moles totais de água que sai é:

$$n_{pt_{H_2O}} = \frac{4}{5} bvO + w \quad (2.79)$$

O número de moles totais de Carbono que sai é:

$$n_{pt_C} = bvC + \frac{59}{299} bo - \frac{16}{75} bh + bnvC \quad (2.80)$$

3.3.5 Balanço de Energia para do Submodelo da Zona Secagem-Pirólise

$$\begin{aligned} [\bar{h}_f + (\bar{h}_T - \bar{h}_{298})]_{BS(T=Te)} + w[\bar{h}_f + (\bar{h}_T - \bar{h}_{298})]_{H_2O(T=Te)} \\ = \sum_i n_i [\bar{h}_f + (\bar{h}_{Ts} - \bar{h}_{298})]_{i(T=Ts)} + Q_p \end{aligned} \quad (2.81)$$

Seja:

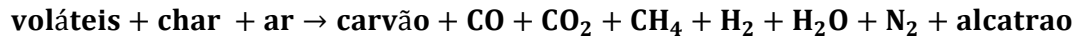
$$\overline{\Delta h}_f = \bar{h}_f + (\bar{h}_T - \bar{h}_{298})$$

$$\begin{aligned} & \bar{h}_{fb} + w[\overline{\Delta h}_f]_{H_2O(T=Te)} \\ &= n_{pt_C} \overline{\Delta h}_{f_pt_C} + n_{p_CO_2} \overline{\Delta h}_{f_p_CO_2} + n_{p_CO} \overline{\Delta h}_{f_p_CO} \\ &+ n_{p_CH_4} \overline{\Delta h}_{f_p_CH_4} + n_{p_H_2} \overline{\Delta h}_{f_p_H_2} + n_{p_C_2H_2} \overline{\Delta h}_{f_p_C_2H_2} \\ &+ n_{pt_H_2O} \overline{\Delta h}_{f_pt_H_2O} + Q_p \end{aligned} \quad (2.82)$$

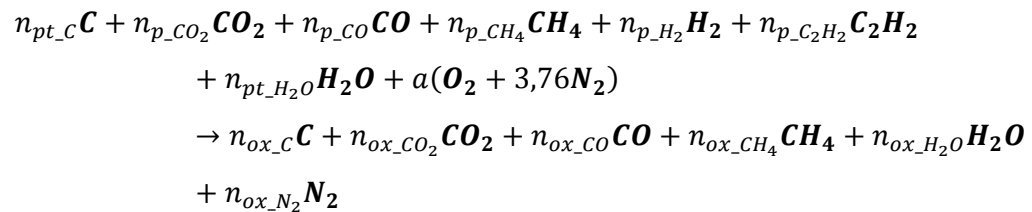
Onde é entendido que $\overline{\Delta h}_f$ é referente a cada composto à temperatura de saída da zona de pirólise. O calor perdido Q_p é calculado com base nas temperaturas características desta zona reportadas na literatura.

3.4 SUBMODELO OXIDAÇÃO

Esta zona pode ser simbolicamente representada pela reação:



3.4.1 Reação Estequiométrica



3.4.2 Balanço Atômico

Carbono:

$$\begin{aligned} n_{pt_C} + n_{p_CO_2} + n_{p_CO} + n_{p_CH_4} + 2n_{p_C_2H_2} \\ = n_{ox_C} + n_{ox_CO_2} + n_{ox_CO} + n_{ox_CH_4} \end{aligned} \quad (2.83)$$

Oxigênio:

$$2n_{p_CO_2} + n_{p_CO} + n_{pt_H_2O} + 2a = 2n_{ox_CO_2} + n_{ox_CO} + n_{ox_H_2O} \quad (2.84)$$

Hidrogênio:

$$4n_{p_CH_4} + 2n_{p_H_2} + 2n_{p_C_2H_2} + 2n_{pt_H_2O} = 4n_{ox_CH_4} + 2n_{ox_H_2O} \quad (2.85)$$

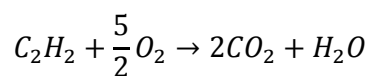
Nitrogênio:

$$2a(3,76) = 2n_{ox_N_2} \quad (2.86)$$

3.4.3 Suposições

Para completa o sistema de equações é necessário fazer algumas suposições, as quais foram baseadas em observações experimentais.

Suposição 1: O acetileno formado na pirólise é completamente oxidado.



$$n_{p_C_2H_2} = n_{ox1_H_2O} \quad (2.87)$$

$$2n_{p_C_2H_2} = n_{ox1_CO_2} \quad (2.88)$$

Moles de oxigênio consumidas nesta reação:

$$\frac{5}{2}n_{p_C_2H_2} = n_{ox1_O_2} \quad (2.89)$$

Verificando o Oxigênio restante:

$$FO1 = a - \frac{5}{2}n_{p_C_2H_2} \quad (2.90)$$

Si $FO1 \leq 0$

Moles totais de água na saída da zona de oxidação:

$$n_{ox_H_2O} = n_{pt_H_2O} + n_{ox1_H_2O} \quad (2.91)$$

$$n_{ox_H_2O} = n_{pt_H_2O} + n_{p_C_2H_2} \quad (2.92)$$

$$n_{ox_CO_2} = n_{p_CO_2} + n_{ox1_CO_2} \quad (2.93)$$

$$n_{ox_CO_2} = n_{p_CO_2} + 2n_{p_C_2H_2} \quad (2.94)$$

$$n_{o_CO} = n_{p_CO} \quad (2.95)$$

$$n_{ox_CO} = n_{p_CO} \quad (2.96)$$

Os moles de carvão remanente na zona de oxidação:

$$n_{ox_C} = n_{p_C} \quad (2.97)$$

$$n_{o_N_2} = 3,76a \quad (2.98)$$

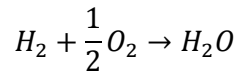
Assume-se que CH_4 segue sem reagir até a zona de redução:

$$n_{ox_CH_4} = n_{p_CH_4} \quad (2.99)$$

$$n_{ox_H_2} = n_{p_H_2} \quad (2.100)$$

Si $FO1 > 0$ continua com a suposição 2.

Suposição 2: O Hidrogênio formado na pirólise é completamente oxidado, gerando água devido a sua alta velocidade de queima (Amundson e Arri, 1978; Channiwala e Parikh, 2002; Cho e Joseph, 1981; Lewis e Von Elbe, 1987; Srinivas e Amundson, 1980; Thring, 1962).



$$n_{p_{H_2}} = n_{ox_{2H_2O}} \quad (2.101)$$

Oxigênio consumido nesta reação:

$$\frac{1}{2}n_{p_{H_2}} = n_{ox_{2-O_2}} \quad (2.102)$$

Verificando o Oxigênio restante:

$$FO2 = FO1 - n_{ox_{2-O_2}} = FO1 - \frac{1}{2}n_{p_{H_2}} \quad (2.103)$$

Si $FO2 \leq 0$

$$2(FO1) = n_{ox_{2-H_2O}} \quad (2.104)$$

Moles totais de água na saída da zona de oxidação:

$$n_{ox_H_2O} = n_{pt_H_2O} + n_{ox1_H_2O} + n_{ox2_H_2O} \quad (2.105)$$

$$n_{ox_H_2O} = n_{pt_H_2O} + n_{p_C_2H_2} + 2(F01) \quad (2.106)$$

$$n_{ox_CO_2} = n_{p_CO_2} + n_{ox1_CO_2} \quad (2.107)$$

$$n_{ox_CO_2} = n_{p_CO_2} + 2n_{p_C_2H_2} \quad (2.108)$$

$$n_{ox_CO} = n_{p_CO} \quad (2.109)$$

Calcula-se o carvão remanente da zona de oxidação:

$$n_{ox_C} = n_{p_C} \quad (2.110)$$

$$n_{o_N_2} = 3,76a \quad (2.111)$$

Assume-se que CH_4 segue sem reagir até a zona de redução:

$$n_{ox_CH_4} = n_{p_CH_4} \quad (2.112)$$

Consome-se só uma parte do hidrogênio proveniente da pirólise:

$$n_{ox_H_2} = n_{p_H_2} - 2(F01) \quad (2.113)$$

Si $F02 > 0$ continua com a suposição três.

Os moles de oxigênio restantes depois destas duas suposições são:

$$n_{R_O_2} = a - n_{ox1_O_2} - n_{ox2_O_2} \quad (2.114)$$

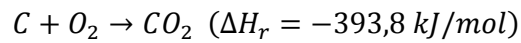
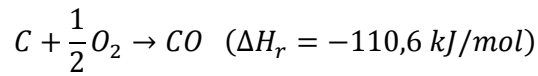
$$n_{R_O_2} = a - \frac{5}{2}n_{p_C_2H_2} - \frac{1}{2}n_{p_H_2} \quad (2.115)$$

Moles totais de água na saída da zona de oxidação:

$$n_{ox_H_2O} = n_{pt_H_2O} + n_{ox1_H_2O} + n_{ox2_H_2O} \quad (2.116)$$

$$n_{oxH_2O} = n_{ptH_2O} + n_{pC_2H_2} + n_{pH_2} \quad (2.117)$$

Suposição 3: O oxigênio restante será consumido na redução do carvão devido a sua maior área de reação disponível para absorção de O_2 (Bhagat, 1980; Channiwala, 1992; Evans e Emmons, 1977; Gumz, 1950; Lewis e Von Elbe, 1987; Thring, 1962).



$$2n_{1O_2} = n_{ox3_CO} \quad (2.118)$$

$$n_{2O_2} = n_{ox3_CO_2} \quad (2.119)$$

$$n_{2O_2} + n_{1O_2} = n_{R_O_2} \quad (2.120)$$

$$\rightarrow n_{2O_2} + n_{1O_2} = a - \frac{5}{2}n_{p_C_2H_2} - \frac{1}{2}n_{p_H_2} \quad (2.121)$$

$$\rightarrow n_{ox3_CO_2} + \frac{1}{2}n_{ox3_CO} = a - \frac{5}{2}n_{p_C_2H_2} - \frac{1}{2}n_{p_H_2} \quad (2.122)$$

Estas reações se realizaram em proporção inversa à suas exotermicidades (Channiwala, 1992; Gumz, 1950; Lewis e Von Elbe, 1987; Thring, 1962):

$$\frac{n_{ox3_CO}}{n_{ox3_CO_2}} = 3,5606 \quad (2.123)$$

$$\rightarrow n_{ox3_CO_2} + 3,5606 \left(\frac{1}{2}\right)n_{ox3_CO} = a - \frac{5}{2}n_{p_C_2H_2} - \frac{1}{2}n_{p_H_2} \quad (2.124)$$

$$\rightarrow 2,7803n_{ox3_CO_2} = a - \frac{5}{2}n_{p_C_2H_2} - \frac{1}{2}n_{p_H_2} \quad (2.125)$$

$$\rightarrow n_{ox3_CO_2} = \frac{\left(a - \frac{5}{2}n_{p_C_2H_2} - \frac{1}{2}n_{p_H_2}\right)}{2,7803} \quad (2.126)$$

$$n_{ox_CO_2} = n_{p_CO_2} + n_{ox1_CO_2} + n_{ox3_CO_2} \quad (2.127)$$

$$n_{ox_CO_2} = n_{p_CO_2} + 2n_{p_C_2H_2} + \frac{\left(a - \frac{5}{2}n_{p_C_2H_2} - \frac{1}{2}n_{p_H_2}\right)}{2,7803} \quad (2.128)$$

$$n_{ox3_CO} = 3,5606n_{ox3_CO_2} \quad (2.129)$$

$$n_{ox3_CO} = \frac{3,5606\left(a - \frac{5}{2}n_{p_C_2H_2} - \frac{1}{2}n_{p_H_2}\right)}{2,7803} \quad (2.130)$$

$$n_{o_CO} = n_{p_CO} + n_{ox3_CO} \quad (2.131)$$

$$n_{ox_CO} = n_{p_CO} + \frac{3,5606\left(a - \frac{5}{2}n_{p_C_2H_2} - \frac{1}{2}n_{p_H_2}\right)}{2,7803} \quad (2.132)$$

O carvão que é oxidado é calculado; como segue:

$$n_{cox_C} = n_{ox3_CO} + n_{ox3_CO_2} \quad (2.133)$$

$$n_{cox_C} = \frac{3,5606\left(a - \frac{5}{2}n_{p_C_2H_2} - \frac{1}{2}n_{p_H_2}\right)}{2,7803} + \frac{\left(a - \frac{5}{2}n_{p_C_2H_2} - \frac{1}{2}n_{p_H_2}\right)}{2,7803} \quad (2.134)$$

$$n_{cox_C} = \frac{4,5606}{2,7803}\left(a - \frac{5}{2}n_{p_C_2H_2} - \frac{1}{2}n_{p_H_2}\right) \quad (2.135)$$

O carvão remanescente da zona de oxidação será:

$$n_{ox_C} = n_{p_C} - n_{cox_C} \quad (2.136)$$

$$n_{ox_C} = n_{p_C} - \frac{4,5606}{2,7803} \left(a - \frac{5}{2} n_{p_C_2H_2} - \frac{1}{2} n_{p_H_2} \right) \quad (2.137)$$

$$n_{o_N_2} = 3,76a \quad (2.138)$$

Assume-se que CH_4 segue sem reagir até a zona de redução:

$$n_{ox_CH_4} = n_{p_CH_4} \quad (2.139)$$

3.4.4 Balanço de Energia para o Submodelo da Zona de Oxidação

$$\sum_i n_i [\bar{h}_f + (\bar{h}_T - \bar{h}_{298})]_{i(T=T_e)} = \sum_e n_e [\bar{h}_f + (\bar{h}_T - \bar{h}_{298})]_{e(T=T_s)} + Q_{ox} \quad (2.140)$$

Seja

$$\bar{\Delta h}_f = \bar{h}_f + (\bar{h}_T - \bar{h}_{298}) \quad (2.141)$$

$$\sum_i n_i [\bar{\Delta h}_f]_i = \sum_e n_e [\bar{\Delta h}_f]_e + Q_{ox} \quad (2.142)$$

$$\begin{aligned} & n_{pt_C} \bar{\Delta h}_f + n_{p_CO_2} \bar{\Delta h}_f + n_{p_CO} \bar{\Delta h}_f + n_{p_CH_4} \bar{\Delta h}_f + n_{p_H_2} \bar{\Delta h}_f + n_{p_C_2H_2} \bar{\Delta h}_f \\ & + n_{pt_H_2O} \bar{\Delta h}_f + a \bar{\Delta h}_f_{O_2} + 3,76a \bar{\Delta h}_f_{N_2} \\ & = n_{ox_C} \bar{\Delta h}_f + n_{ox_CO_2} \bar{\Delta h}_f + n_{ox_CO} \bar{\Delta h}_f + n_{ox_CH_4} \bar{\Delta h}_f \\ & + n_{ox_H_2} \bar{\Delta h}_f + n_{ox_H_2O} \bar{\Delta h}_f + n_{ox_N_2} \bar{\Delta h}_f + Q_{ox} \end{aligned} \quad (2.143)$$

Onde é entendido que $\bar{\Delta h}_f$ é referente a cada composto. O calor perdido Q_{ox} é calculado com base nas temperaturas características desta zona reportada na literatura.

3.5 SUBMODELO REDUÇÃO

O submodelo da zona de redução é baseado no modelo que foi originalmente apresentado por Giltrap (2002; 2003) e posteriormente modificado por BABU e SHETH (2006). Este modelo considera que durante a redução acontecem quatro reações simultâneas:

Reação 1: $C + CO_2 \leftrightarrow 2CO$ (reação de Boudouard)

Reação 2: $C + H_2O \leftrightarrow CO + H_2$ (reação primaria gás d'agua gás)

Reação 3: $C + 2H_2 \leftrightarrow CH_4$ (reação de metanação)

Reação 4: $CH_4 + H_2O \leftrightarrow CO + 3H_2$ (reação de reformação do vapor)

Baseando-se em princípios de cinética química calculam-se as velocidades para cada uma destas reações:

$$r_1 = (CRF)A_1 e^{\left(\frac{-E_1}{RT}\right)} \left(P_{CO_2} - \frac{P_{CO}^2}{K_1} \right) \quad (2.144)$$

$$r_2 = (CRF)A_2 e^{\left(\frac{-E_2}{RT}\right)} \left(P_{H_2O} - \frac{P_{CO} \cdot P_{H_2}}{K_2} \right) \quad (2.145)$$

$$r_3 = (CRF)A_3 e^{\left(\frac{-E_3}{RT}\right)} \left(P_{H_2}^2 - \frac{P_{CH_4}}{K_3} \right) \quad (2.146)$$

$$r_4 = A_4 e^{\left(\frac{-E_4}{RT}\right)} \left(P_{CH_4} \cdot P_{H_2O} - \frac{P_{CO} \cdot P_{H_2}^3}{K_4} \right) \quad (2.147)$$

O fator de reatividade do carvão (CRF) foi originalmente introduzido ao modelo de Giltrap (2002; 2003) por Babu e Sheth (2006), contudo, no presente modelo, a diferença do modelo de Babu e Sheth (2006), tem-se omitido o fator de reatividade do carvão da velocidade da reação R4, já que nesta reação ele não participa.

$$CRF = Ce^{bz} \quad (2.148)$$

Onde $C = 1$, $b = 36,7$ e Z é altura na zona de redução.

A Tabela 7 mostra os fatores de frequência e energia de ativação de cada reação.

Tabela 7 - Fator de frequência e energia de ativação

Reação	A_i (1/s)	E_i (kJ/mol)
1	$3,616 \times 10^1$	77,39
2	$1,517 \times 10^4$	121,62
3	$4,189 \times 10^{-3}$	19,21
4	$7,301 \times 10^{-2}$	36,15

O modelo assume uma zona de redução cilíndrica com área de seção transversal uniforme, desprezando-se as variações radiais das propriedades do gás. Com os balanços de massa, balanço de energia, lei dos gases ideais e equação de Ergún (1952) para fluxo através de um leito de partículas, completam-se um conjunto de nove equações diferenciais com nove incógnitas.

$$\frac{dn_x}{dz} = \frac{1}{v} \left(R_x - n_x \frac{dv}{dz} \right) \quad (2.149)$$

$$\frac{dT}{dz} = \frac{1}{v \sum_x n_x c_x} \left(- \sum_i r_i \Delta H_i - v \frac{dP}{dz} - P \frac{dv}{dz} - \sum_x R_x c_x T \right) \quad (2.150)$$

$$\frac{dv}{dz} = \frac{1}{\sum_x n_x c_x + nR} \left(\frac{\sum_x n_x c_x \sum_x R_x}{n} - \frac{\sum_i r_i \Delta H_i}{T} - \frac{dP}{dz} \left(\frac{v}{T} + \frac{v \sum_x n_x c_x}{P} \right) - \sum_x R_x c_x \right) \quad (2.151)$$

$$\frac{dP}{dz} = 1183 \left(\rho_{\text{gas}} \frac{v^2}{\rho_{\text{air}}} \right) + 388,19v - 79,896 \quad (2.152)$$

Solução da zona de redução: Foi usado o método de Runge-Kutta da biblioteca do programa Matlab® para resolver o sistema de equações diferenciais. O sistema fornece como resultado os perfis de concentração de seis espécies gasosas, o perfil de velocidade, o perfil de temperatura.

3.6 VALIDAÇÃO DO MODELO DO GASEIFICADOR

As predições das concentrações de gases na saída do gaseificador (em base seca) dadas pelo modelo desenvolvido foram comparadas com as medições experimentais tomadas por Jayah *et al.* (2003); as Tabela 8 e 9 mostram respectivamente a composição elementar e a composição imediata da biomassa utilizada nos experimentos de Jayah *et al.* (2003), e consequentemente os mesmos utilizados no modelo.

Tabela 8 - Composição imediata da Seringueira (“*Hevea Brasiliensis*”).

Parâmetro	% base seca
Matéria volátil	80,1
Carbono fixo	19,2
Conteúdo de cinzas	0,7

Tabela 9 - Composição elementar da Seringueira (“*Hevea Brasiliensis*”).

Parâmetro	%
C	50,6
H	6,5
N	0
Conteúdo de cinzas (A)	0,7
$O = \{100 - (C + H + N + A)\}$	42,2

A Tabela 10 mostra a comparação das concentrações determinadas pelo modelo contra as concentrações medidas nos experimentos de Jayah *et al.* (2003) para diferentes concentrações de umidade e relação ar-combustível. Para cada corrida calcula-se o desvio padrão $DP = \left(\sum_{i=1}^5 |y_{\text{exp}} - y_{\text{mod}}|_i \right) / 5$ onde i representa cada uma das cinco espécies de gases consideradas (CO , CO_2 , CH_4 , H_2 , H_2O e N_2) e y_{exp} e y_{mod} representam as concentrações experimentais e do modelo respectivamente. Pode-se observar que para as sete corridas em media foi atingido um desvio padrão de 1.170 pontos percentuais, o que quer dizer que os valores das concentrações preditas pelo modelo estão muito próximos a aqueles medidos nos experimentos de Jayah *et al.* (2003). Para melhor visualização, na **Figura 9** mostra-se o gráfico de barras das concentrações e a **Figura 10** correspondente comparação dos perfis de temperatura experimental e simulada, na zona de redução.

Tabela 10 - Comparação das concentrações experimentais de Jayah (2003) contra as concentrações previstas pelo modelo do NEST na saída do reator em base seca.

Corrida	Experimental Jayah <i>et al.</i> (2003)		Modelo NEST					Desvio Padrão Médio %
	Umidade % b. s.	Relação Ar/combustível	N ₂ (%)	CO ₂ (%)	CO (%)	CH ₄ (%)	H ₂ (%)	
1	18,5	2,03	51,9	9,9	19,6	1,4	17,2	1,280
			53,9	11,1	18,9	1,0	15,1	
2	16	2,2	50,7	9,7	20,2	1,1	18,3	1,972
			54,5	10,8	19,2	0,9	14,5	
3	14,7	2,37	52,6	9,7	19,4	1,1	17,2	1,372
			55,0	10,6	19,6	0,9	14,0	
4	16	1,96	52,7	10,6	18,4	1,3	17,0	0,815
			53,9	11,1	18,7	1,1	15,2	
5	15,2	2,12	55,0	10,8	19,7	1,3	13,2	0,637
			54,4	10,9	19,1	1,0	14,7	
6	14	2,29	59,1	8,5	18,9	1,2	12,5	1,776
			54,9	10,7	19,4	0,9	14,2	
7	14,7	1,86	52,9	11,4	19,1	1,1	15,5	0,339
			53,7	11,3	18,4	1,2	15,4	

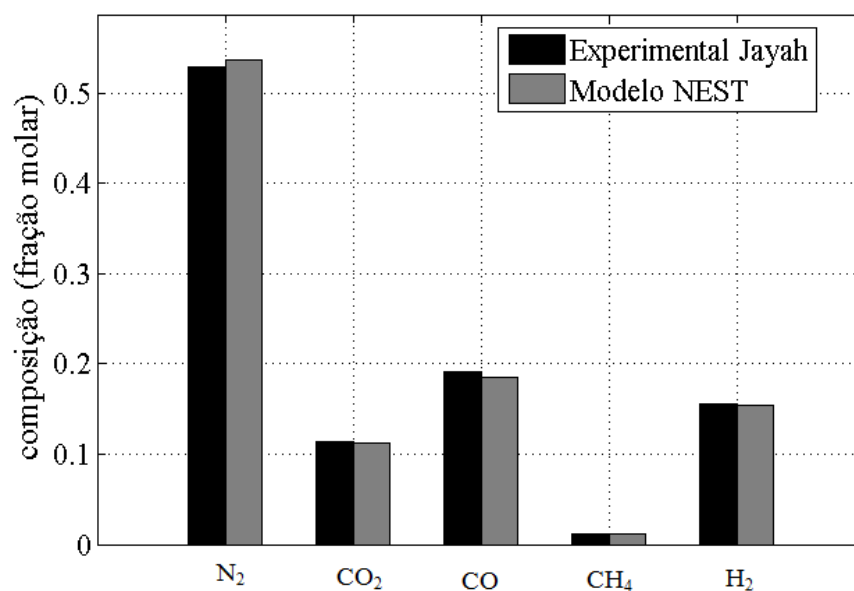


Figura 9 - Gráfico de barras das concentrações no gás.

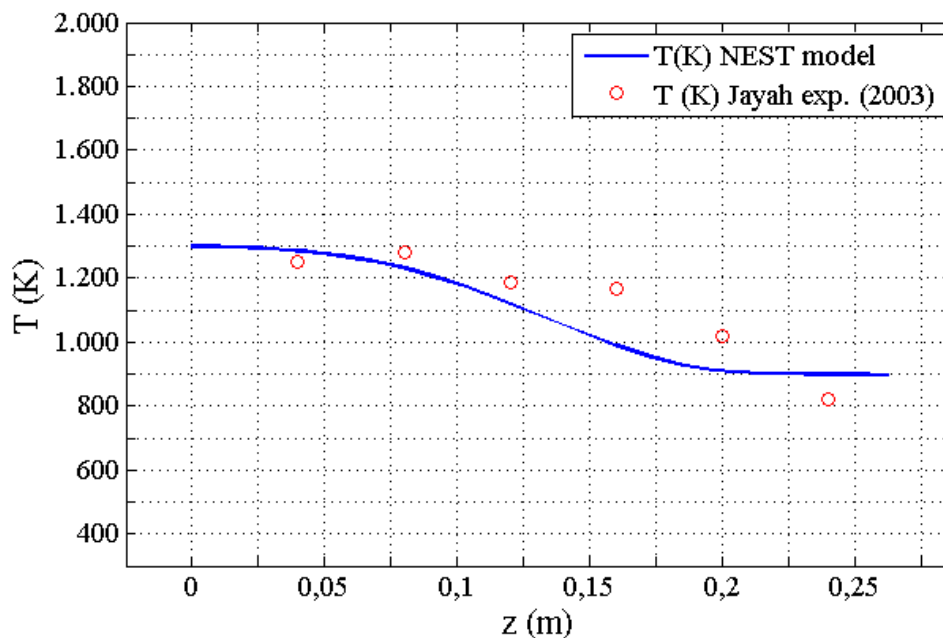


Figura 10 - Comparação perfil (evolução com a altura z) de temperaturas na zona de redução.

A Figura 11 mostra a comparação do modelo com os resultados experimentais de Chee (1987), Senelwa (1997) e os modelos de Giltrap *et al.* (2002; 2003) e Sharma (2008). A Tabela 11 e a Tabela 12 mostram as composições imediatas e elementares da biomassa utilizada e a Tabela 13 mostra alguns parâmetros utilizados no processo de gaseificação.

Tabela 11 - Composição imediata da biomassa utilizada (Casca de *Pseudotsuga*).

Parâmetro	% b. s.
Matéria volátil	73
Carbono fixo	25,8
Cinzas (A)	1,2

Tabela 12 - Composição elementar da biomassa utilizada (Casca de *Pseudotsuga*).

Parâmetro	% b. s.
C	56,2
H	5,9
N	0
$O = \{100 - (C + H + N + A)\}$	36,7

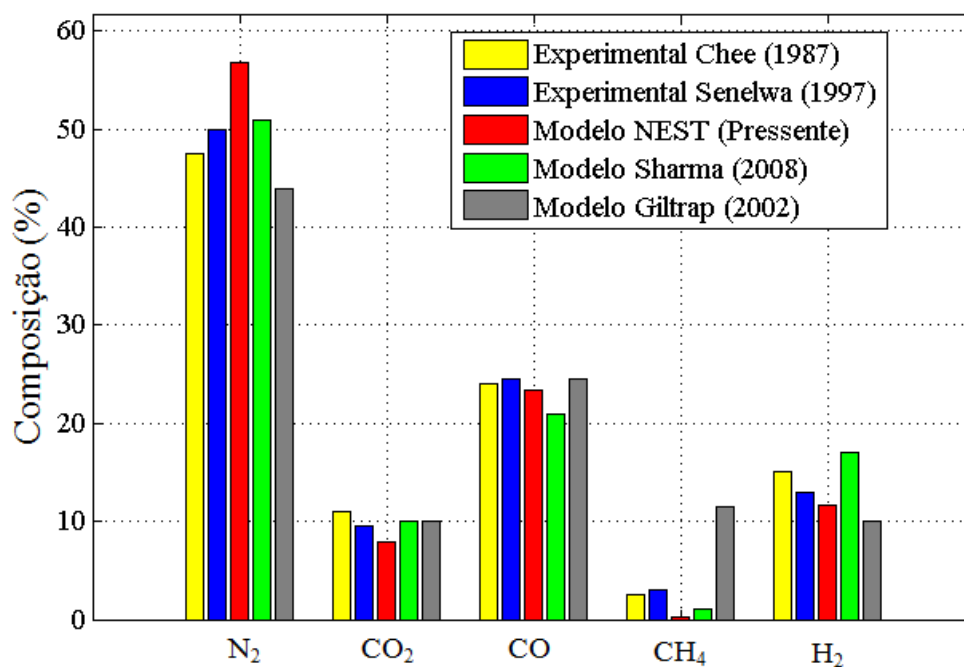


Figura 11 - Comparação de concentrações com vários modelos e resultados experimentais

Tabela 13 - Parâmetros usados durante o processo de gaseificação

Parâmetro	Chee (1987) (Experimental)	Senelwa (1997) (Experimental)	Presente modelo	Giltrap (2002) (Modelo)	Sharma (2008) (modelo)
Comprimento Da zona de redução	-	0,275 m	0,275 m	0,275 m	0,275 m
Biomassa	Tronco de algodão	-	Casca de Pseudotsuga	Casca de Pseudotsuga	Casca de Pseudotsuga
Umidade	5,4 % b.u.	Secada em forno	5,4% b.u.	Seca	5,4 % b.u.
Relação equivalente (comb./ar)	1,67	-	1,67	-	(0,4)

Na Figura 11 pode-se observar que nem todos os modelos ou experimentos mostram exatamente os mesmos resultados, mas sim comportamentos parecidos, isso pode ser devido a que de acordo com a Tabela 13 alguns dos parâmetros utilizados em cada caso, são um pouco diferentes ou não são fornecidos pela fonte bibliográfica.

Na Tabela 14 é apresentada a comparação entre os valores experimentais obtidos por Martínez (2009) no laboratório do NEST e o presente modelo. A biomassa utilizada nestes experimentos foi lenha de eucalipto, na Tabela 15 se mostra a composição imediata do eucalipto e na Tabela 16 a composição elementar do eucalipto. De acordo com Martínez (2009), nestes experimentos a umidade foi assumida constante (10% base seca).

Tabela 14 - Comparação das concentrações experimentais de Martínez (2009) contra as concentrações previstas pelo modelo do NEST.

Fator de ar	CO (%)	CH ₄ (%)	H ₂ (%)	Desvio Padrão Médio (%)
0,34	16,98	1,88	16,25	1,23
	19,27	0,70	16,47	
0,35	17,03	1,83	15,70	1,36
	19,39	0,68	16,27	
0,36	16,66	1,98	14,84	1,80
	19,50	0,65	16,08	
0,37	16,23	1,67	14,95	1,79
	19,61	0,63	15,89	
0,38	15,66	1,76	14,54	2,12
	19,72	0,61	15,71	
0,40	14,75	1,50	13,81	2,55
	19,93	0,58	15,36	
Modelo		Exp. Martínez (2009)		

Tabela 15 - Composição imediata da lenha de Eucalipto.

Parâmetro	% b. s.
Matéria volátil	75,35
Carbono fixo	21,3
Cinzas (A)	3,35

Tabela 16 - Composição elementar da lenha de Eucalipto

Parâmetro	%
C	46,04
H	5,82
N	0
O={100-(C+H+N+A)}	44,79

As diferenças entre as previsões do modelo e os dados experimentais de Martínez (2009) podem ser devidas a vários fatores:

- Nos experimentos não foram tomados dados experimentais da umidade da biomassa para cada corrida e poderia estar variando assim como aconteceu nos experimentos de Jayah *et al.* (2003) mostrados na Tabela 10.
- Os dados das composições imediata e elementar da lenha de eucalipto não foram determinados nos experimentos e para a simulação no modelo foram tomados de outra fonte bibliográfica (Parikh *et al.*, 2005), os dados apresentados nas tabelas Tabela 15 e Tabela 16 poderiam ser um pouco diferentes á aqueles da biomassa utilizada nos experimentos.
- O fator de ar nos experimentos de Martínez (2009) foi calculado depois de um balanço estequiométrico geral do gaseificador o qual levava algumas simplificações que podem fazer com que o fator de ar reportado seja um pouco diferente do real.
- O gaseificador usado nos experimentos de Martínez (2009) tem duas entradas de ar o qual poderia causar algum efeito que não possa ser detectado pelo submodelo da zona de oxidação já que este é zero dimensional.

3.7 EVOLUÇÃO DAS CONCENTRAÇÕES DAS ESPÉCIES NO GÁS DE BIOMASSA NA ZONA DE REDUÇÃO

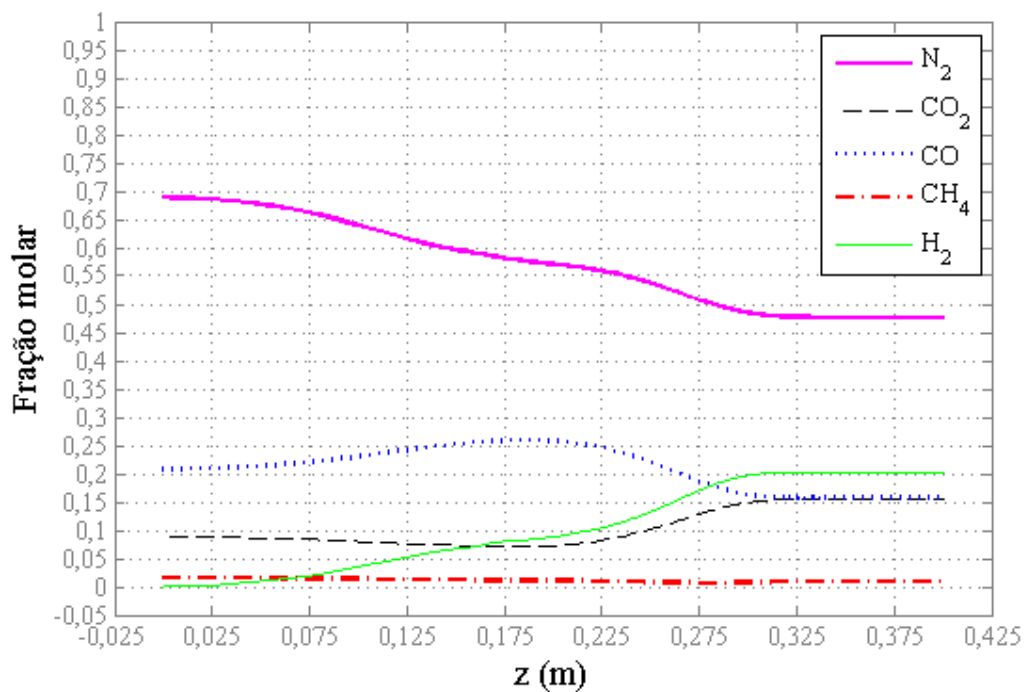


Figura 12 - Concentrações das espécies na zona de redução.

A figura 12 mostra a evolução das frações molares em base seca das cinco espécies consideradas no gás de biomassa (N_2 , CO_2 , CO , CH_4 e H_2) na medida em que descem pelo comprimento do eixo da zona de redução (Z). A simulação foi feita para um comprimento da zona de redução de 0,4 m com o objetivo de mostrar como é atingido o equilíbrio. Observa-se que perto dos 0,3 m as concentrações se estabilizam, virando linhas horizontais o qual é sinal de que foi atingido o equilíbrio termoquímico.

Capitulo 4

MODELO MATEMÁTICO DO MOTOR DE COMBUSTÃO INTERNA, ALTERNATIVO DE IGNIÇÃO POR CENTELHA

Podem-se enumerar os quatro tempos de um ciclo Otto como:

1. Admissão
2. Compressão
3. Potência (combustão e expansão)
4. Exaustão

Na Figura 13 é mostrado um esquema com as dimensões básicas do motor de combustão interna e na Figura 14 é mostrado o diagrama do ciclo Otto.

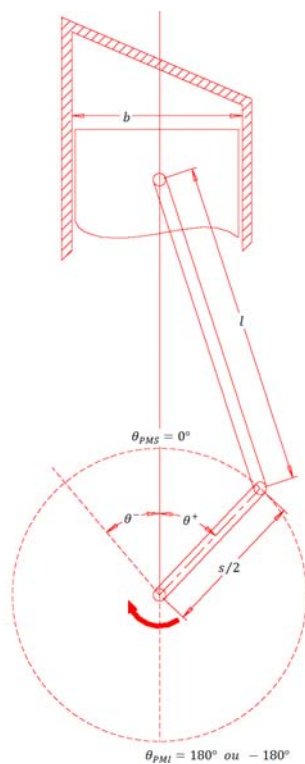


Figura 13 - Geometria básica do motor.

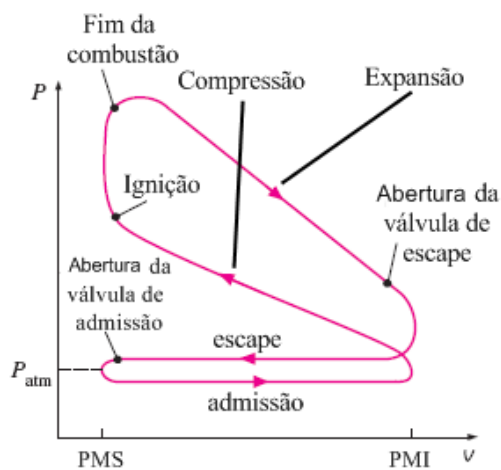


Figura 14 - Ciclo Otto de quatro tempos.

Diferente do gaseificador, o motor de combustão interna tem sido objeto de estudo há muitos anos e encontram-se na literatura muitos modelos matemáticos do mesmo, com diferentes graus de complexidade. O modelo matemático que foi escolhido para simular o funcionamento do motor de combustão interna de ciclo Otto é baseado no modelo desenvolvido por Ferguson (1986) o qual tem sido adaptado para poder trabalhar com gás de biomassa. Devido ao fato de este modelo ser muito detalhado, recomendase visitar a

referencia (Ferguson, 1986) para entender melhor a formulação. A seguir apresenta-se um resumo da formulação do modelo de Ferguson (1986) e logo após é apresentado o método para determinar as propriedades do gás de biomassa como combustível, o qual é o principal aporte realizado no modelo.

4.1 FORMULAÇÃO GERAL DO MODELO

O modelo de Ferguson (1986) consiste de um sistema de seis equações diferenciais, para simplificar a formulação das equações, primeiro se estabelecem cinco variáveis (A , B , C , D e E):

$$A = \frac{1}{m} \left(\frac{dV}{d\theta} + \frac{VC}{\omega} \right) \quad (3.1)$$

$$B = h \frac{\left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right)}{\omega m} \left[\frac{v_b}{c_{pb}} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} x^{(1/2)} \frac{T_b - T_w}{T_b} + \frac{v_u}{c_{pu}} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} (1 - x^{(1/2)}) \frac{T_u - T_w}{T_w} \right] \quad (3.2)$$

$$C = -(v_b - v_u) \frac{dx}{d\theta} - v_b \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \frac{h_u - h_b}{c_{pb} T_b} \left[\frac{dx}{d\theta} - \frac{(x - x^2)C}{\omega} \right] \quad (3.3)$$

$$D = x \left[\frac{v_b^2}{c_{pb} T_b} \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right)^2 + \frac{v_b}{P} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln P} \right] \quad (3.4)$$

$$E = (1 - x) \left[\frac{v_u^2}{c_{pu} T_u} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)^2 + \frac{v_u}{P} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln P} \right] \quad (3.5)$$

Nessas equações, os subscritos b referense a combustível queimado, os subscritos u a combustível fresco e os subscritos w fazem referencia a parede do cilindro do motor. Com base nas variáveis A , B , C , D e E definidas acima, a seguir se mostram as seis equações diferenciais:

$$\frac{dP}{d\theta} = \frac{A + B + C}{D + E} \quad (3.6)$$

$$\frac{dT_b}{d\theta} = \frac{-h \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) x^{(1/2)} (T_b - T_w)}{\omega m c_{pb} x} + \frac{v_b}{c_{pb}} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \left(\frac{A + B + C}{D + E} \right) + \frac{h_u - h_b}{x c_{pb}} \left[\frac{dx}{d\theta} - (x - x^2) \frac{C}{\omega} \right] \quad (3.7)$$

$$\frac{dT_u}{d\theta} = \frac{-h \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) (1 - x^{(1/2)}) (T_u - T_w)}{\omega m c_{pb} (1 - x)} + \frac{v_u}{c_{pu}} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \left(\frac{A + B + C}{D + E} \right) \quad (3.8)$$

$$\frac{dW}{d\theta} = P \frac{dV}{d\theta} \quad (3.9)$$

$$\frac{dQ_l}{d\theta} = \frac{h}{\omega} \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) \left[x^{(1/2)} (T_b - T_u) + (1 - x^{(1/2)}) (T_u - T_w) \right] \quad (3.10)$$

$$\frac{dH_l}{d\theta} = \frac{Cm}{\omega} [(1 - x^2)h_u + x^2h_b] \quad (3.11)$$

Cada equação diferencial representa a mudança de uma variável por unidade de mudança no ângulo (θ) do eixo de manivelas, sendo as variáveis: pressão (P), temperaturas de gases queimados (T_b), temperatura de gases não queimados (T_u), trabalho (W), calor perdido (Q_l) e entalpia perdida (H_l)

A seguir apresenta-se uma descrição resumida das variáveis envolvidas no sistema de equações diferenciais:

As variáveis: constante de blowby (C), RPM do motor (ω), diâmetro do cilindro (b), temperatura das paredes do cilindro (T_w) e o coeficiente de transferência de calor das paredes do cilindro (h) são constantes especificadas pelo usuário de acordo com o tipo de motor e características de operação.

As variáveis: massa (m), volume do cilindro (V) e fração de massa queimada (x) são todas funções conhecidas do ângulo (θ) do eixo de manivelas.

A massa:

$$m = m_1 \exp[-C(\theta - \theta_1)/\omega] \quad (3.12)$$

Sendo r a relação de compressão, V_0 o volume do cilindro quando o pistão está no ponto morto superior e $\epsilon = S/2l$ (S = Curso do pistão e l = comprimento da biela), o volume do cilindro e:

$$V = V_0 \left[1 + \frac{r-1}{2} \left\{ 1 - \cos \theta + \frac{1}{\epsilon} \left[1 - (1 - \epsilon^2 \sin^2 \theta)^{1/2} \right] \right\} \right] \quad (3.13)$$

A fração de massa queimada:

$$x = \begin{cases} 0 & \theta < \theta_s \\ \frac{1}{2} \left\{ 1 - \cos \left[\frac{\pi(\theta - \theta_s)}{\theta_b} \right] \right\} & \theta_s < \theta < \theta_s + \theta_b \\ 1 & \theta > \theta_s + \theta_b \end{cases} \quad (3.14)$$

As variáveis: volume específico de gases queimados (v_b), volume específico de gases não queimados (v_u), entalpia de gases queimados (h_b), entalpia de gases não queimados (h_u), calor específico de gases queimados (c_{pb}), calor específico de gases não queimados (c_{pu}) e as derivadas parciais $\left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b}, \frac{c \ln v_u}{\partial \ln T_u}, \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln P}, \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln P} \right)$ são propriedades termodinâmicas e funções conhecidas de P , T_b e T_u . As propriedades termodinâmicas dos gases queimados são calculadas com um método desenvolvido por Olikara e Borman (1975), a programação do método em código Matlab pode ser encontrada no arquivo `ecp.m` do apêndice. Os gases não queimados são uma mistura de: produtos residuais da combustão, ar e combustível. As propriedades termodinâmicas do combustível são calculadas com base no método mostrado no trabalho de Ferguson (1986) o qual usa resultados de um trabalho desenvolvido pela Ford Motor Co. e Massachusetts Institute of Technology (Hires *et al.*, 1976), os códigos de Matlab podem ser encontrados no arquivo `farg.m` no apêndice.

4.2 PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO COMBUSTÍVEL

Para modelar o motor, é necessário conhecer as propriedades termodinâmicas (calor específico, entalpia e entropia) do combustível como função da temperatura. Heywood (1988) representa as propriedades termodinâmicas de alguns combustíveis usando curvas dadas por:

$$c_p = R \left(a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 \frac{1}{T^2} \right) \quad (3.15)$$

$$h = R \left[a_1 T + \frac{a_2}{2} T^2 + \frac{a_3}{3} T^3 + \frac{a_4}{4} T^4 - a_5 \frac{1}{T} + a_6 \right] \quad (3.16)$$

$$S = R \left[a_1 \ln(T) + a_2 T + \frac{a_3}{2} T^2 + \frac{a_4}{3} T^3 - \frac{a_5}{2} \frac{1}{T^2} + a_7 \right] \quad (3.17)$$

A Tabela 17 mostra diferentes opções de combustíveis usados no algoritmo de Ferguson (1988) com seus respectivos valores de referencia para entalpia e entropia (a $T = 298,15 \text{ K}$ e $P = 101,325 \text{ kPa}$). Para completar estas tabelas tem sido usada varias fontes bibliográficas (Ferguson, 1986; Heywood, 1988; Raine *et al.*, 1995; Stone, 1999; Turns, 2006).

Tabela 17 - Valores de referencia para entalpia e entropia de alguns combustíveis.

Nome no arquivo-M	Composição	Fonte	\bar{h}_f^0 (kJ/kmol)	\bar{s}^0 (kJ/kmol K)
'methane'	CH ₄	(Ferguson, 1986)	-74846	186,29
'methane_h'	CH ₄	(Heywood, 1988)	-74870	186,271
'propane'	C ₃ H ₈	(Heywood, 1988)	-103856	270,2
'benzene'	C ₆ H ₆	(Ferguson, 1986)	82939	269,241
'hexane'	C ₆ H ₁₄	(Heywood, 1988)	-167028	386,811
'toluene'	C ₇ H ₈	(Raine <i>et al.</i> , 1995)	49999	319,742
'isooctane'	C ₈ H ₁₈	(Raine <i>et al.</i> , 1995)	-224012	422,964
'isooctane_h'	C ₈ H ₁₈	(Heywood, 1988)	-224109	422,96
'methanol'	CH ₃ OH	(Ferguson, 1986)	-201161	239,72
'methanol_h'	CH ₃ OH	(Heywood, 1988)	-201004	239,882
'ethanol'	C ₂ H ₅ OH	(Heywood, 1988)	-236266	280,64
'nitromethane'	CH ₃ NO ₂	(Ferguson, 1986)	-74718	275,044
'gasoline'	C ₇ H ₁₇	(Ferguson, 1986)	-267089	465,242
'gasoline_h1'	C _{8,26} H _{15,5}	(Heywood, 1988)	-112702	
'gasoline_h2'	C _{7,76} H _{13,1}	(Heywood, 1988)	-72105	
'diesel'	C _{14,4} H _{24,9}	(Ferguson, 1986)	-99946	645,445
'diesel_h'	C _{10,8} H _{18,7}	(Heywood, 1988)	-180940	

Já que o gás de biomassa que vai entrar no motor é uma combinação de várias espécies (CO, CO₂, H₂, CH₄ e N₂) em diferentes proporções que mudam de acordo com os parâmetros geométricos e de operação do reator, o trabalho principal foi desenvolver um método para

determinar os coeficientes ($a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$ e a_7) das propriedades termodinâmicas do gás de biomassa de forma dinâmica, ou seja, colocar os coeficientes em função das concentrações das espécies presentes no gás de biomassa.

O calor específico $c_{p,mix}$ de uma mistura de N espécies de gases, cada um dos quais tem um calor específico c_{pi} e se encontra a uma fração molar y_i , pode ser calculado pela equação (3.18):

$$c_{p,mix} = \sum_{i=1}^N y_i c_{pi} \quad (3.18)$$

Pode-se encontrar na literatura varias compilações de dados termodinâmicos para diferentes espécies químicas (Barin e Platzki, 1995; Binnewies e Milke, 2002; Stull *et al.*, 1971). Com base na equação anterior e utilizando as tabelas de dados termodinâmicos de cada uma das espécies no gás de biomassa, pode-se obter um $c_{p,mix}$ pra cada temperatura disponível na tabela. O conjunto de dados ($T_j, c_{p,mixj}$) é ajustado a uma equação da forma:

$$c_{p,mix} = R \left(a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 \frac{1}{T^2} \right) \quad (3.19)$$

Dando como resultado os coeficientes a_1, a_2, a_3, a_4 e a_5 . A determinação dos coeficientes a_6 e a_7 é baseada em conceitos termodinâmicos e matemáticos, tal como é mostrado a seguir:

Da termodinâmica tem-se que:

$$dh = c_p dT \quad (3.20)$$

Substituindo o c_p :

$$h - h_0 = R \int_{T_0}^T \left(a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 \frac{1}{T^2} \right) dT \quad (3.21)$$

Continuando com as operações matemáticas:

$$h - h_0 = R \left(a_1 T + \frac{a_2}{2} T^2 + \frac{a_3}{3} T^3 + \frac{a_4}{4} T^4 - a_5 \frac{1}{T} \right)_{T_0}^T \quad (3.22)$$

$$\rightarrow h = R \left(a_1 T + \frac{a_2}{2} T^2 + \frac{a_3}{3} T^3 + \frac{a_4}{4} T^4 - a_5 \frac{1}{T} \right)_{T_0}^T + h_0 \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow h = R \left[a_1 T + \frac{a_2}{2} T^2 + \frac{a_3}{3} T^3 + \frac{a_4}{4} T^4 - a_5 \frac{1}{T} \right. \\ \left. - \left(a_1 T_0 + \frac{a_2}{2} T_0^2 + \frac{a_3}{3} T_0^3 + \frac{a_4}{4} T_0^4 - a_5 \frac{1}{T_0} \right) \right] + h_0 \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow h = R \left[a_1 T + \frac{a_2}{2} T^2 + \frac{a_3}{3} T^3 + \frac{a_4}{4} T^4 - a_5 \frac{1}{T} \right. \\ \left. - \left(a_1 T_0 + \frac{a_2}{2} T_0^2 + \frac{a_3}{3} T_0^3 + \frac{a_4}{4} T_0^4 - a_5 \frac{1}{T_0} \right) + \frac{h_0}{R} \right] \end{aligned} \quad (3.25)$$

Finalmente tem-se o coeficiente a_6 :

$$a_6 = \frac{h_0}{R} - \left(a_1 T_0 + \frac{a_2}{2} T_0^2 + \frac{a_3}{3} T_0^3 + \frac{a_4}{4} T_0^4 - a_5 \frac{1}{T_0} \right) \quad (3.26)$$

E pode-se desenvolver a entalpia como sendo:

$$h = R \left[a_1 T + \frac{a_2}{2} T^2 + \frac{a_3}{3} T^3 + \frac{a_4}{4} T^4 - a_5 \frac{1}{T} + a_6 \right] \quad (3.27)$$

Diferenciando h teremos:

$$dh = R \left(a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 \frac{1}{T^2} \right) dT \quad (3.28)$$

Da termodinâmica tem-se:

$$dS = \frac{dh}{T} \quad (3.29)$$

Substituindo dh :

$$S - S_0 = R \int_{T_0}^T \frac{(a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5 \frac{1}{T^2}) dT}{T} \quad (3.30)$$

Continuando com as operações matemáticas:

$$S - S_0 = R \int_{T_0}^T \left(\frac{a_1}{T} + a_2 + a_3T + a_4T^2 + a_5 \frac{1}{T^3} \right) dT \quad (3.31)$$

$$\rightarrow S - S_0 = R \left[a_1 \ln(T) + a_2T + \frac{a_3}{2}T^2 + \frac{a_4}{3}T^3 - \frac{a_5}{2} \frac{1}{T^2} \right]_{T_0}^T \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow S = R \left[a_1 \ln(T) + a_2T + \frac{a_3}{2}T^2 + \frac{a_4}{3}T^3 - \frac{a_5}{2} \frac{1}{T^2} \right. \\ \left. - \left(a_1 \ln(T_0) + a_2T_0 + \frac{a_3}{2}T_0^2 + \frac{a_4}{3}T_0^3 - \frac{a_5}{2} \frac{1}{T_0^2} \right) \right] + S_0 \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow S = R \left[a_1 \ln(T) + a_2T + \frac{a_3}{2}T^2 + \frac{a_4}{3}T^3 - \frac{a_5}{2} \frac{1}{T^2} \right. \\ \left. - \left(a_1 \ln(T_0) + a_2T_0 + \frac{a_3}{2}T_0^2 + \frac{a_4}{3}T_0^3 - \frac{a_5}{2} \frac{1}{T_0^2} \right) + \frac{S_0}{R} \right] \end{aligned} \quad (3.34)$$

Finalmente tem-se o coeficiente a_7 :

$$a_7 = \frac{S_0}{R} - \left(a_1 \ln(T_0) + a_2T_0 + \frac{a_3}{2}T_0^2 + \frac{a_4}{3}T_0^3 - \frac{a_5}{2} \frac{1}{T_0^2} \right) \quad (3.35)$$

Onde h_0 , S_0 são os valores de referência na temperatura e pressão de referência (T_0 e P_0) para entalpia e entropia respectivamente.

A programação em código de Matlab do cálculo dos coeficientes (a_1 , a_2 , a_3 , a_4 , a_5 , a_6 e a_7) das propriedades termodinâmicas do gás de biomassa, podem ser encontradas no arquivo `fueldata.m` no apêndice.

4.3 FUNCIONAMENTO DOS CÓDIGOS DO MODELO

A programação do modelo do motor é composta por vários arquivos `.m` (M-File) de Matlab. Como Buttsworth (2002), opta-se por manter os nomes originais das variáveis e dos arquivos, para facilitar o relacionamento do código Matlab aqui apresentado, com as referências do trabalho de Ferguson (1986). A Tabela 18 mostra a descrição de cada um dos arquivos do modelo do motor. Para utilizar o modelo primeiro devem modificarse as características do motor no arquivo `enginedata.m` e depois executar o arquivo `ahrind.m`.

Tabela 18 - Descrição dos arquivos de programação em Matlab do modelo do motor

Arquivo-M	Descrição
Ahrind	Arquivo principal para simulação, neste arquivo são lidos os parâmetros de projeto e operação do motor dados no arquivo <code>enginedata.m</code> e é resolvido o sistema de equações diferenciais em três fases de integração (compressão, combustão e expansão). Finalmente neste arquivo são calculados parâmetros característicos do motor como: potência indicada, eficiência térmica e pressão indicada efetiva.
Airdata	Rotina para especificar as propriedades termodinâmicas do ar e dos produtos da combustão. Com base nos trabalhos de Gordon e Mcbride (1971) e Kee <i>et al.</i> (1987).
Calcq	Rotina para calcular o fluxo de calor dependendo da fase de integração (compressão, combustão ou expansão).
Ecp	Rotina para determinar o estado de equilíbrio dos produtos da combustão. Com base nos trabalhos de Ferguson (1986) e Olikara e Borman (1975).
Enginedata	Arquivo para definir as características e condições de operação do motor.
Farg	Rotina para determinar o estado da mistura: combustível, ar e produtos residuais da combustão. Com base nos trabalhos de Ferguson (1986) e de Hires <i>et al.</i> (1976).
Fueldata	Rotina para determinar as propriedades termodinâmicas do combustível, detalhes dos códigos deste arquivo foram tratados no capítulo anterior.
RatesComb	Neste arquivo se escreve o sistema de seis equações diferenciais, com condições iniciais dispostas para integrar na fase de combustão.
RatesComp	Neste arquivo se escreve o sistema de seis equações diferenciais, com condições iniciais dispostas para integrar na fase de compressão.
RatesExp	Neste arquivo se escreve o sistema de seis equações diferenciais, com condições iniciais dispostas para integrar na fase de expansão.
Tadiabatic	Rotina para calcular a temperatura adiabática de chama.

4.4 VALIDAÇÃO DO MODELO DO MOTOR

Para validar o modelo do motor seus resultados foram comparados com os resultados dos testes experimentais obtidos por Martinez (2009) nos laboratórios do Núcleo de excelência em Geração Termelétrica e distribuída NEST da Universidade Federal de Itajubá. A Tabela 19 mostra os dados gerados pelo modelo e os respectivos dados experimentais para 5 diferentes condições de carga do motor. A figura 14 mostra um gráfico de barras da comparação das potências elétricas medidas por Martinez (2009) contra as potências elétricas previstas pelo modelo. Tomando como referência as medições experimentais, as previsões do modelo têm em promedio um erro de 11,53%. Estas previsões poderiam ser melhoradas modificando no modelo dados tais como: temperatura da parede do motor, condutividade térmica do material do motor, variação das concentrações das espécies no gás alimentado a o motor em cada um dos ensaios desgaste do pistão, etc.

Tabela 19 – Comparação das potências elétricas medidas por Martinez (2009) contra as potências elétricas previstas pelo modelo.

#	V1	V2	V3	V4	V5
1	100000,00	0,94	8,88	6,04	5,12
2	87890,63	0,89	7,28	4,95	4,50
3	71679,69	0,87	5,68	3,86	3,67
4	53710,94	0,84	3,92	2,67	2,75
5	28320,31	0,86	1,68	1,14	1,45

#: Ensaio

V1: Pressão inicial [Pa]

V2: Razão de equivalência combustível – ar

V3: Potência indicada [kW]

V4: Potência elétrica (modelo) [kW]

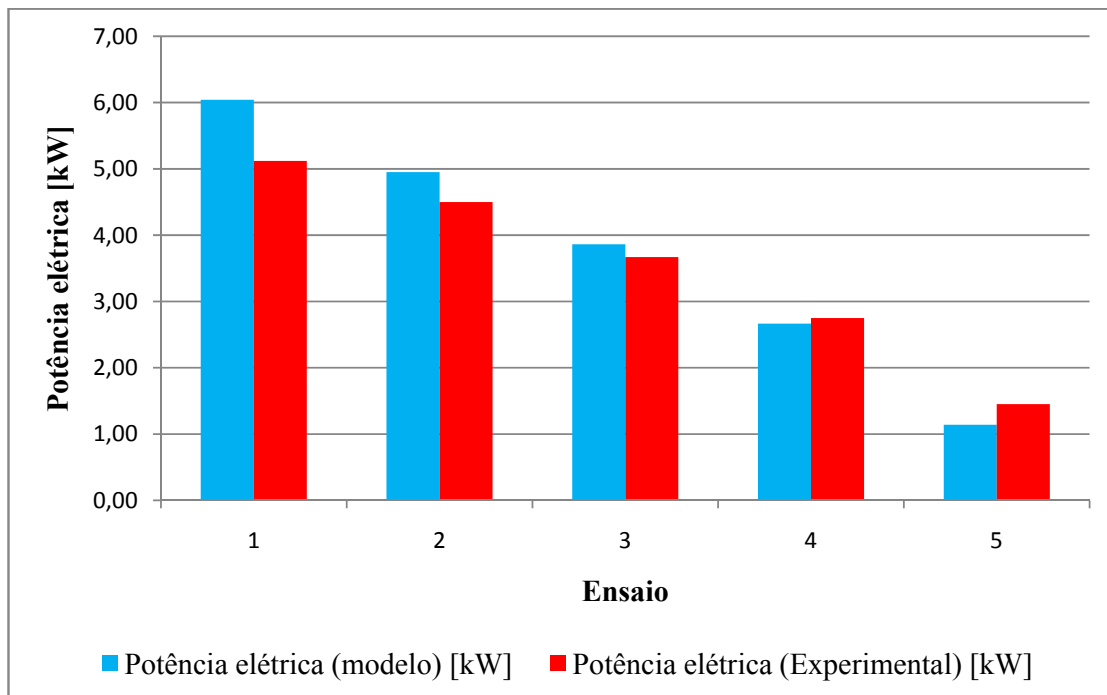


Figura 15 - Comparação das potências eléctricas medidas por Martinez (2009) contra as potências eléctricas previstas pelo modelo.

Capítulo 5

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Tem-se utilizado o modelo para realizar algumas simulações que permite predizer o comportamento do motor de combustão interna funcionando com gás de biomassa e também o comportamento do gaseificador. Para correr as simulações utilizou-se a geometria do motor YANMAR BTD 22 do laboratório do NEST, o motor foi construído originalmente para trabalhar com Diesel, mas depois foi modificado adicionando um sistema de acendido por centelha para trabalhar com gás natural. A Tabela 20 mostra algumas características do motor, outras características relativas a cada ensaio serão mostradas nos próximos apartados.

Tabela 20 - Parâmetros geométricos usados na simulação

Símbolo no Arquivo-M	Valor	Descrição
b	0,09	Diâmetro do cilindro (m)
Stroke	0,09	Curso do pistão (m)
r	12	Relação de compressão
N	2	Número de cilindros

5.1 EVOLUÇÃO DA TEMPERATURA DOS GASES E O FLUXO DE CALOR NO MOTOR EM RELAÇÃO AO ÂNGULO DA DA MANIVELA

A Figura 16 e a Figura 17 representam respectivamente a evolução da temperatura e do fluxo de calor (do interior do motor para o exterior) em relação ao ângulo da manivela, podendo observar que as duas figuras são muito similares devido ao fato de que o fluxo de calor é proporcional à temperatura no interior do motor. É possível verificar que as temperaturas dos gases não queimados tanto para gasolina quanto para gás de biomassa são praticamente as mesmas, enquanto que para gases queimados são diferentes, sendo menores para alimentação com gás de biomassa em comparação com a alimentação com gasolina. Outra observação importante é que na faixa de -20 a 50° do ângulo da manivela aparecem reportadas temperaturas tanto para gases queimados quanto para não queimados isto é devido ao fato de que esta é a faixa de duração da combustão e durante esse tempo tem-se esses dois tipos (queimados e não queimados) de misturas de gases no interior do motor.

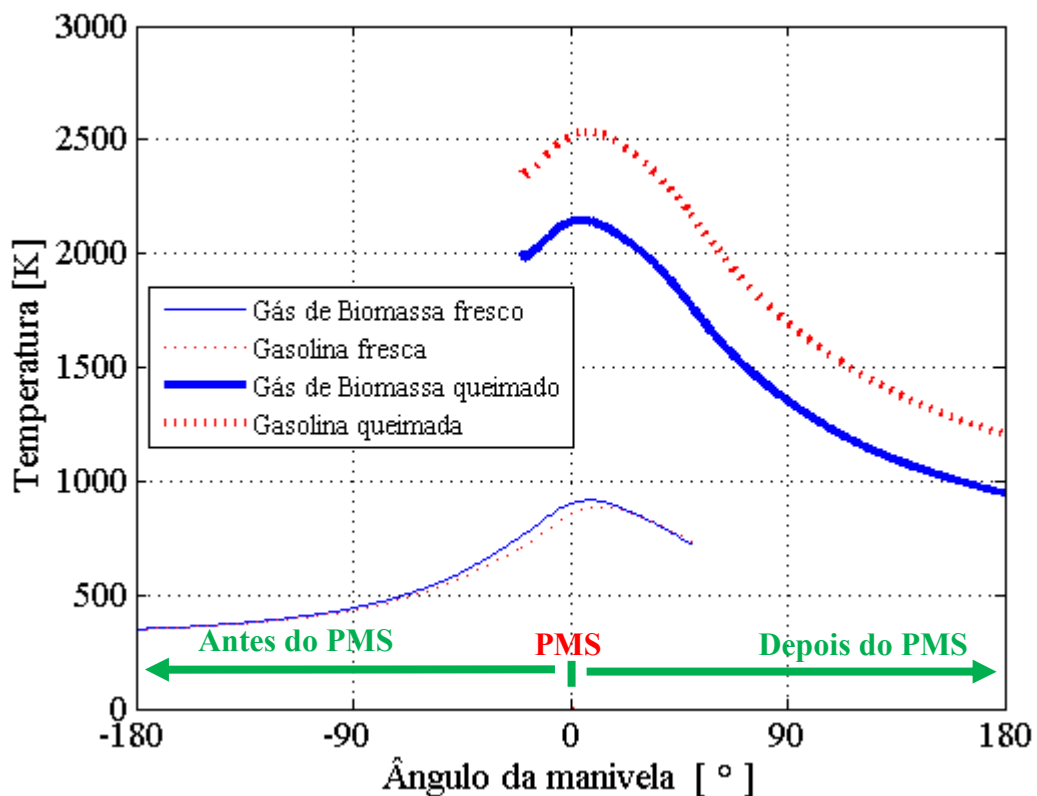


Figura 16 - Temperatura v.s. ângulo da manivela.

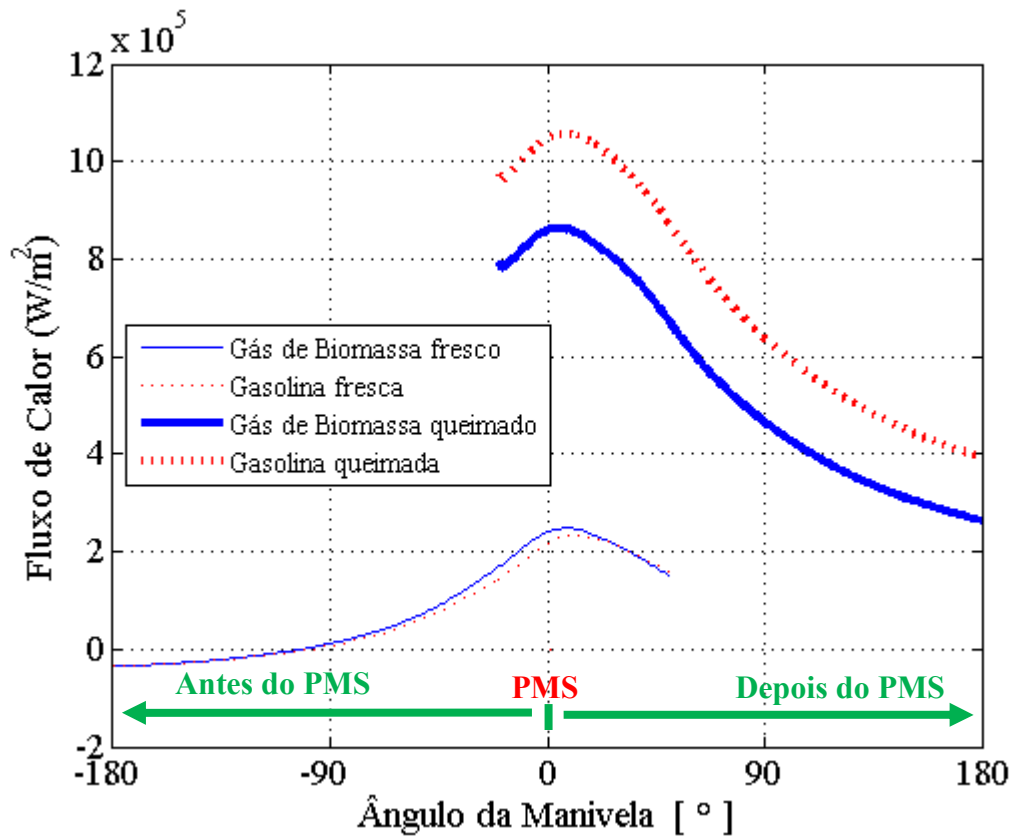


Figura 17 - Fluxo de calor v.s. ângulo da manivela.

A Figura 18 mostra a evolução do calor transferido do interior do motor para o exterior em relação ao ângulo da manivela. Observa-se que o calor transferido durante a etapa de compressão (de -180° até -20°) é praticamente o mesmo tanto para alimentação com gás de biomassa quanto para alimentação com gasolina, contudo, deve-se observar que os valores do calor transferido na etapa de compressão (de -180° até -20°) estão levemente abaixo de zero, isso é devido de que a mistura combustível que se está comprimindo tem uma temperatura menor do que as paredes do motor. A partir dos -20° começa a combustão e por tanto a transferência de calor para o exterior do motor, note-se que nesta zona a transferência de calor para alimentação com gás de biomassa é menor do que para alimentação com gasolina o qual de acordo com a Figura 16 e a Figura 17 seria o resultado esperado.

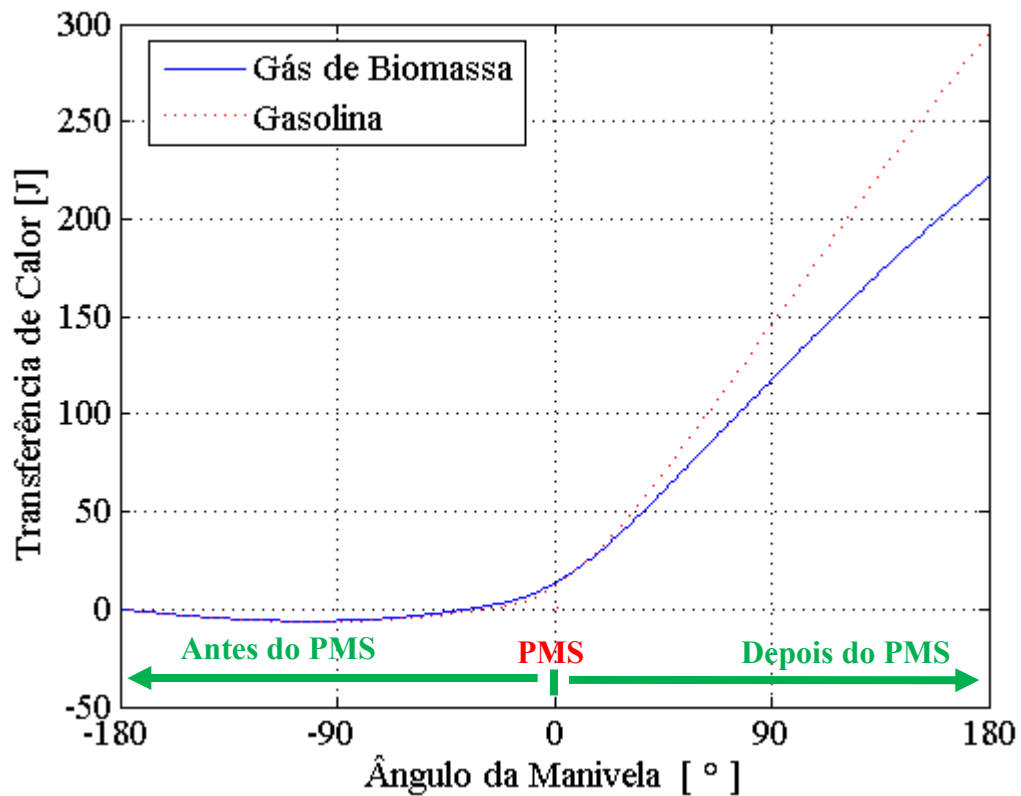


Figura 18 - Transferência de calor v.s. ângulo da manivela.

5.2 EVOLUÇÃO DA PRESSÃO NO INTERIOR E O TRABALHO DO MOTOR COM RELAÇÃO AO ÂNGULO DA MANIVELA

Na Figura 19 se observa que a pressão no interior do motor tanto para alimentação com gasolina quanto para alimentação com gás de biomassa são praticamente iguais até praticamente um ângulo da manivela de -20° , a partir do qual a pressão no interior do motor alimentado com gás de biomassa é menor do que para o alimentado com gasolina, o anterior é o comportamento esperado devido a que a partir dos -20° no ângulo da manivela começa a combustão e o poder calorífico do gás de biomassa é menor que o da gasolina.

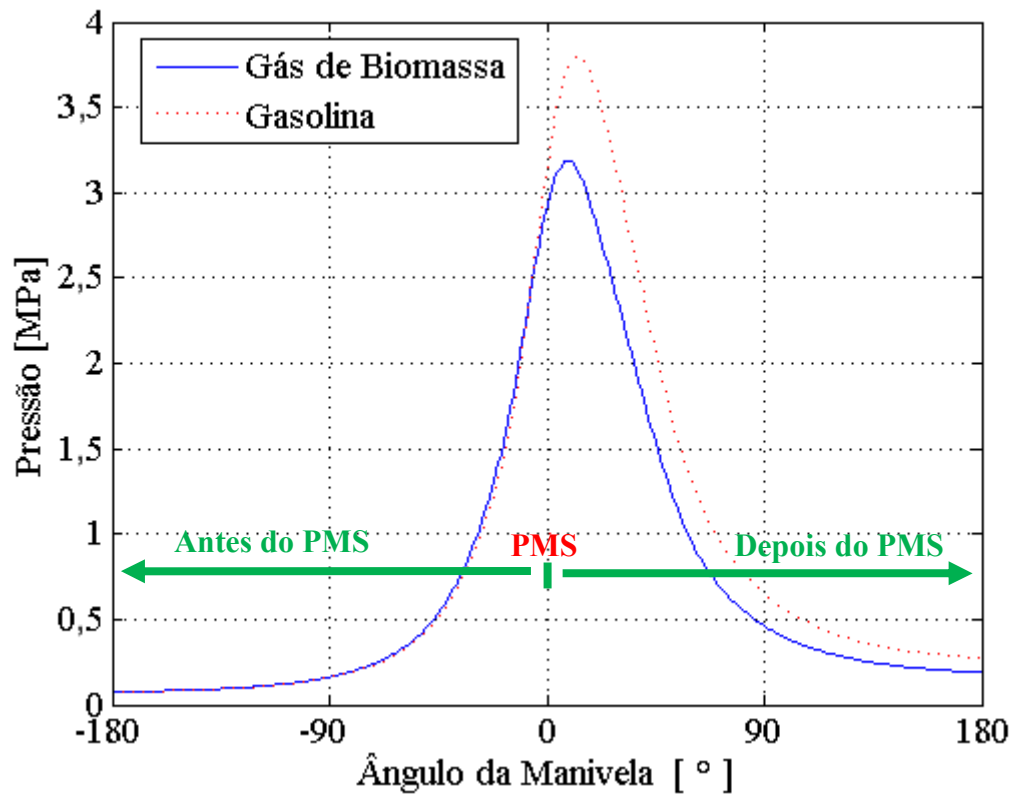


Figura 19 - Pressão v.s. ângulo da manivela.

Análogo ao observado na Figura 19, na Figura 20 se observa que o trabalho com o motor alimentado com gasolina é praticamente o mesmo que na alimentação com gás de biomassa até aproximadamente um ângulo de manivela de -20° (ângulo de início da combustão), a partir deste ângulo o trabalho obtido no motor alimentado com gás de biomassa é menor do que o obtido no motor alimentado com gasolina.

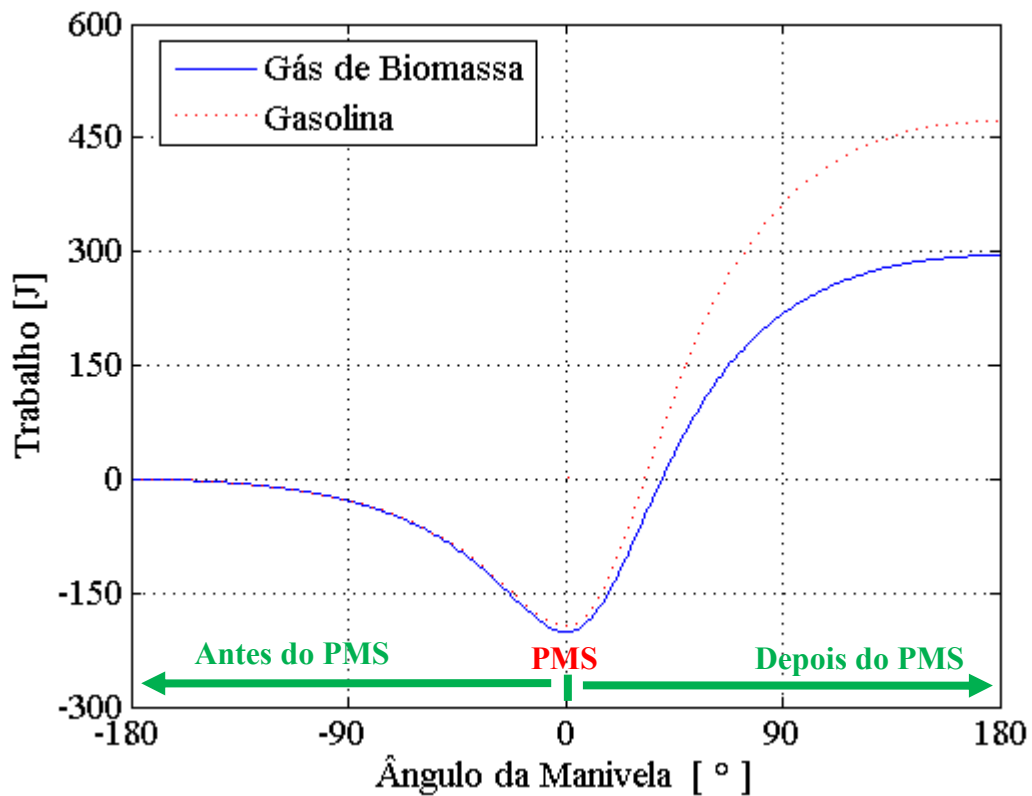


Figura 20 - Trabalho v.s. ângulo da manivela.

5.3 POTÊNCIA INDICADA COM RELAÇÃO À VELOCIDADE DE ROTAÇÃO DO MOTOR

Na Figura 21, observa-se que tanto para gasolina como para gás de biomassa a relação entre a potência indicada e a velocidade de rotação do motor, é lineal e diretamente proporcional. Para variações da velocidade do motor dentro da faixa simulada, a potência obtida com o motor operando com gás de biomassa é a cerca de 65% da obtida com o motor operando com gasolina; estes resultados estão de acordo com as observações de Tinaut (2006) que afirma que operando com gás de biomassa poderia obter-se 2/3 da potência obtida operando com gasolina. Observe-se que teoricamente tanto a linha que representa a relação para alimentação com gasolina quanto a linha que representa a relação para alimentação com gás de biomassa devem ser linhas retas que passam pela origem do sistema de coordenadas (ou seja, equações da forma $P_{ind} = m(RPM)$ onde m é uma constante que representa a inclinação da reta) e por tanto a relação entre elas deveria ser uma constante, ou seja uma linha reta horizontal. A observação anterior é confirmada pela linha contínua, a qual para altas

revoluções apresenta comportamento asintótico horizontal, esta linha também mostra que para baixas revoluções o comportamento da potência indicada em relação as RPM não é exatamente o comportamento ideal.

Tabela 21 - parâmetros de operação do motor para simular P_{ind} v.s. RPM

Símbolo no Arquivo-M	Descrição	Unidades	Valor	Eixo
p1	Pressão inicial	Pa	100000	
phi	Relação equivalente	-	0,9434	
RPM	Velocidade de rotação da manivela	rpm	600 : 100 : 3000	x
fueltype	Combustível	-	Gás de biomassa e gasolina	
thetas	Ângulo de inicio da queima	° antes do PMS	24	
p_ind	Potência indicada	W	Calculada	y

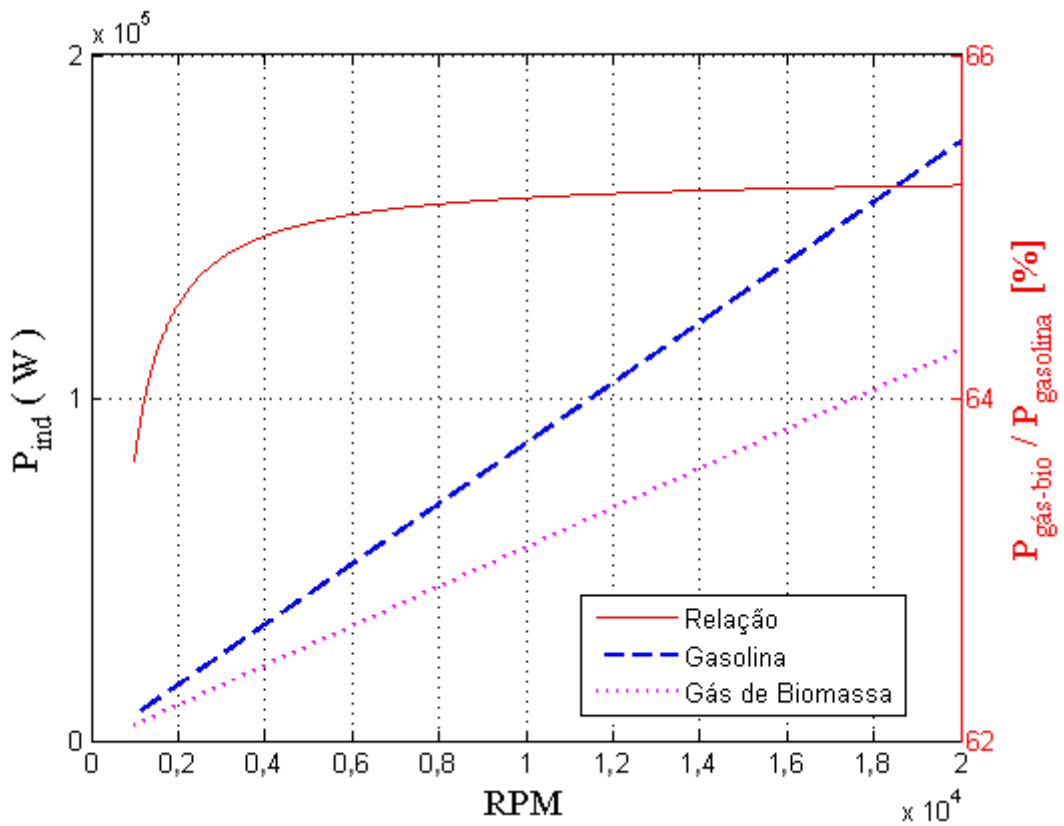


Figura 21 - Variação da potência com relação à rotação do motor.

5.4 POTÊNCIA INDICADA COM RELAÇÃO À QUANTIDADE DE AR FORNECIDO AO MOTOR

A Figura 22 mostra a variação da potência indicada em relação com a relação de ar no motor. Nesta figura se observa o comportamento esperado, a potência vai aumentando até alcançar a quantidade de ar estequiométrica e a partir deste ponto começa a diminuir com o aumento na quantidade de ar. Observa-se que para quantidade de ar perto da estequiométrica, a potência obtida com o motor operando com gás de biomassa está em torno de 60% da obtida na operação com gasolina.

Tabela 22 - Parâmetros de operação do motor para simular P_{ind} v. s. ϕ

Símbolo no Arquivo-M	Descrição	Unidades	Valor	Eixo
p1	Pressão inicial	Pa	100000	
phi	Relação equivalente	-	0,6 : 0,1 : 1,4	x
RPM	Velocidade de rotação da manivela	rpm	1800	
fueltype	Combustível	-	Gás de biomassa e gasolina	
thetas	Ângulo de início da queima	° antes do PMS	24	
p_ind	POTÊNCIA indicada	W	Calculada	y

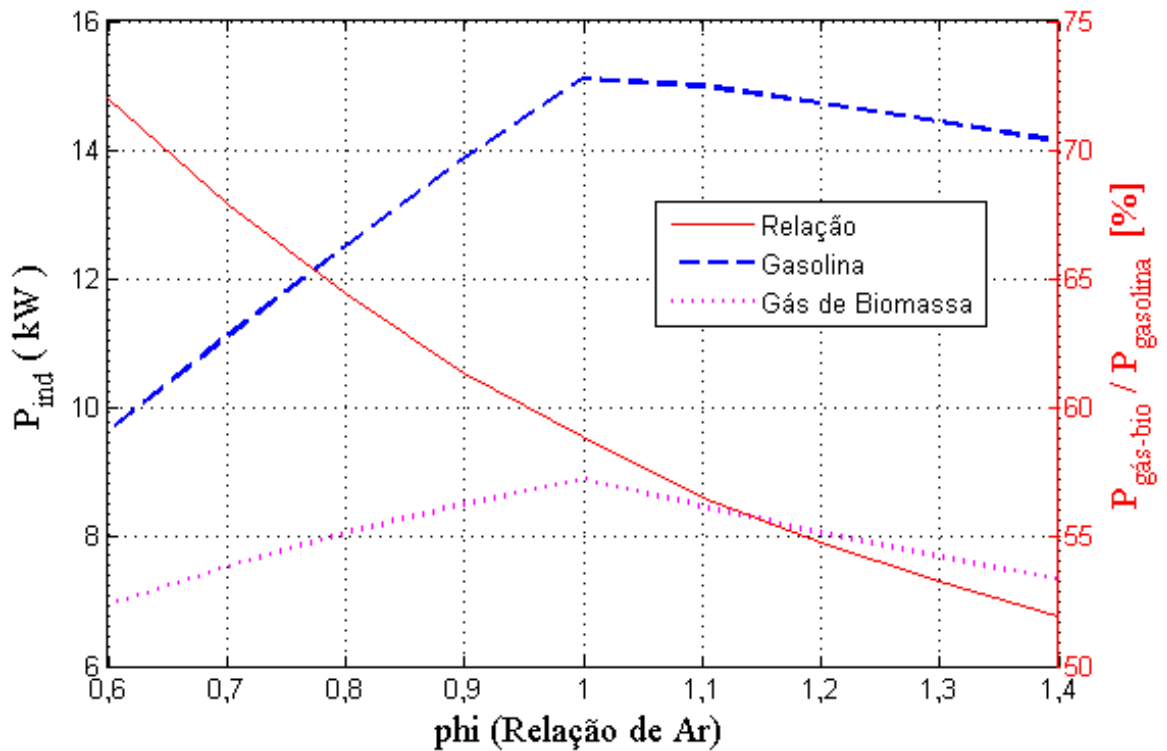


Figura 22 - Variação da potência indicada em relação com a relação de ar

5.5 POTÊNCIA INDICADA COM RELAÇÃO A O ÂNGULO DE INÍCIO DA QUEIMA

Na Figura 23 se observa que para ângulos de início da combustão maiores a 25° antes do PMS, não se obtém aumento significativo na potência. Observa-se também que para a faixa de ângulo de início da combustão simulado a potência operando com gás de biomassa variam entre 62 e 65% da obtida operando com gasolina.

Tabela 23 - Parâmetros de operação do motor para simular P_{ind} v.s. θ

Símbolo no Arquivo-M	Descrição	Unidades	Valor	Eixo
p1	Pressão inicial	Pa	100000	
phi	Relação equivalente	-	0,9434	
RPM	Velocidade de rotação da manivela	rpm	1800	
fueltype	Combustível	-	Gás de biomassa e gasolina	
thetas	Ângulo de início da queima	° antes do PMS	1 : 2 : 35	x
p_ind	Potência indicada	W	Calculada	y

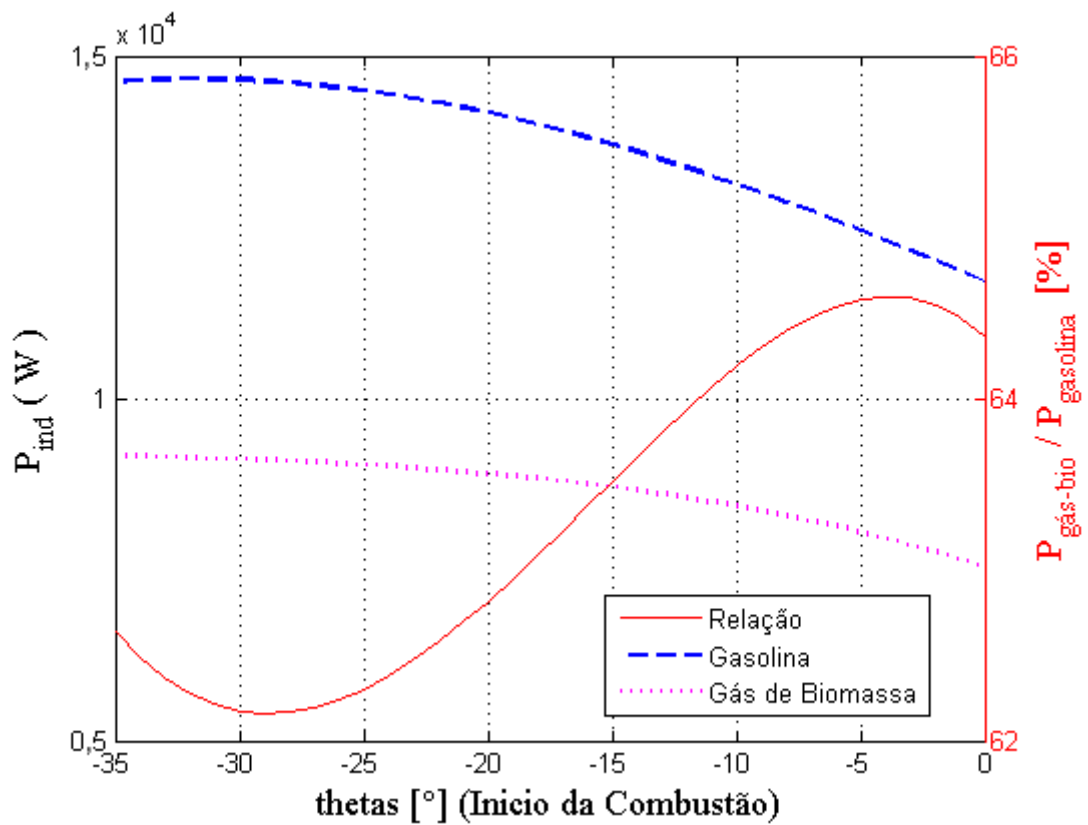


Figura 23 - Potência Indicada v.s. Ângulo de Início da Combustão (1800 rpm)

5.6 POTÊNCIA INDICADA CONTRA RELAÇÃO DE COMPRESSÃO DO MOTOR

Na Figura 24 se observa a variação da potência indicada em relação a relação de compressão do motor, tanto para alimentação com gasolina quanto para alimentação com gás de biomassa. Observe-se que para alimentação com gasolina foi simulado até uma relação de compressão de 12:1 já que para relação de compressão maior podem-se apresentar problemas de autoignição não controlada. Para alimentação com gasolina foi simulado até uma relação de compressão de 18:1 já que normalmente o gás de biomassa pode ser alimentado a um motor de combustão para gasolina (relação de compressão até aproximadamente 12:1) ou a um motor diesel modificado (generalmente com relação de compressão variando de 12:1 até 18:1). Observa-se que a potência aumenta com a relação de compressão e consequentemente para obter maior potência em alimentação com gás de biomassa é recomendável usar um motor com relação de compressão alta, por exemplo, um motor diesel modificado para ignição por centelha.

Tabela 24 - Parâmetros de operação do motor para simular P_{ind} v. s. r

Símbolo no Arquivo-M	Descrição	Unidades	Valor	Eixo
p1	Pressão inicial	Pa	100000	
phi	Relação equivalente	-	0,9434	
RPM	Velocidade de rotação da manivela	rpm	1800	
fueltype	Combustível	-	Gás de biomassa e gasolina	
thetas	Ângulo de início da queima	° antes do PMS	24	
r	Relação de compressão	-	5:1:18	x
p_ind	Potência indicada	W	Calculada	y

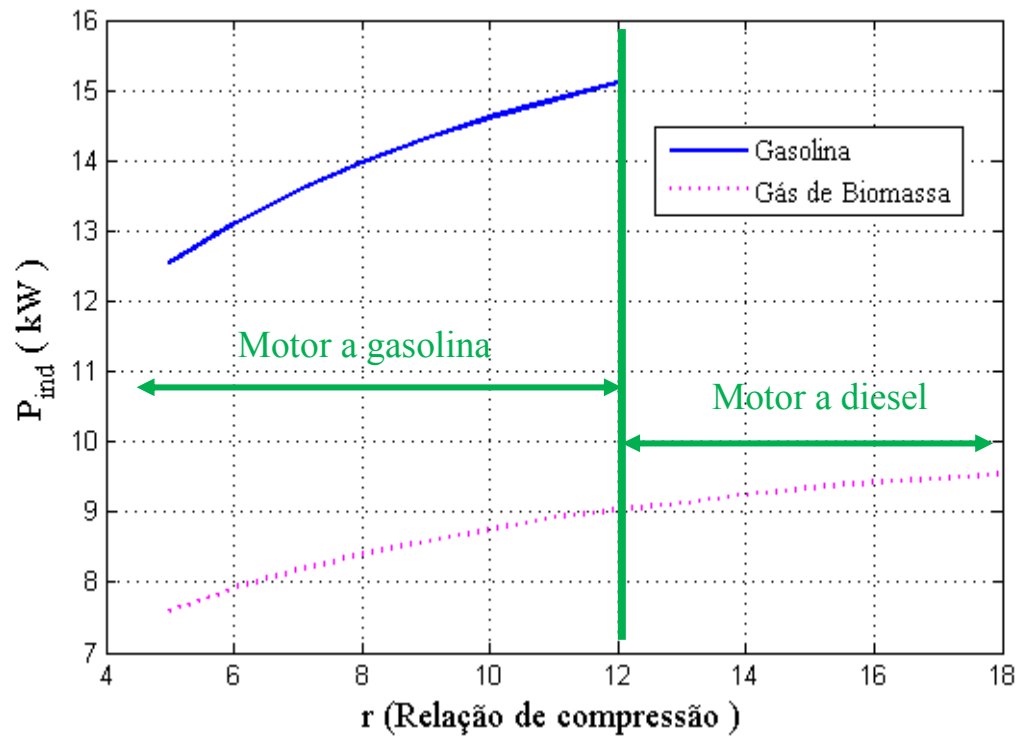


Figura 24 - Potência Indicada v.s. Relação de compressão.

5.7 PODER CALORÍFICO INFERIOR DO GÁS DE BIOMASSA CONTRA FATOR DE AR DO GASEIFICADOR E UMIDADE DA BIOMASSA

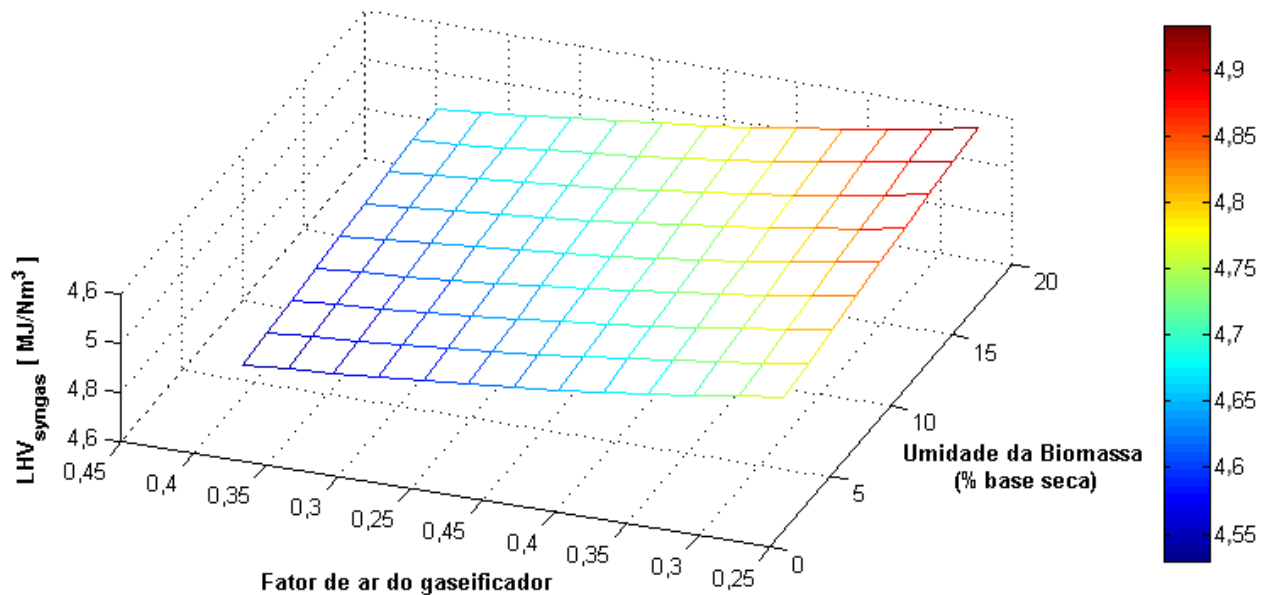


Figura 25 - Variação do poder calorífico inferior com o fator de ar do gaseificador e a umidade da biomassa.

Na Figura 25 tem-se simulado poder calorífico inferior do gás de biomassa contra o fator de ar do gaseificador e a umidade da biomassa. Observe-se que se tem um máximo de 20% de umidade já que esse é o limite do modelo tendo em conta que as zonas de pirólise e oxidação são baseadas em observações experimentais (normalmente nos experimentos a biomassa não supera o 20 % de umidade).

O aumento no poder calorífico do gás de biomassa com a diminuição do fator de ar já tinha sido observado por outros pesquisadores (Ratnadhariya e Channiwala, 2002; Ratnadhariya e Channiwala, 2009; Sharma, 2008). O aumento do poder calorífico com o aumento da umidade da biomassa, não é tão obvio e poderia gerar polemica, para tentar explicar este fenômeno, na Tabela 25 se mostram os resultados experimentais de Jayah, Aye *et al.* (2003), os quais se mostram em ordem ascendente de relação ar-combustível. O modelo já foi validado com os dados desta tabela, mostrando um bom acordo com os mesmos. Pode-se observar nas corridas um e oito com praticamente a mesma relação ar-combustível, a corrida um com maior umidade apresenta também maior poder calorífico. Pode-se observar

também nas corridas nove e três com praticamente a mesma relação ar-combustível, a corrida três com maior umidade apresenta também maior poder calorífico.

Tabela 25 - Resultados experimentais de Jayah, Aye et al. (2003) ordenados para relação ar-combustível ascendente.

#	w	Relação (Ar/comb.)	CO	H ₂	CO ₂	CH ₄	N ₂	LHV (MJ/Nm ³)
7	14,7	1,86	19,1	15,5	11,4	1,1	52,9	4,67
4	16	1,96	18,4	17	10,6	1,3	52,7	4,81
1	18,5	2,03	19,6	17,2	9,9	1,4	51,9	5,03
8	13,8	2,04	22,1	12,7	10,5	1,3	53,4	4,85
5	15,2	2,12	19,7	13,2	10,8	1,3	55	4,58
2	16	2,2	20,2	18,3	9,7	1,1	50,7	5,12
6	14	2,29	18,9	12,5	8,5	1,2	59,1	4,36
9	12,5	2,36	19,1	13	10,7	1,2	56	4,44
3	14,7	2,37	19,4	17,2	9,7	1,1	52,6	4,90

Sharma (2003) mostra que para baixos conteúdos de umidade na biomassa, o poder calorífico do gás aumenta com o conteúdo de umidade e para conteúdos maiores acontece o contrário. A observação de Sharma (2008) também estaria de acordo com Reed, Das *et al.* (1988) que aconselham trabalhar com biomassa com umidade perto ou menos de 33%. Em geral pode-se dizer que a umidade (na biomassa) em baixos conteúdos aumenta o poder calorífico do gás de biomassa, mas altos conteúdos de umidade representam maior necessidade de calor (maior oxigênio para combustão e, logo também maior quantidade de nitrogênio inerte) para evaporá-la e, portanto afetaria o processo.

Vale mencionar neste ponto que alguns modelos simplificados de equilíbrio termoquímico (Zainal *et al.*, 2001) (ver na seção 1.5 a revisão bibliográfica da modelagem de gaseificadores leito co-correntes) asseguram que a relação entre o poder calorífico do gás de biomassa e a umidade da biomassa é sempre inversamente proporcional, sem importar a quantidade de umidade.

5.8 POTÊNCIA INDICADA DO MOTOR COM RELAÇÃO AO FATOR DE AR DO GASEIFICADOR E UMIDADE DA BIOMASSA

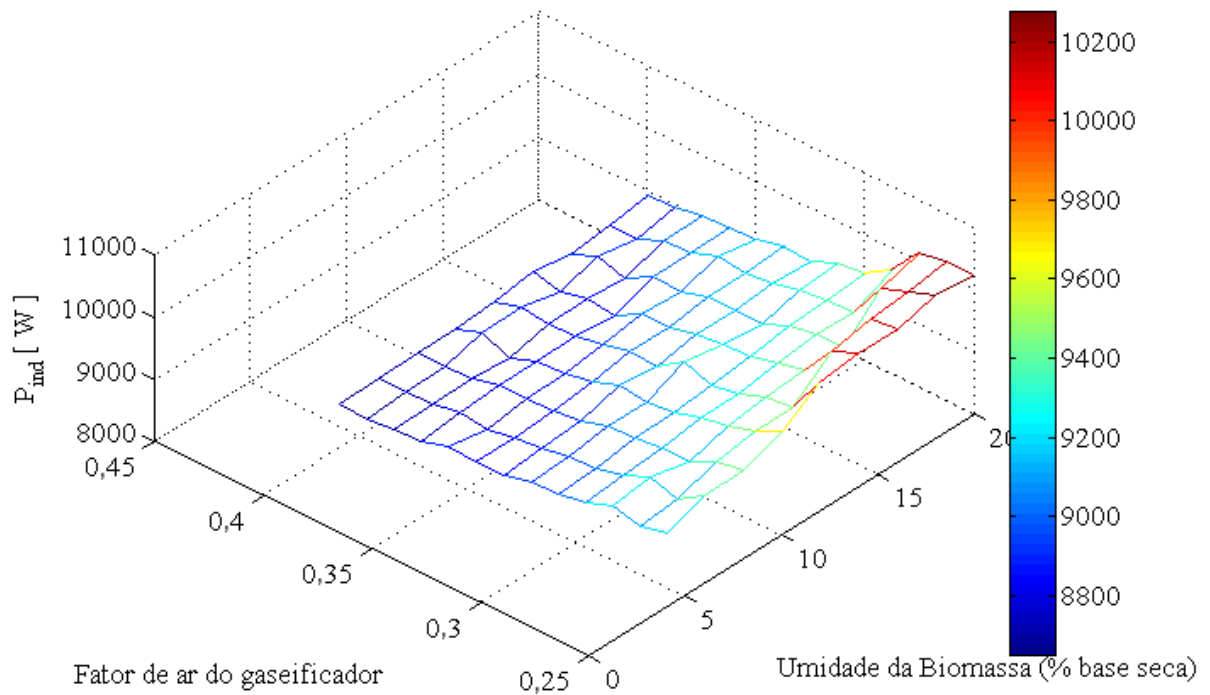


Figura 26 - Variação da potência indicada no motor com o fator de ar do gaseificador e a umidade da biomassa.

Pode-se dizer que esta figura é consequência direta do observado na Figura 25. Já que a potência obtida no motor será proporcional ao poder calorífico do combustível com o que é alimentado e, portanto todos os comentários feitos na figura 24 têm seus análogos na figura 25.

Capítulo 6

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

6.1 CONCLUSÕES

- Na zona de redução de gaseificadores leito fixo co-corrente operando com biomassa o equilíbrio termoquímico é atingido em um tempo (comprimento da zona de redução) relativamente curto o qual justifica que muitos destes gaseificadores tenham um comprimento de ao redor de 30 cm na zona de redução.
- Operando um motor de combustão interna com gás de biomassa, pode-se obter uma potência de entre 59 e 65 % da obtida operando com gasolina.
- Aumentando o ângulo do início da combustão (avanço da ignição ou temporização) acima de -24° pode-se obter uma leve perda de potência no motor; diminuindo o ângulo do início da combustão por baixo de -24° não se tem aumento significativo da potência do motor.
- Para umidades até perto de 20% em base seca, o poder calorífico inferior do gás de biomassa aumenta com o conteúdo de umidade.

- O poder calorífico inferior do gás de biomassa aumenta com a diminuição do fator de ar, é recomendável trabalhar com fator de ar ao redor de 0,3 já que valores menores poderiam não gerar a energia necessária para as reações na zona de redução.
- Para obter maiores potências com alimentação com gás de biomassa é recomenda a utilização de motores com elevada relação de compressão.

6.2 RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

- O submodelo da zona de oxidação é baseado em proporções definidas com base em observações experimentais, deve tentar-se melhorar o submodelo da zona de oxidação utilizando majoritariamente considerações analíticas que permita uma maior faixa de umidade e fator de ar nas simulações do modelo.
- Devido ao grande número de variáveis envolvidas tanto no conjunto (gaseificador-motor) quanto nos sistemas separados, seria recomendável a utilização de técnicas avançadas de otimização numérica na análise dos mesmos.
- Recomenda-se experimentar com muitas outras aproximações do fator de reatividade do carvão que permitam melhor predição do perfil de temperaturas na zona de redução. Inevitavelmente estes testes devem estar acompanhados com testes experimentais nos quais se tenha vários pontos de medição de temperatura ao longo do comprimento da zona de redução.
- Acompanhar as predições do modelo do motor com experimentos. Inevitavelmente nestes experimentos deveria contar se com um banco de testes que possa medir a evolução das variáveis do motor com o ângulo da manivela. Ainda realizar simultaneamente medições de concentrações das espécies tanto na entrada (combustível e ar) quanto na saída (gases de escape) do motor. Além disso, o banco de provas deveria permitir a variação das variáveis do motor tais como: velocidade de rotação da manivela, ângulo de início da combustão, relação de ar, etc.
- É recomendável para melhora futura do modelo do gaseificador, contemplar o calor transferido entre cada uma das zonas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AMUNDSON, N. R., ARRI, L. E. (1978), "Char Gasification in a Countercurrent Reactor", *AIChE Journal*, Vol. 24, pp. 87-101.

ANDRADE, R. V. (2007), *Gaseificação De Biomassa: Uma Análise Teórica E Experimental*, tese Doutorado em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá, p.

ANON (1972), *Steam Its Generation and Use*, The Babcock and Wilcox Co, New York, p.

BABU, B. V., SHETH, P. N. (2006), "Modeling and Simulation of Reduction Zone of Downdraft Biomass Gasifier: Effect of Char Reactivity Factor", *Energy Conversion and Management*, Vol. 47, pp. 2602-2611.

BARIN, I., PLATZKI, G. (1995), *Thermochemical Data of Pure Substances*, VCH, Weinheim; New York, 2003 p.

BASU, P. (2006), *Combustion and Gasification in Fluidized Beds*, CRC, New York, 496 p.

BASU, P., FRASER, S. A. (1991), *Circulating Fluidized Bed Boilers : Design and Operations*, Butterworth-Heinemann, Boston, x, 350 p. p.

BAXTER, J. M. (1994), *Downdraft Gasification of Biomass*, Thesis Doctor of Philosophy, University of Aston in Birmingham, 342 p.

BEENACKERS, M., A. A. C. (1999), *Biomass Gasification in Moving Beds, a Review of European Technologies*, Elsevier, Oxford, ROYAUME-UNI, 683 p.

BERENDS, R., BREM, G., (2002), "Two-Stage Gasification of Biomass for the Production of Syngas", *Proceedings of the 12th European Conference and Technical Exhibition on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection*, Amsterdam, The Netherlands, Vol. pp. 622-624.

BHAGAT, P. M. (1980), "Wood Charcoal Combustion and the Effects of Water Application", *Combustion and Flame*, Vol. 37, pp. 275-291.

BHATTACHARYA, S. C., SHWE HLA, S., PHAM, H.-L. (2001), "A Study on a Multi-Stage Hybrid Gasifier-Engine System", *Biomass and Bioenergy*, Vol. 21, pp. 445-460.

BINNEWIES, M., MILKE, E. (2002), *Thermochemical Data of Elements and Compounds*, Wiley-VCH, Weinheim, p.

BUTTSWORTH, D. R. (2002), *Spark Ignition Internal Combustion Engine Modelling Using Matlab*. University of Southern Queensland, Faculty of Engineering and Surveying. Toowoomba, Australia, (TR-2002-02), 40 p.

CHANNIWALA, S. A. (1992), *On Biomass Gasification Process and Technology Development – Some Analytical and Experimental Investigations*, Thesis Doctor of Philosophy in Physics, Indian Institute of Technology, p.

CHANNIWALA, S. A., PARIKH, P. P. (2002), "A Unified Correlation for Estimating Hhv of Solid, Liquid and Gaseous Fuels", *Fuel*, Vol. 81, pp. 1051-1063.

CHEE, C. S. (1987), *The Air Gasification of Wood Chips in a Downdraft Gasifier*, Thesis M.S., Kansas State University, p.

CHO, Y. S., JOSEPH, B. (1981), "Heterogeneous Model for Moving-Bed Coal Gasification Reactors", *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, Vol. 20, pp. 314-318.

CLAIR, S. S., HILLIER, J., SMITH, P. (2008), "Estimating the Pre-Harvest Greenhouse Gas Costs of Energy Crop Production", *Biomass and Bioenergy*, Vol. 32, pp. 442-452.

CORTEZ, L. A., SILVA, E. E., OLIVARES, E. (2008), *Biomassa Para Energia*, UNICAMP, Campinas, p.

DEMIRBAS, A. (1997), "Calculation of Higher Heating Values of Biomass Fuels", *Fuel*, Vol. 76, pp. 431-434.

_____ (2004), "Combustion Characteristics of Different Biomass Fuels", *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 30, pp. 219-230.

EBELING, J. M., JENKINS, B. M. (1985), "Physical and Chemical Properties of Biomass", *Transactions of the ASAE*, Vol. 28, pp.

ERGUN, S. (1952), "Fluid Flow through Packed Columns", *Chem. Eng. Prog*, Vol. 48, pp. 89-94.

EVANS, D. D., EMMONS, H. W. (1977), "Combustion of Wood Charcoal", *Fire Safety Journal*, Vol. 1, pp. 57-66.

FAO (1986), *Wood Gas as Engine Fuel*, Food and Agriculture Organization of the United Nations, Rome, 140 p.

FERGUSON, C. R. (1986), *Internal Combustion Engines, Applied Thermosciences*, Wiley, New York, p.

GAO, N., LI, A. (2008), "Modeling and Simulation of Combined Pyrolysis and Reduction Zone for a Downdraft Biomass Gasifier", *Energy Conversion and Management*, Vol. 49, pp. 3483-3490.

GILTRAP, D. L. (2002), *Investigating Downdraft Gasification of Biomass*, Thesis Doctor of Philosophy in Physics, Institute of Fundamental Sciences Massey University, 156 p.

GILTRAP, D. L., MCKIBBIN, R., BARNES, G. R. G. (2003), "A Steady State Model of Gas-Char Reactions in a Downdraft Biomass Gasifier", *Solar Energy*, Vol. 74, pp. 85-91.

GORDON, S., MCBRIDE, B. J. (1971), *Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks, and Chapman-Jouguet Detonations*, Scientific and Technical Information Office, National Aeronautics and Space Administration; [for sale by the National Technical Information Service, Springfield, Va.], Washington, p.

GUMZ, W. (1950), *Gas Producers and Blast Furnaces : Theory and Methods of Calculation* Wiley ; Chapman & Hall, New York : London :, p.

HEATON, E. A., FLAVELL, R. B., MASCIA, P. N., THOMAS, S. R., DOHLEMAN, F. G., LONG, S. P. (2008), "Herbaceous Energy Crop Development: Recent Progress and Future Prospects", *Current Opinion in Biotechnology*, Vol. 19, pp. 202-209.

HEYWOOD, J. B. (1988), *Internal Combustion Engine Fundamentals*, McGraw-Hill, New York, p.

HIRES, S. D., EKCHIAN, A., HEYWOOD, J. B., TABACZYNSKI, R. J., WALL, J. C. (1976), *Performance and Nox Emissions Modeling of a Jet Ignition Prechamber Stratified Charge Engine*, Society of Automotive Engineers, Warrendale, PA, p.

JAIN, A. K., GOSS, J. R. (2000), "Determination of Reactor Scaling Factors for Throatless Rice Husk Gasifier", *Biomass and Bioenergy*, Vol. 18, pp. 249-256.

JARUNGTAMMACHOTE, S., DUTTA, A. (2007), "Thermodynamic Equilibrium Model and Second Law Analysis of a Downdraft Waste Gasifier", *Energy*, Vol. 32, pp. 1660-1669.

JAYAH, T. H., AYE, L., FULLER, R. J., STEWART, D. F. (2003), "Computer Simulation of a Downdraft Wood Gasifier for Tea Drying", *Biomass and Bioenergy*, Vol. 25, pp. 459-469.

JENKIS, B. M., (1990), "Fuel Properties for Biomass Materials", *Proceedings of the International symposium on Application and Management of Energy in Agriculture: The Role of Biomass Fuels*, New Delhi, Vol. pp.

KEE, R. J., RUPLEY, F. M., MILLER, J. A. (1987), *The Chemkin Thermodynamic Data Base*, Sandia National Laboratories ; National Technical Information Service, Livermore, CA; Springfield, VA, p.

KOUFOPANOS, C. A., LUCCHESI, A., MASCHIO, G. (1989), "Kinetic Modelling of the Pyrolysis of Biomass and Biomass Components", *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 67, pp. 75 - 84.

LEPORI, W. A. (1980), "Fluidized Bed Combustion and Gasification of Biosolid", *Agric Energy*, Vol. 2, pp. 330–334.

LEWIS, B., VON ELBE, G. (1987), *Combustion, Flames and Explosions of Gases. Third Edition*, Medium: X; Size: Pages: 784 p.

MARTÍNEZ, J. D. Á. (2009), *Estudo Experimental Do Conjunto Gaseificador De Biomassa Em Reator Concorrente Com Duplo Estágio De Fornecimento De Ar E Motor De Combustão Interna*, Dissertação master, Instituto de Engenharia Mecânica Universidade Federal de Itajubá, 216 p.

MASTRAL, F. J., ESPERANZA, E., BERRUECO, C., SERRANO, S., CEAMANOS, J., (2002), "Co-Pyrolysis and Co-Gasification of Polyethylene and Sawdust Mixtures in a Fluidised Bed Reactor, Temperature Influence", *Proceedings of the 12th European Conference and Technical Exhibition on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection*, Amsterdam, The Netherlands, Vol. pp. 636-639.

MING, H. (2009), *Instrumentation and Tar Measurement Systems for a Downdraft Biomass Gasifier*, Dissertation MASTER OF SCIENCE, Department of Biological and Agricultural Engineering KANSAS STATE UNIVERSITY, 98 p.

MOTT, R. A., SPOONER, C. E. (1940), "The Calorific Value of Carbon in Coal: The Dulong Relationship", *Fuel*, Vol. 19, pp. 226–231.

OLIKARA, C., BORMAN, G. L., (1975), "A Computer Program for Calculating Properties of Equilibrium Combustion Products with Some Applications to I.C. Engines", *Proceedings of the Warrendale, Pa.*, Vol. pp.

PAINE, L. K., PETERSON, T. L., UNDERSANDER, D. J., RINEER, K. C., BARTELT, G. A., TEMPLE, S. A., SAMPLE, D. W., KLEMME, R. M. (1996), "Some Ecological and Socio-Economic Considerations for Biomass Energy Crop Production", *Biomass and Bioenergy*, Vol. 10, pp. 231-242.

PARIKH, J., CHANNIWALA, S. A., GHOSAL, G. K. (2005), "A Correlation for Calculating H_hv from Proximate Analysis of Solid Fuels", *Fuel*, Vol. 84, pp. 487-494.

PARIKH, J., GHOSAL, G., CHANNIWALA, S. A., (2002), "A Critical Review on Biomass Pyrolysis", *Proceedings of the 12th European Conference and Tech. Exhibition on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection*, Amsterdam, The Netherlands, Vol. pp. 889-892.

PAUL, W. C., BUCHELE, W. F. (1980), "Development of a Concentric Vortex Agri-Residue Furnace", *Agric Energy*, Vol. 2, pp. 349–356.

QUAAK, P., KNOEF, H., STASSEN, H. E. (1999), *Energy from Biomass: A Review of Combustion and Gasification Technologies*, p.

RAGLAND, K. W., AERTS, D. J., BAKER, A. J. (1991a), "Properties of Wood for Combustion Analysis", *Bioresource Technology*, Vol. 37, pp. 161-168.

RAINE, R. R., STONE, C. R., GOULD, J. (1995), "Modeling of Nitric Oxide Formation in Spark Ignition Engines with a Multizone Burned Gas", *Combustion and Flame*, Vol. 102, pp. 241-255.

RANNEY, J. W., MANN, L. K. (1994), "Environmental Considerations in Energy Crop Production", *Biomass and Bioenergy*, Vol. 6, pp. 211-228.

RATNADHARIYA, J. K., CHANNIWALA, S. A., (2002), "Two Zone Equilibrium and Kinetic Free Modeling of Gasifier", *Proceedings of the 12th European Conference and Technical Exhibition on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection*, Amsterdam, The Netherlands, Vol. pp. 813-816.

_____ (2009), "Three Zone Equilibrium and Kinetic Free Modeling of Biomass Gasifier - a Novel Approach", *Renewable Energy*, Vol. 34, pp. 1050-1058.

REED, T. B. (1981), *Biomass Gasification : Principles and Technology*, Noyes Data Corp., Park Ridge, N.J., p.

REED, T. B., DAS, A., SOLAR TECHNICAL INFORMATION, P. (1988), *Handbook of Biomass Downdraft Gasifier Engine Systems*, Solar Technical Information Program, Solar Energy Research Institute, Golden, Colo., p.

SANCHEZ, C. G. (1994), *Estudo Da Volatilização E Da Gaseificação De Biomassa Em Leito Fluidizado*, Teses Doutor em Engenharia Mecânica, Faculdade de Engenharia Mecânica Universidade Estadual de Campinas, p.

SENELWA, K. (1997), *The Air Gasification of Woody Biomass from Short Rotation Forests*, Thesis Massey University, p.

SHARMA, A. K. (2008), "Equilibrium Modeling of Global Reduction Reactions for a Downdraft (Biomass) Gasifier", *Energy Conversion and Management*, Vol. 49, pp. 832-842.

SOUZA-SANTOS, M. L. D. (2004), *Solid Fuels Combustion and Gasification: Modeling, Simulation, and Equipment Operations*, CRC, New York, 400 p.

SRINIVAS, B., AMUNDSON, N. R. (1980), "A Single-Particle Char Gasification Model", *AIChE Journal*, Vol. 26, pp. 487-496.

STONE, R. (1999), *Introduction to Internal Combustion Engines*, Society of Automotive Engineers, Warrendale, Pa., p.

STORM, C., DIGER, H., SPLIETHOFF, K. R. G. (1999), *Co-Pyrolysis of Coal/Biomass and Coal/Sewage Sludge Mixtures*, American Society of Mechanical Engineers, New York, NY, ETATS-UNIS, p.

STULL, D. R., PROPHET, H., UNITED STATES. NATIONAL BUREAU OF, S. (1971), *Janaf Thermochemical Tables*, U.S. Dept. of Commerce, National Bureau of Standards, Washington, D.C., p.

THRING, M. W. (1962), *The Science of Flames and Furnaces*, Wiley, New York, p.

TILLMAN, D. A. (2000), "Biomass Cofiring: The Technology, the Experience, the Combustion Consequences", *Biomass Bioenergy*, Vol. 19, pp.

TINAUT, F. V., MELGAR, A., HERRILLO, A., DÍEZ DE LA ROSA, A. (2006), "Method for Predicting the Performance of an Internal Combustion Engine Fuelled by Producer Gas and Other Low Heating Value Gases", *Fuel Processing Technology*, Vol. 87, pp. 135-142.

URNS, S. R. (2006), *An Introduction to Combustion : Concepts and Applications*, McGraw-Hill, London, p.

VAN DE STEENE, L., SALVADOR, S., NAPOLI, A., (2002), "Rice Husk, Straw and Bark Behaviour During Pyrolysis, Combustion and Gasification Fundamental Study", *Proceedings of the 12th European Conference and Technical Exhibition on Biomass for Energy, Industry and Climate Protection*, Amsterdam, The Netherlands, Vol. pp. 821-826.

VISAGIE, J. P. (2009), *Generic Gasifier Modelling: Evaluating Model by Gasifier Type*, dissertation master, University of Petroria, 101 p.

WANG, Y., KINOSHITA, C. M. (1992), "Experimental Analysis of Biomass Gasification with Steam and Oxygen", *Solar Energy*, Vol. 49, pp. 153-158.

_____ (1993), "Kinetic Model of Biomass Gasification", *Solar Energy*, Vol. 51, pp. 19-25.

WILLIAMS, A., POURKASHANIAN, M., JONES, J. M. (2000), *Combustion and Gasification of Coal*, Taylor & Francis, New York, p.

ZAINAL, Z. A., ALI, R., LEAN, C. H., SEETHARAMU, K. N. (2001), "Prediction of Performance of a Downdraft Gasifier Using Equilibrium Modeling for Different Biomass Materials", *Energy Conversion and Management*, Vol. 42, pp. 1499-1515.

ZAINAL, Z. A., RIFAU, A., QUADIR, G. A., SEETHARAMU, K. N. (2002), "Experimental Investigation of a Downdraft Biomass Gasifier", *Biomass and Bioenergy*, Vol. 23, pp. 283-289.

Apêndice A

CÓDIGOS DA PROGRAMAÇÃO DO GASEIFICADOR EM MATLAB

A.1 gaseificador.m

```
1 %modelo geral do gaseificador
2 clear all
3 close all
4 clc
5
6 %Composição imediata (porcentagens em base seca):
7 V_porc=80.1;
8 A_porc=0.7;
9 F_porc=100-A_porc-V_porc;
10
11 %Umidade W_%
12 W_porc=14.7;
13 base_W=1;      % 1=base seca 2=base humeda
14
15 %Poder calorífico superior HHV [MJ/kg=kJ/g]
16 HHV=19.6;
17 %Temperatura de entrada do ar K
18 Tar=298.15;
19
20 %modo de corrida
21 mcor=1;      % 1=temperaturas 2=calores
22
```

```

23  if mcor==1
24  %TEMPERATURAS DO MODELO [K]
25  Tp=1000;
26  Tox=1300;
27  else
28  %FRAÇÕES DE CALORES DO MODELO
29  Fp_hfb=-0.0453;
30  Fox_hfb=-0.5535;
31  end
32
33  %Tipo de relação para corrente de ar
34  Trel=3; % 1=Relação de ar 2=Relação equivalente 3=Relação
35  ar-combustível
36  rel=1.86;
37  %Comprimento da zona de redução [m]
38  L=0.2625;
39
40
41  %Tipo de ingresso de dados da biomassa
42  T_dat=1; % 1=Análise elementar 2=Formula
43
44  if T_dat==1
45      %Composição elementar (Porcentagens em base seca):
46      C_porc=50.6;
47      H_porc=6.5;
48      O_porc=100-A_porc-H_porc-C_porc;
49      A_porc;
50  else
51      %Em caso de ingressar com a fórmula elementar da biomassa
52      (bc,bh,bo)
53      bC=0
54      bH=0
55      bO=0
56
57      C_porc=12*bC*((100-A_porc)/(12*bC+bH+16*bO));
58      H_porc=bH*((100-A_porc)/(12*bC+bH+16*bO));
59      O_porc=16*bO*((100-A_porc)/(12*bC+bH+16*bO));
60  end
61
62  %Calculando a matéria volátil [%]
63  C_porv=V_porc-H_porc-O_porc;
64  H_porv=H_porc;
65  O_porv=O_porc;
66  %Calculando o Carbono não volátil [%]
67  C_pornv=C_porc-(V_porc-H_porc-O_porc);
68
69  %Calculando os subscritos das formulas elementares
70  FAC=0.1;
71  bC=1
72  bH=((12*H_porc)/C_porc)*(1-FAC)

```

```

73 bO=((12*O_porc)/(16*C_porc))*(1-FAC)
74 bvC=((V_porc-H_porc-O_porc)/C_porc)*(1-FAC)
75 bnvC=((C_porc-(V_porc-H_porc-O_porc))/C_porc)
76 disp('----- Tar -----')
77 -----')
78 tH=((12*H_porc)/C_porc)*(FAC)
79 tO=((12*O_porc)/(16*C_porc))*(FAC)
80 tC=((V_porc-H_porc-O_porc)/C_porc)*(FAC)
81 disp('-----')
82 -----')
83 if base_W==1
84     w=(W_porc*(12*bC+bH+16*bO))/(18*(100-A_porc));
85 else
86     w=(W_porc*(12*bC+bH+16*bO))/(18*(100-A_porc-W_porc));
87 end
88
89 %Tabelas termodinâmicas
90
91 h_C=[0,0.016,1.053,2.384,3.964,5.742,7.666,9.699,11.818,14.007
92     ,...
93     16.253,18.545,20.874,23.233,25.617,28.021,30.441,32.876,35.323
94     ]; %[kJ/mol]
95
96
97 h_CO2=[-393.505,-393.436,-389.501,-385.198,-380.596,-
98     375.749,...
99     -370.696,-365.472,-360.105,-354.617,-349.028,-343.354,-
100    337.606,...
101    -331.796,-325.932,-320.022,-314.07,-308.082,-302.062];
102    %[kJ/mol]
103
104 h_CO=[-110.541,-110.487,-107.564,-104.609,-101.599,-98.518,...
105     -95.364,-92.14,-88.851,-85.506,-82.111,-78.674,-75.199,...
106     -71.691,-68.156,-64.596,-61.015,-57.415,-53.797];
107    %[kJ/mol]
108
109 h_CH4=[-74.873,-74.807,-71.015,-66.676,-61.745,-56.24,-
110     50.2,...
111     -43.67,-36.698,-29.329,-21.607,-13.574,-
112     5.266,3.282,12.041,...
113     20.985,30.091,39.341,48.721]; %[kJ/mol]
114
115 h_H2=[0,0.053,2.959,5.882,8.811,11.749,14.702,17.676,20.68,23.
116     719,...
117     26.797,29.918,33.082,36.29,39.541,42.835,46.168,49.541,52.951]
118     ; %[kJ/mol]
119
120
121 h_C2H2=[226.731,226.813,231.58,236.863,242.525,248.499,254.746
122     ,...

```

```

123
124 261.239,267.955,274.877,281.988,289.272,296.716,304.306,312.02
125 7,...
126 319.866,327.81,335.847,343.962]; %[kJ/mol]
127
128 h_H2O=[-241.826,-241.764,-238.375,-234.902,-231.326,-
129 227.635,...
130 -223.825,-219.889,-215.827,-211.636,-207.321,-202.885,-
131 198.334,...
132 -193.676,-188.919,-184.069,-179.134,-174.122,-169.037];
133 %[kJ/mol]
134
135 h_N2=[0,0.054,2.971,5.911,8.894,11.937,15.046,18.222,21.463,24
136 .76,28.109,...
137 31.503,34.936,38.405,41.904,45.429,48.978,52.548,56.137];
138 %[kJ/mol]
139
140 h_O2=[0,0.054,3.025,6.084,9.244,12.499,15.836,19.241,22.703,26
141 .212,29.761,...
142 33.344,36.957,40.598,44.266,47.957,51.673,55.413,59.176];
143 %[kJ/mol]
144
145 v_T=[298.15,300,400,500,600,700,800,900,1000,1100,1200,1300,14
146 00,1500,...
147 1600,1700,1800,1900,2000]; %K
148
149 %=====
150 =====
151 %=====
152 =====
153 % Pirólise %
154 %=====
155 =====
156 %=====
157 =====
158 disp('===== PIRÓLISE
159 =====')
160
161 n_pCO2=(7/125)*bO
162 n_pCO=(11/125)*bO
163 n_pH2=(1/4)*(bH-(8/5)*bO)
164 n_pC2H2=(167/2836)*(bH-(8/5)*bO)
165 n_pCH4=(271/2836)*(bH-(8/5)*bO)
166 n_ptC=bvC+(59/299)*bO-(16/75)*bH+bnvC
167 n_ptH2O=(4/5)*bO+w
168
169
170
171 %Entalpia de formação da biomassa
172 A_m=(A_porC*(12*bC+bH+16*bO))/(100-A_porC);

```

```

173 h_fb=(12*bC+bH+16*bO+18*w+A_m)*HHV+(bH/2)*(-285.830)+bC*(-
174 393.505);
175
176 %Balanço de energia
177 vsum_nhp=n_pCO2*h_CO2...
178     +n_pCO*h_CO...
179     +n_pH2*h_H2...
180     +n_pC2H2*h_C2H2...
181     +n_pCH4*h_CH4...
182     +n_ptC*h_C...
183     +n_ptH2O*h_H2O;
184
185
186 %Resolvendo a equação do balanço de energia
187 if mcor==1
188     sum_nhp=spline(v_T,vsum_nhp,Tp);
189     q_pir=h_fb+w*(-241.826)-sum_nhp;
190     %disp('Fator de calor de pirólise');
191     Fp_hfb=q_pir/h_fb;
192 else
193     q_pir=Fp_hfb*h_fb;
194     Rb=h_fb+w*(-241.826)-q_pir;
195     %disp('Temperatura de pirólise [K]');
196     Tp=spline(vsum_nhp,v_T,Rb);
197     sum_nhp=spline(v_T,vsum_nhp,Tp);
198 end
199
200 %=====
201 =====
202 %=====
203 =====
204                                     % Oxidação %
205 %=====
206 =====
207 %=====
208 =====
209 disp('===== OXIDAÇÃO
210 =====')
211 a_t=bC+(bH/4)-(bO/2);
212 FA_estq=(12*bC+bH+16*bO+18*w+A_m)/(137.28*a_t);
213 if Trel==1
214     fi=1/rel;
215 end
216 if Trel==2
217     fi=rel;
218 end
219 if Trel==3
220     fi=1/(rel*FA_estq);
221 end
222

```

```

223 %Imprimindo as relações para fluxo de ar
224 if Trel==1
225     disp('Fator de ar (FA < 1)')
226     FA=rel
227     disp('Relação equivalente (RE > 1)')
228     RE=1/rel
229     disp('Relação ar - combustível ')
230     RAC=rel/FA_estq
231 end
232 if Trel==2
233     disp('Fator de ar (FA < 1)')
234     FA=1/rel
235     disp('Relação equivalente (RE > 1)')
236     RE=rel
237     disp('Relação ar - combustível ')
238     RAC=1/(rel*FA_estq)
239 end
240 if Trel==3
241     disp('Fator de ar (FA < 1)')
242     FA=(rel*FA_estq)
243     disp('Relação equivalente (RE > 1)')
244     RE=1/(rel*FA_estq)
245     disp('Relação ar - combustível ')
246     rel
247 end
248 a=a_t/fi;
249 disp('=====')
250 '=====')
251
252 FO1=a-(5/2)*n_pC2H2;
253 if FO1<=0
254     n_oxCO2=n_pCO2+2*n_pC2H2
255     n_oxCO=n_pCO
256     n_oxCH4=n_pCH4
257     n_oxC=n_ptC
258     n_oxH2O=n_ptH2O+n_pC2H2
259     n_oxN2=3.76*a
260     n_oxH2=n_pH2
261 else
262     FO2=FO1-(1/2)*n_pH2;
263     if FO2<=0
264         n_oxCO2=n_pCO2+2*n_pC2H2
265         n_oxCO=n_pCO
266         n_oxCH4=n_pCH4
267         n_oxC=n_ptC
268         n_oxH2O=n_ptH2O+n_pC2H2+2*FO1
269         n_oxN2=3.76*a
270         n_oxH2=n_pH2-2*FO1
271     else

```

```

272         n_oxCO2=n_pCO2+2*n_pC2H2+((a-(5/2)*n_pC2H2-
273 (1/2)*n_pH2)/2.7803)
274         n_oxCO=n_pCO+3.5606*((a-(5/2)*n_pC2H2-
275 (1/2)*n_pH2)/2.7803)
276         n_oxCH4=n_pCH4
277         n_oxC=n_ptC-4.5606*((a-(5/2)*n_pC2H2-
278 (1/2)*n_pH2)/2.7803)
279         n_oxH2O=n_ptH2O+n_pC2H2+n_pH2
280         n_oxN2=3.76*a
281         n_oxH2=0
282     end
283 end
284
285
286 vsum_nhar=a*h_O2...
287     +3.76*a*h_N2;
288
289 vsum_nhox=n_oxCO2*h_CO2...
290     +n_oxCO*h_CO...
291     +n_oxCH4*h_CH4...
292     +n_oxC*h_C...
293     +n_oxH2O*h_H2O...
294     +n_oxN2*h_N2;
295
296
297 sum_nhar=spline(v_T,vsum_nhar,Tar);
298
299 if mcor==1
300     sum_nhox=spline(v_T,vsum_nhox,Tox);
301     q_ox=sum_nhp+sum_nhar-sum_nhox;
302     %disp('Fator de calor de oxidação');
303     Fox_hfb=q_ox/h_fb;
304 else
305     q_ox=Fox_hfb*h_fb;
306     Rox=sum_nhp+sum_nhar-q_ox;
307     %disp('Temperatura de oxidação [K]');
308     Tox=spline(vsum_nhox,v_T,Rox);
309     ToxC=Tox-273.15;
310 end
311
312 %Calculando as concentrações das espécies
313 n_t=n_oxN2...
314     +n_oxCO2...
315     +n_oxCO...
316     +n_oxCH4...
317     +n_oxH2O...
318     +n_oxH2;
319
320
321 P=101325; % [Pa]

```

```

322 T=Tox; % [K]
323 R=8.314472; %[J/mol.K]
324 mm=1/n_t;
325
326 c_oxN2=n_oxN2*mm;
327 c_oxCO2=n_oxCO2*mm;
328 c_oxCO=n_oxCO*mm;
329 c_oxCH4=n_oxCH4*mm;
330 c_oxH2O=n_oxH2O*mm;
331 c_oxH2=n_oxH2*mm;
332
333 %=====
334 =====
335 %=====
336 =====
337                                % Redução %
338 %=====
339 =====
340 %=====
341 =====
342 disp('===== REDUÇÃO
343 =====')
344 rg=[0 L];
345 y0(Zainal et al., 2001)=101325;
346 y0(2)=1.175;
347 y0(3)=Tox;
348 y0(4)=c_oxN2;
349 y0(5)=c_oxCO2;
350 y0(Beenackers et al.)=c_oxCO;
351 y0(7)=c_oxCH4;
352 y0(8)=c_oxH2O;
353 y0(Beenackers et al.)=c_oxH2;
354
355
356 [z,y]=ode45(@reducao,rg,y0);
357 nt=y(:,4)+y(:,5)+y(:,6)+y(:,7)+y(:,9);
358 F=[y(:,4)./nt y(:,5)./nt y(:,6)./nt y(:,7)./nt y(:,9)./nt];
359
360
361 %figure(Lloyd's Register of Shipping (Firm : 1914- ))
362 figure(Beenackers et al.)%Frações molares
363 plot(z,F(:,1),z,F(:,2),z,F(:,3),z,F(:,4),z,F(:,5))
364 legend('N2','CO2','CO','CH4','H2')
365 xlabel('z (m)')
366 ylabel('Fração molar')
367 title('Frações molares (base seca)')
368 axis([-0.025 L+0.025 -0.05 1])
369 set(gca,'XTick',-0.025:0.025:L+0.025)
370 set(gca,'YTick',-0.05:0.05:1)
371 grid on

```



```

372
373
374 figure(2)%temperatura
375 xx=[0.04,0.08,0.12,0.16,0.2,0.24];
376 yy=[1250,1282,1186,1167,1019,821];
377 plot(z,y(:,3),xx,yy,'ro')
378 legend('T(K) NEST model','T (K) Jayah exp.')
379 xlabel('z (m)')
380 ylabel('T (K)')
381 title('Perfil de Temperaturas da Zona de Oxidação')
382 axis([-0.025 L+0.025 300 2000])
383 set(gca,'XTick',-0.025:0.025:L+0.025)
384 set(gca,'YTick',300:100:2000)
385 grid on
386
387
388 cf=F(length(z),:); %Vetor concentrações morares na saída do
389 %reator (porcentagem em volume)
390
391
392 y_N2= cf(Beenackers et al.)
393 y_CO2= cf(2)
394 y_CO= cf(3)
395 y_CH4= cf(4)
396 y_H2= cf(5)
397
398
399 FM=[y_CH4,y_CO,y_CO2,y_H2,y_N2];
400 save FM.txt FM -ASCII
401 %FM=[FM_CH4,FM_CO,FM_CO2,FM_H2,FM_N2]
402
403 %Matrizes de comparação com alguns resultados experimentais
404 M1=[0.519 y_N2;0.099 y_CO2;0.196 y_CO;0.014 y_CH4;0.172 y_H2];
405 M2=[0.507 y_N2;0.097 y_CO2;0.202 y_CO;0.011 y_CH4;0.183 y_H2];
406 M3=[0.526 y_N2;0.097 y_CO2;0.194 y_CO;0.011 y_CH4;0.172 y_H2];
407 M4=[0.527 y_N2;0.106 y_CO2;0.184 y_CO;0.013 y_CH4;0.170 y_H2];
408 M5=[0.550 y_N2;0.108 y_CO2;0.197 y_CO;0.013 y_CH4;0.132 y_H2];
409 M6=[0.591 y_N2;0.085 y_CO2;0.189 y_CO;0.012 y_CH4;0.125 y_H2];
410 M7=[0.529 y_N2;0.114 y_CO2;0.191 y_CO;0.011 y_CH4;0.155 y_H2];
411 M8=[0.534 y_N2;0.105 y_CO2;0.221 y_CO;0.013 y_CH4;0.127 y_H2];
412 M9=[0.560 y_N2;0.107 y_CO2;0.191 y_CO;0.012 y_CH4;0.130 y_H2];
413 ME=[0.480 y_N2;0.100 y_CO2;0.240 y_CO;0.020 y_CH4;0.140 y_H2];
414 MD=[0.4875 y_N2;0.1025 y_CO2;0.2425 y_CO;0.0275 y_CH4;0.140
415 y_H2];
416
417
418 M=M7;
419
420 figure(3)%Gráfico de barras das concentrações
421 bar(M)

```

```
422 set(gca,'XTickLabel',{'N2','CO2','CO','CH4','H2'})
423 ylabel('composição (fração molar)')
424 legend('Jayah (Exp.)','NEST Model')
425 axis([0 6 0 max(max(M))+0.05])
426 grid on
427
428 run ahrind.m
429
```

A.2 reducao.m

```

1 function dydz=reduccion(z,y)
2
3 %reduccion.m
4 %
5 %Função na qual se escreve o sistema de nove equações
6 diferencias com
7 %nove funções incógnitas
8 %
9 %z= comprimento da zona de redução
10 %y(Beenackers et al.)=P pressão [Pa]
11 %y(2)=v velocidade do gás [m/s]
12 %y(3)=T temperatura do gás [K]
13 %y(4)=n_N2 Nitrogênio
14 %y(5)=n_CO2 Dióxido de carbono
15 %y(Beenackers et al.)=n_CO Monóxido de carbono
16 %y(7)=n_CH4 Metano
17 %y(8)=n_H2O Água
18 %y(Beenackers et al.)=n_H2 Hidrogênio
19
20
21
22 %CRF exponencial
23 fil2=length(z);
24 Zpro=z(fil2);
25 CRF=exp(36.7*Zpro);
26
27 A=[3.616e1 1.517e4 4.189e-3 7.301e-2]; %(1/s)
28 E=1000*[77.39 121.62 19.21 36.15]; %(J/mol)
29 DH=[-172600 -131400 75000 -206400]; %(J/mol)
30 R=8.314472; %(J/mol.K)
31
32 %Cálculo das densidades
33 yb=y(:,length(z));
34 ya=yb*(yb(1)/(R*yb(3)));
35 d_gas=(28*ya(4)+44*ya(5)+28*ya(Lloyd's Register of Shipping
36 (Firm : 1914- ))+16*ya(7)+18*ya(8)+2*ya(Beenackers et
37 al.))/1000; % [kg/m^3]
38 d_air=(yb(1)*(0.02884))/(R*yb(3));
39
40
41 VT=[298.1 300 400 500 600 700 800 900 1000 1100 1200 1300 1400
42 1500 1600 1700 1800 1900 2000]; %(K)
43
44 fil=length(y(3));

```

```

45 Tpro=y(3,fil);
46
47 cp_N2=spline(VT,[29.123 29.125 29.246 29.583 30.113 30.752
48 31.430 32.094...
49 32.696 33.240 33.723 34.148 34.519 34.844 35.128 35.378
50 35.598 35.794 35.969],Tpro);
51
52 cp_CO2=spline(VT,[37.132 37.217 41.326 44.625 47.323 49.563
53 51.434 52.999...
54 54.308 55.412 56.342 57.130 57.803 58.381 58.883 59.321
55 59.705 60.046 60.349],Tpro);
56
57 cp_CO=spline(VT,[29.140 29.144 29.342 29.794 30.444 31.171
58 31.898 32.578 ...
59 33.183 33.710 34.172 34.573 34.919 35.220 35.481 35.710
60 35.912 36.090 36.249],Tpro);
61
62 cp_CH4=spline(VT,[35.645 35.707 40.489 46.349 52.232 57.798
63 62.929 67.591...
64 71.782 75.523 78.839 81.764 84.333 86.583 88.553 90.281
65 91.808 93.174 94.420],Tpro);
66
67 cp_H2O=spline(VT,[33.590 33.596 34.261 35.230 36.322 37.494
68 38.723 39.988 ...
69 41.267 42.535 43.769 44.943 46.055 47.091 48.050 48.934
70 49.747 50.496 51.185],Tpro);
71
72 cp_H2=spline(VT,[28.836 28.849 29.182 29.260 29.326 29.442
73 29.625 29.880 ...
74 30.205 30.579 30.992 31.424 31.863 32.298 32.725 33.138
75 33.536 33.916 34.279],Tpro);
76
77 K1=10^((-8992.926/(y(3)))+9.183);
78 K2=10^((-6999.663/(y(3)))+7.404);
79 K3=10^((4330.847/(y(3)))-5.436);
80 K4=10^((-11330.509/(y(3)))+12.840);
81
82 sum_nc=y(4)*cp_N2+y(5)*cp_CO2+y(Lloyd's Register of Shipping
83 (Firm : 1914- ))*cp_CO+y(7)*cp_CH4+y(8)*cp_H2O+y(Beenackers et
84 al.)*cp_H2;
85 n_t=y(4)+y(5)+y(Lloyd's Register of Shipping (Firm : 1914-
86 ))+y(7)+y(8)+y(Beenackers et al.);
87
88
89 P_CO2=(y(1)*(y(5)/(y(4)+y(5)+y(Lloyd's Register of Shipping
90 (Firm : 1914- ))+y(7)+y(8)+y(Beenackers et al.)))/1e5; %
91 [bar]
92 P_CO=(y(1)*(y(6)/(y(4)+y(5)+y(Lloyd's Register of Shipping
93 (Firm : 1914- ))+y(7)+y(8)+y(Beenackers et al.)))/1e5; %
94 [bar]

```

```

95 P_CH4=(y(1)*(y(7)/(y(4)+y(5)+y(Lloyd's Register of Shipping
96 (Firm : 1914- ))+y(7)+y(8)+y(Beenackers et al.)))/1e5; %
97 [bar]
98 P_H2O=(y(1)*(y(8)/(y(4)+y(5)+y(Lloyd's Register of Shipping
99 (Firm : 1914- ))+y(7)+y(8)+y(Beenackers et al.)))/1e5; %
100 [bar]
101 P_H2=(y(1)*(y(9)/(y(4)+y(5)+y(Lloyd's Register of Shipping
102 (Firm : 1914- ))+y(7)+y(8)+y(Beenackers et al.)))/1e5; %
103 [bar]
104
105 r1=CRF*A(Lloyd's Register of Shipping (Firm : 1914- ))*exp(-
106 E(1)/(R*y(3)))*(P_CO2-((P_CO)^2/K1));
107 r2=CRF*A(2)*exp(-E(2)/(R*y(3)))*(P_H2O-((P_CO*P_H2)/K2));
108 r3=CRF*A(3)*exp(-E(3)/(R*y(3)))*(((P_H2)^2)-(P_CH4/K3));
109 r4=A(4)*exp(-E(4)/(R*y(3)))*(((P_CH4*P_H2O)-
110 ((P_CO)*((P_H2)^3))/K4));
111
112 R_N2=0;
113 R_CO2=-r1;
114 R_CO=2*r1+r2+r4;
115 R_CH4=r3-r4;
116 R_H2O=-r2-r4;
117 R_H2=r2-2*r3+3*r4;
118 R_t=r1+r2-r3+2*r4;
119
120 sum_rdH=r1*DH(Beenackers et al.)+r2*DH(2)+r3*DH(3)+r4*DH(4);
121
122 sum_Rc=R_N2*cp_N2+R_CO2*cp_CO2+R_CO*cp_CO+R_CH4*cp_CH4+R_H2O*c
123 p_H2O+R_H2*cp_H2;
124
125
126 %Sistema de equações diferenciais da zona de redução do
127 gaseificador
128 dydz(1,1)=(1183*(d_gas/d_air)*y(2)^2)+388.19*y(2)-79.896; %
129 dp/dz
130
131 dydz(2,1)=(1/(sum_nc+(n_t)*R))*((sum_nc*R_t/n_t)-
132 (sum_rdH/y(3))-((1183*...
133 (d_gas/d_air)*y(2)^2)+388.19*y(2)-
134 79.896)*((y(2)/y(3))+(y(2)*...
135 sum_nc/y(Beenackers et al.)))-sum_Rc); % dv/dz
136
137 dydz(3,1)=(1/(y(2)*sum_nc))*(-sum_rdH-
138 y(2)*((1183*(d_gas/d_air)*y(2)^2)...
139 +388.19*y(2)-79.896)-y(Beenackers et al.)*dydz(2,1)-
140 y(3)*sum_Rc); %dT/dz
141
142 dydz(4,1)=(1/y(2))*(R_N2-y(4)*dydz(2,1)); %dn_N2/dz
143
144 dydz(5,1)=(1/y(2))*(R_CO2-y(5)*dydz(2,1)); %n_CO2/dz

```

```
145
146 dydz(6,1)=(1/y(2))*(R_CO-y(6)*dydz(2,1)); %n_CO/dz
147
148 dydz(7,1)=(1/y(2))*(R_CH4-y(7)*dydz(2,1)); %dn_CH4/dz
149
150 dydz(8,1)=(1/y(2))*(R_H2O-y(8)*dydz(2,1)); %dn_H2O/dz
151
152 dydz(9,1)=(1/y(2))*(R_H2-y(9)*dydz(2,1)); %dn_H2/dz
153
154 end
155
```

Apêndice B

CÓDIGOS DA PROGRAMAÇÃO DO MOTOR EM MATLAB

B.1 ahrind.m

```

1  % ahrind.m
2  %
3  % Arquivo-M principal para determinar o desempenho do motor.
4  %
5  % Baseado em:
6  % 1. Ferguson, C.R., 1986, "Internal Combustion Engines",
7  % Wiley.
8  % 2. Buttsworth, D. R. Spark Ignition Internal Combustion
9  % Engine Modelling
10 % Using Matlab. 2002.
11 %
12 *****
13 *****
14 % Entrada:
15 % enginedata.m - Este é outro Arquivo-M que define todos os
16 % parâmetros
17 % relevantes do motor e as condições de funcionamento.
18 %
19 %
20 *****
21 *****
22 clear all

```

```

23 warning off
24 timestart=cputime;
25
26 global b stroke eps r Cblowby f fueltype airscheme phi ...
27 thetas thetab omega ...
28 heattransferlaw hcu hcb ...
29 Tw thetal Vtdc Vbdc massl ...
30 p1 T1 V1
31
32 % Carregando os parâmetros do motor e condições iniciais
33 enginedata
34 switch heattransferlaw
35 case 'Woschni'
36 if (abs(hcu) > 10)|(abs(hcb) > 10),
37 warning('Modelo Woschni com fator de ponderação > 10')
38 end
39 end
40
41 % Parâmetros de integração
42 dtheta=1*pi/180;
43 options=odeset('RelTol',1e-3);
44
45
46 % Integração durante a fase de compressão
47 disp(['Integração durante a fase de compressão']);
48 [thetacomp,pTuWQlHl]=ode45('RatesComp', ...
49 [-pi:dtheta:thetas],[p1 T1 0 0 0],options);
50
51 % Especificação das condições iniciais no início da fase de
52 combustão
53 % b - Início da combustão
54 pb=interp1(thetacomp,pTuWQlHl(:,1),thetas);
55 Tub=interp1(thetacomp,pTuWQlHl(:,2),thetas);
56 Tbb=Tadiabatic(pb,Tub,phi,f,fueltype,airscheme);
57 Wb=interp1(thetacomp,pTuWQlHl(:,3),thetas);
58 Qlb=interp1(thetacomp,pTuWQlHl(:,4),thetas);
59 Hlb=interp1(thetacomp,pTuWQlHl(:,5),thetas);
60
61
62 % Integração durante a fase de combustão
63 disp(['Integração durante a fase de combustão']);
64 [thetacomb,pTbTuWQlHl]=ode45('RatesComb', ...
65 [thetas:dtheta:thetas+thetab],[pb Tbb Tub Wb Qlb
66 Hlb],options);
67
68 % Especificação das condições iniciais no início da fase de
69 expansão
70 % e - Final da combustão / Início da expansão
71 pe=interp1(thetacomb,pTbTuWQlHl(:,1),thetas+thetab);
72 Tbe=interp1(thetacomb,pTbTuWQlHl(:,2),thetas+thetab);

```



```

73 We=interp1(thetacomb,pTbTuWQlHl(:,4),thetas+thetab);
74 Qle=interp1(thetacomb,pTbTuWQlHl(:,5),thetas+thetab);
75 Hle=interp1(thetacomb,pTbTuWQlHl(:,6),thetas+thetab);
76
77
78 % Integração durante a fase de expansão
79 disp(['Integração durante a fase de expansão']);
80 [thetaexp,pTbWQlHl]=ode45('RatesExp', ...
81 [thetas+thetab:dtheta:pi],[pe Tbe We Qle Hle],options);
82
83 % Verificações de erro
84 mass4=mass1*exp(-Cblowby*2*pi/omega);
85 p4=interp1(thetaexp,pTbWQlHl(:,1),pi);
86 T4=interp1(thetaexp,pTbWQlHl(:,2),pi);
87 W4=interp1(thetaexp,pTbWQlHl(:,3),pi);
88 Ql4=interp1(thetaexp,pTbWQlHl(:,4),pi);
89 Hl4=interp1(thetaexp,pTbWQlHl(:,5),pi);
90
91
92 [h4,u4,v4,s4,Y4,cp4,dlv1T4,dlvlp4]= ...
93 farg(p4,T4,phi,1,fueltype,airscheme);
94 U4=u4*mass4;
95 error1=1-v4*mass4/Vbdc;
96 error2=1+W4/(U4-U1+Ql4+Hl4);
97
98 % Pressão efetiva média indicada e eficiência térmica
99 imep=W4/(pi*b^2/4*stroke); %N/m^2
100 eta=W4/mass1*(1+phi*0.06548*(1-f))/phi/0.06548/(1-
101 f)/47870/1e3;
102 % Cálculo do fluxo de calor em W/m^2
103 qcomp=calcq(thetacomp,pTuWQlHl,'comp'); % Compressão
104 qcombu=calcq(thetacomb,pTbTuWQlHl,'combu'); % Combustão (não
105 queimados)
106 qcombb=calcq(thetacomb,pTbTuWQlHl,'combb'); % Combustão
107 (queimados)
108 qexp=calcq(thetaexp,pTbWQlHl,'exp'); % Expansão
109 timefinish=cputime;
110 timetaken=timefinish-timestart;
111
112
113
114 % _____
115
116 display('===== 2 cilindros =====')
117
118 Nc=2; % Número de cilindros
119 n_m=0.8; % Eficiência mecânica
120 n_e=0.85; % Eficiência elétrica
121 Vd=(pi/4)*(b^2)*stroke; % Volume
122 p_ind=Nc*imep*Vd*RPM/120 % Potência indicada

```

```
123 P_elect=p_ind*n_m*n_e
124 n_elect=eta*n_m*n_e
125
126 display('=====')
127
128 %_____
129 save ahrind.mat
130
131 run plotresults
```

```

1 B.2 airdata.m
2 function A=airdata(scheme);
3 %
4 % A=airdata(scheme)
5 %
6 % Rotina para especificar as propriedades termodinâmicas do ar
7 e dos
8 % produtos da combustão
9 %
10 % Baseado em:
11 % 1. Gordon, S., and McBride, B. J., 1971, "Computer Program
12 for
13 % Calculation of Complex Chemical Equilibrium Composition,
14 Rocket
15 % Performance, Incident and Reflected Shocks, and Chapman-
16 Jouguet
17 % Detonations," NASA SP-273. As reported in Ferguson, C. R.,
18 1986,
19 % "Internal Combustion Engines", Wiley.
20 % 2. Kee, R. J., et al., 1991, "The Chemkin Thermodynamic Data
21 Base",
22 % Sandia Report, SAND87-8215B. As reported in
23 % Turns, S. R., 1996, "An Introduction to Combustion:
24 % Concepts and Applications", McGraw-Hill.
25 % 3. Buttsworth, D. R. Spark Ignition Internal Combustion
26 Engine Modelling
27 % Using Matlab. 2002.
28 %
29 *****
30 *****
31 % Entrada:
32 % Mudar scheme:
33 % 'GMcB_low' - Gordon and McBride 300 < T < 1000 K
34 % 'GMcB_hi' - Gordon and McBride 1000 < T < 5000 K
35 % 'Chemkin_low' - Chemkin 300 < T < 1000 K
36 % 'Chemkin_hi' - Chemkin 1000 < T < 5000 K
37 % Saida:
38 % A - matriz de coeficientes do polinômio para cp/R, h/RT, e
39 s/R
40 % da forma h/RT=a1+a2*T/2+a3*T^2/3+a4*T^3/4+a5*T^4/5+a6/T (por
41 % exemplo) donde T é expresso em K
42 % colunas 1 a 7 são coeficientes a1 até a7, e
43 % filas 1 até 10 são espécies CO2 H2O N2 O2 CO H2 H O OH e NO
44 %
45 *****
46 *****
47 switch scheme
48 case 'GMcB_low'
49 A=[ 0.24007797E+01 0.87350957E-02 -0.66070878E-05 0.20021861E-
50 08 ...

```

```
51 0.63274039E-15 -0.48377527E+05 0.96951457E+01
52 0.40701275E+01 -0.11084499E-02 0.41521180E-05 -0.29637404E-08
53 ...
54 0.80702103E-12 -0.30279722E+05 -0.32270046E+00
55 0.36748261E+01 -0.12081500E-02 0.23240102E-05 -0.63217559E-09
56 ...
57 -0.22577253E-12 -0.10611588E+04 0.23580424E+01
58 0.36255985E+01 -0.18782184E-02 0.70554544E-05 -0.67635137E-08
59 ...
60 0.21555993E-11 -0.10475226E+04 0.43052778E+01
61 0.37100928E+01 -0.16190964E-02 0.36923594E-05 -0.20319674E-08
62 ...
63 0.23953344E-12 -0.14356310E+05 0.29555350E+01
64 0.30574451E+01 0.26765200E-02 -0.58099162E-05 0.55210391E-08
65 ...
66 -0.18122739E-11 -0.98890474E+03 -0.22997056E+01
67 0.25000000E+01 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
68 ...
69 0.00000000E+00 0.25471627E+05 -0.46011762E+00
70 0.29464287E+01 -0.16381665E-02 0.24210316E-05 -0.16028432E-08
71 ...
72 0.38906964E-12 0.29147644E+05 0.29639949E+01
73 0.38375943E+01 -0.10778858E-02 0.96830378E-06 0.18713972E-09
74 ...
75 -0.22571094E-12 0.36412823E+04 0.49370009E+00
76 0.40459521E+01 -0.34181783E-02 0.79819190E-05 -0.61139316E-08
77 ...
78 0.15919076E-11 0.97453934E+04 0.29974988E+01]];
79 case 'GMcB_hi'
80 A=[ 0.44608041E+01 0.30981719E-02 -0.12392571E-05 0.22741325E-
81 09 ...
82 -0.15525954E-13 -0.48961442E+05 -0.98635982E+00
83 0.27167633E+01 0.29451374E-02 -0.80224374E-06 0.10226682E-09
84 ...
85 -0.48472145E-14 -0.29905826E+05 0.66305671E+01
86 0.28963194E+01 0.15154866E-02 -0.57235277E-06 0.99807393E-10
87 ...
88 -0.65223555E-14 -0.90586184E+03 0.61615148E+01
89 0.36219535E+01 0.73618264E-03 -0.19652228E-06 0.36201558E-10
90 ...
91 -0.28945627E-14 -0.12019825E+04 0.36150960E+01
92 0.29840696E+01 0.14891390E-02 -0.57899684E-06 0.10364577E-09
93 ...
94 -0.69353550E-14 -0.14245228E+05 0.63479156E+01
95 0.31001901E+01 0.51119464E-03 0.52644210E-07 -0.34909973E-10
96 ...
97 0.36945345E-14 -0.87738042E+03 -0.19629421E+01
98 0.25000000E+01 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
99 ...
100 0.00000000E+00 0.25471627E+05 -0.46011763E+00
```

```
101 0.25420596E+01 -0.27550619E-04 -0.31028033E-08 0.45510674E-11
102 ...
103 -0.43680515E-15 0.29230803E+05 0.49203080E+01
104 0.29106427E+01 0.95931650E-03 -0.19441702E-06 0.13756646E-10
105 ...
106 0.14224542E-15 0.39353815E+04 0.54423445E+01
107 0.31890000E+01 0.13382281E-02 -0.52899318E-06 0.95919332E-10
108 ...
109 -0.64847932E-14 0.98283290E+04 0.67458126E+01];
110 case 'Chemkin_low'
111 A=[ 0.02275724E+02 0.09922072E-01 -0.10409113E-04 0.06866686E-
112 07 ...
113 -0.02117280E-10 -0.04837314E+06 0.10188488E+02
114 0.03386842E+02 0.03474982E-01 -0.06354696E-04 0.06968581E-07
115 ...
116 -0.02506588E-10 -0.03020811E+06 0.02590232E+02
117 0.03298677E+02 0.14082404E-02 -0.03963222E-04 0.05641515E-07
118 ...
119 -0.02444854E-10 -0.10208999E+04 0.03950372E+02
120 0.03212936E+02 0.11274864E-02 -0.05756150E-05 0.13138773E-08
121 ...
122 -0.08768554E-11 -0.10052490E+04 0.06034737E+02
123 0.03262451E+02 0.15119409E-02 -0.03881755E-04 0.05581944E-07
124 ...
125 -0.02474951E-10 -0.14310539E+05 0.04848897E+02
126 0.03298124E+02 0.08249441E-02 -0.08143015E-05 -0.09475434E-09
127 ...
128 0.04134872E-11 -0.10125209E+04 -0.03294094E+02
129 0.02500000E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
130 ...
131 0.00000000E+00 0.02547162E+06 -0.04601176E+01
132 0.02946428E+02 -0.16381665E-02 0.02421031E-04 -0.16028431E-08
133 ...
134 0.03890696E-11 0.02914764E+06 0.02963995E+02
135 0.03637266E+02 0.01850910E-02 -0.16761646E-05 0.02387202E-07
136 ...
137 -0.08431442E-11 0.03606781E+05 0.13588605E+01
138 0.03376541E+02 0.12530634E-02 -0.03302750E-04 0.05217810E-07
139 ...
140 -0.02446262E-10 0.09817961E+05 0.05829590E+02];
141 case 'Chemkin_hi'
142 A=[0.04453623E+02 0.03140168E-01 -0.12784105E-05 0.02393996E-
143 08 ...
144 -0.16690333E-13 -0.04896696E+06 -0.09553959E+01
145 0.02672145E+02 0.03056293E-01 -0.08730260E-05 0.12009964E-09
146 ...
147 -0.06391618E-13 -0.02989921E+06 0.06862817E+02
148 0.02926640E+02 0.14879768E-02 -0.05684760E-05 0.10097038E-09
149 ...
150 -0.06753351E-13 -0.09227977E+04 0.05980528E+02
```

```
151 0.03697578E+02 0.06135197E-02 -0.12588420E-06 0.01775281E-09
152 ...
153 -0.11364354E-14 -0.12339301E+04 0.03189165E+02
154 0.03025078E+02 0.14426885E-02 -0.05630827E-05 0.10185813E-09
155 ...
156 -0.06910951E-13 -0.14268350E+05 0.06108217E+02
157 0.02991423E+02 0.07000644E-02 -0.05633828E-06 -0.09231578E-10
158 ...
159 0.15827519E-14 -0.08350340E+04 -0.13551101E+01
160 0.02500000E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
161 ...
162 0.00000000E+00 0.02547162E+06 -0.04601176E+01
163 0.02542059E+02 -0.02755061E-03 -0.03102803E-07 0.04551067E-10
164 ...
165 -0.04368051E-14 0.02923080E+06 0.04920308E+02
166 0.02882730E+02 0.10139743E-02 -0.02276877E-05 0.02174683E-09
167 ...
168 -0.05126305E-14 0.03886888E+05 0.05595712E+02
169 0.03245435E+02 0.12691383E-02 -0.05015890E-05 0.09169283E-09
170 ...
171 -0.06275419E-13 0.09800840E+05 0.06417293E+02];
172 end
```

B.3 calcq.m

```

1  function q=calcq(theta,pTarray,phase);
2  %
3  % Cálculo do fluxo de calor (W/m^2) dos dados gerados por
4  % ahrind.
5  % theta é uma matriz de ângulos da manivela
6  % pTarray é a matriz correspondente de pressão, temperatura,
7  % trabalho, etc dados, gerado pela execução de arhind.m
8  % phase é um parâmetro que indique a parte do ciclo:
9  % 'comp' - Fase de compressão
10 % 'combu' - Fase de combustão, zona de gases não queimados
11 % 'combb' - Fase de combustão, zona de gases queimados
12 % 'exp' - Fase de expansão
13
14 global b stroke eps r ...
15 omega ...
16 heattransferlaw hcu hcb ...
17 Tw Vtdc Vbdc ...
18 p1 T1 V1
19 switch phase
20 case 'comp'
21 p=pTarray(:,1);
22 T=pTarray(:,2);
23 hc=hcu;
24 C2=0;
25 case 'combu'
26 p=pTarray(:,1);
27 T=pTarray(:,3);
28 hc=hcu;
29 C2=3.24e-3;
30 case 'combb'
31 p=pTarray(:,1);
32 T=pTarray(:,2);
33 hc=hcb;
34 C2=3.24e-3;
35 case 'exp'
36 p=pTarray(:,1);
37 T=pTarray(:,2);
38 hc=hcb;
39 C2=3.24e-3;
40 end
41 switch heattransferlaw
42 case 'constant'
43 hcoeff=hc;

```

```
44 case 'Woschni'
45 V=Vtdc*(1+(r-1)/2*(1-cos(theta)+ ...
46 1/eps*(1-(1-eps^2*sin(theta).^2).^0.5));
47 upmean=omega*stroke/pi; % velocidade média do pistão
48 Vs=Vbdc-Vtdc;
49 k=1.3;
50 C1=2.28;
51 pm=p1*(V1./V).^k; % pressão
52 hcoeff=hc*130*b^(-0.2)*T.^(-0.53).*(p/100e3).^0.8).* ...
53 (C1*upmean+C2*Vs*T1/p1/V1*(p-pm)).^0.8;
54 end
55 q=hcoeff.*(T-Tw);
56
```


B.4 ecp.m

```

1  function
2  [h,u,v,s,Y,cp,dlv1T,dlvlp]=ecp(p,T,phi,fueltype,airscheme,Ygue
3  ss);
4  %
5  %
6  [h,u,v,s,Y,cp,dlv1T,dlvlp]=ecp(p,T,phi,fueltype,airscheme,Ygue
7  ss)
8  %
9  % Rotina para determinar o estado de equilíbrio dos produtos
10 da combustão.
11 % baseado em:
12 % 1. Ferguson, C.R., 1986, "Internal Combustion Engines",
13 Wiley, p122;
14 % which uses the method described by:
15 % 2. Olikara, C., and Borman, G.L., 1975, "A Computer Program
16 for
17 % Calculating Properties of Equilibrium Combustion Products
18 with
19 % Some Applications to I.C. Engines", SAE Paper 750468.
20 % 3. Buttsworth, D. R. Spark Ignition Internal Combustion
21 Engine Modelling
22 % Using Matlab. 2002.
23 %
24 *****
25 *****
26 % Entrada:
27 % p,T,phi - Pressão (Pa), temperatura (K), e relação
28 equivalente
29 % fueltype - 'gasoline', 'diesel', etc - ver fueldata.m para
30 lista completa
31 % airscheme - 'GMcB' (Gordon and McBride) or 'Chemkin'
32 % Yguess - (Opcional) estimado inicial das concentrações
33 molares das
34 % espécies CO2 H2O N2 O2 CO H2 H O OH and NO
35 % Saída:
36 % h - Entalpia (J/kg), u - Energia interna (J/kg),
37 % v - Volume específico (m^3/kg), s - Entropia (J/kgK),
38 % Y - Fração molar de 10 espécies , cp - Calor específico
39 (J/kgK),
40 % dlv1T - Derivada parcial de log(v) wrt log(T)
41 % dlvlp - Derivada parcial de log(v) wrt log(p)

```

```

42 %
43 *****
44 *****
45 [alpha,beta,gamma,delta,Afuel]=fueldata(fueltype);
46 switch airscheme
47 case 'GMcB'
48 A0=airdata('GMcB_hi');
49 case 'Chemkin'
50 A0=airdata('Chemkin_hi');
51 end
52 % Dados de constantes de equilíbrio de Olikara e Borman via
53 Ferguson
54 Kp=[ 0.432168E+00 -0.112464E+05 0.267269E+01 -0.745744E-04
55 0.242484E-08
56 0.310805E+00 -0.129540E+05 0.321779E+01 -0.738336E-04
57 0.344645E-08
58 -0.141784E+00 -0.213308E+04 0.853461E+00 0.355015E-04 -
59 0.310227E-08
60 0.150879E-01 -0.470959E+04 0.646096E+00 0.272805E-05 -
61 0.154444E-08
62 -0.752364E+00 0.124210E+05 -0.260286E+01 0.259556E-03 -
63 0.162687E-07
64 -0.415302E-02 0.148627E+05 -0.475746E+01 0.124699E-03 -
65 0.900227E-08];
66 MinMol=1e-25;
67 tol=3e-12;
68 Ru=8314.34; % J/kmol.K
69 M=[44.01 18.02 28.008 32.000 28.01 2.018 1.009 16 17.009
70 30.004]'; % kg/kmol
71 dcdT=zeros(4,1);
72 dcdp=zeros(4,1);
73 dfdT=zeros(4,1);
74 dfdp=zeros(4,1);
75 dYdT=zeros(10,1);
76 dYdp=zeros(10,1);
77 B=zeros(4,1);
78 eps=0.210/(alpha+0.25*beta-0.5*gamma);
79 if nargin==5 % Não Yguess então estima a composição usando
80 farg
81 [h,u,v,s,Y,cp,dlvlT,dvlp]=farg(p,T,phi,1,fueltype,airscheme);
82 Y(7:10)=ones(4,1)*MinMol; % Uma vez que farg só retorna as 6
83 primeiras espécies
84 else
85 Y=Yguess;
86 end
87 % avaliando constantes
88 patm=p/101.325e3; % Converter Pa a atm
89 TKp=[log(T/1000) 1/T 1 T T^2]';
90 K=10.^(Kp*TKp);
91 c=K.*[1/sqrt(patm) 1/sqrt(patm) 1 1 sqrt(patm) sqrt(patm)]';

```

```

92 d=[beta/alpha (gamma+0.42/eps/phi)/alpha
93 (delta+1.58/eps/phi)/alpha]';
94 if abs(phi-1)<tol
95 phi=phi*(1+tol*sign(phi-1));
96 end
97 i=find(Y<MinMol);
98 Y(i)=ones(length(i),1)*MinMol;
99 DY3to6=2*tol*ones(4,1);
100 MaxIter=500;
101 MaxVal=max(abs(DY3to6));
102 Iter=0;
103 DoneSome=0;
104 while (Iter<MaxIter)&((MaxVal>tol)|(DoneSome<1))
105 Iter=Iter+1;
106 if Iter>2,
107 DoneSome=1;
108 end
109 D76=0.5*c(Beenackers et al.)/sqrt(Y(6));
110 D84=0.5*c(2)/sqrt(Y(4));
111 D94=0.5*c(3)*sqrt(Y(6)/Y(4));
112 D96=0.5*c(3)*sqrt(Y(4)/Y(Beenackers et al.));
113 D103=0.5*c(4)*sqrt(Y(4)/Y(3));
114 D104=0.5*c(4)*sqrt(Y(3)/Y(4));
115 D24=0.5*c(5)*Y(Beenackers et al.)/sqrt(Y(4));
116 D26=c(5)*sqrt(Y(4));
117 D14=0.5*c(Beenackers et al.)*Y(5)/sqrt(Y(4));
118 D15=c(Beenackers et al.)*sqrt(Y(4));
119 A(1,1)=1+D103;
120 A(1,2)=D14+D24+1+D84+D104+D94;
121 A(1,3)=D15+1;
122 A(1,4)=D26+1+D76+D96;
123 A(2,1)=0;
124 A(2,2)=2*D24+D94-d(Beenackers et al.)*D14;
125 A(2,3)=-d(Beenackers et al.)*D15-d(Beenackers et al.);
126 A(2,4)=2*D26+2+D76+D96;
127 A(3,1)=D103;
128 A(3,2)=2*D14+D24+2+D84+D94+D104-d(2)*D14;
129 A(3,3)=2*D15+1-d(2)*D15-d(2);
130 A(3,4)=D26+D96;
131 A(4,1)=2+D103;
132 A(4,2)=D104-d(3)*D14;
133 A(4,3)=-d(3)*D15-d(3);
134 A(4,4)=0;
135 B(Beenackers et al.)=-(sum(Y)-1);
136 B(2)=-((2*Y(2)+2*Y(Beenackers et al.))+Y(7)+Y(Beenackers et
137 al.))-d(Lloyd's Register of Shipping (Firm : 1914-
138 ))*Y(Beenackers et al.))-d(Beenackers et al.)*Y(5));
139 B(3)=-((2*Y(1)+Y(2)+2*Y(4)+Y(5)+Y(8)+Y(Beenackers et
140 al.))+Y(10))-d(2)*Y(Lloyd's Register of Shipping (Firm : 1914-
141 ))-d(2)*Y(5));

```

```

142 B(4)=- (2*Y(3)+Y(10)-d(3)*Y(Beenackers et al.))-d(3)*Y(5));
143 invA=inv(A);
144 DY3to6=invA*B;
145 MaxVal=max(abs(DY3to6));
146 Y(3:6)=Y(3:6)+DY3to6/10;
147 i=find(Y<MinMol);
148 Y(i)=ones(length(i),1)*MinMol;
149 Y(7)=c(Beenackers et al.)*sqrt(Y(6));
150 Y(8)=c(2)*sqrt(Y(4));
151 Y(Beenackers et al.)=c(3)*sqrt(Y(4)*Y(Lloyd's Register of
152 Shipping (Firm : 1914- )));
153 Y(10)=c(4)*sqrt(Y(4)*Y(3));
154 Y(2)=c(5)*sqrt(Y(4))*Y(Beenackers et al.);
155 Y(Beenackers et al.)=c(Beenackers et al.)*sqrt(Y(4))*Y(5);
156 end
157 if Iter>=MaxIter
158 warning('convergence failure in composition loop');
159 end
160 TdKdT=[1/T -1/T^2 1 2*T]';
161 dKdT=2.302585*K.*(Kp(:,[1 2 4 5])*TdKdT);
162 dcdT(Beenackers et al.)=dKdT(Beenackers et al.)/sqrt(patm);
163 dcdT(2)=dKdT(2)/sqrt(patm);
164 dcdT(3)=dKdT(3);
165 dcdT(4)=dKdT(4);
166 dcdT(5)=dKdT(5)*sqrt(patm);
167 dcdT(Beenackers et al.)=dKdT(Beenackers et al.)*sqrt(patm);
168 dcdp(Beenackers et al.)=-0.5*c(Beenackers et al.)/p;
169 dcdp(2)=-0.5*c(2)/p;
170 dcdp(5)=0.5*c(5)/p;
171 dcdp(Beenackers et al.)=0.5*c(Beenackers et al.)/p;
172 x1=Y(Beenackers et al.)/c(Beenackers et al.);
173 x2=Y(2)/c(5);
174 x7=Y(7)/c(Beenackers et al.);
175 x8=Y(8)/c(2);
176 x9=Y(Beenackers et al.)/c(3);
177 x10=Y(10)/c(4);
178 dfdT(Lloyd's Register of Shipping (Firm : 1914-
179 ))=dcdT(Beenackers et al.)*x1+dcdT(5)*x2+dcdT(Beenackers et
180 al.)*x7+dcdT(2)*x8+ ...
181 dcdT(3)*x9+dcdT(4)*x10;
182 dfdT(2)=2*dcdT(5)*x2+dcdT(Beenackers et al.)*x7+dcdT(3)*x9-
183 d(Beenackers et al.)*dcdT(Beenackers et al.)*x1;
184 dfdT(3)=2*dcdT(Beenackers et
185 al.)*x1+dcdT(5)*x2+dcdT(2)*x8+dcdT(3)*x9+ ...
186 dcdT(4)*x10-d(2)*dcdT(Beenackers et al.)*x1;
187 dfdT(4)=dcdT(4)*x10-d(3)*dcdT(Beenackers et al.)*x1;
188 dfdp(Beenackers et al.)=dcdp(Beenackers et
189 al.)*x1+dcdp(5)*x2+dcdp(Beenackers et al.)*x7+dcdp(2)*x8;
190 dfdp(2)=2*dcdp(5)*x2+dcdp(Beenackers et al.)*x7-d(Beenackers
191 et al.)*dcdp(Beenackers et al.)*x1;

```

```

192 dfdp(3)=2*dcdp(Beenackers et al.)*x1+dcdp(5)*x2+dcdp(2)*x8-
193 d(2)*dcdp(Beenackers et al.)*x1;
194 dfdp(4)=-d(3)*dcdp(Beenackers et al.)*x1;
195 B=-dfdT;
196 dYdT(3:6)=invA*B;
197 dYdT(Beenackers et al.)=sqrt(Y(4))*Y(5)*dcdT(Beenackers et
198 al.)+D14*dYdT(4)+D15*dYdT(5);
199 dYdT(2)=sqrt(Y(4))*Y(Beenackers et
200 al.)*dcdT(5)+D24*dYdT(4)+D26*dYdT(Beenackers et al.);
201 dYdT(7)=sqrt(Y(6))*dcdT(Beenackers et al.)+D76*dYdT(Beenackers
202 et al.);
203 dYdT(8)=sqrt(Y(4))*dcdT(2)+D84*dYdT(4);
204 dYdT(Beenackers et al.)=sqrt(Y(4))*Y(Lloyd's Register of
205 Shipping (Firm : 1914-
206 ))*dcdT(3)+D94*dYdT(4)+D96*dYdT(Beenackers et al.);
207 dYdT(10)=sqrt(Y(4))*Y(3)*dcdT(4)+D104*dYdT(4)+D103*dYdT(3);
208 B=-dfdp;
209 dYdp(3:6)=invA*B;
210 dYdp(Beenackers et al.)=sqrt(Y(4))*Y(5)*dcdp(Beenackers et
211 al.)+D14*dYdp(4)+D15*dYdp(5);
212 dYdp(2)=sqrt(Y(4))*Y(Beenackers et
213 al.)*dcdp(5)+D24*dYdp(4)+D26*dYdp(Beenackers et al.);
214 dYdp(7)=sqrt(Y(6))*dcdp(Beenackers et al.)+D76*dYdp(Beenackers
215 et al.);
216 dYdp(8)=sqrt(Y(4))*dcdp(2)+D84*dYdp(4);
217 dYdp(Beenackers et al.)=D94*dYdp(4)+D96*dYdp(Lloyd's Register
218 of Shipping (Firm : 1914- ));
219 dYdp(10)=D104*dYdp(4)+D103*dYdp(3);
220 % Calculando propriedades termodinâmicas
221 Tcp0=[1 T T^2 T^3 T^4]';
222 Th0=[1 T/2 T^2/3 T^3/4 T^4/5 1/T]';
223 Ts0=[log(T) T T^2/2 T^3/3 T^4/4 1]';
224 cp0=A0(:,1:5)*Tcp0;
225 h0=A0(:,1:6)*Th0;
226 s0=A0(:,[1:5 7])*Ts0;
227 % Y(Beenackers et al.) e Y(2) reavaliada
228 Y(Beenackers et al.)=(2*Y(3)+Y(10))/d(3)-Y(5);
229 Y(2)=(d(1)/d(3)*(2*Y(3)+Y(10))-2*Y(Beenackers et al.)-Y(7)-
230 Y(Beenackers et al.))/2;
231 i=find(Y<MinMol);
232 Y(i)=ones(length(i),1)*MinMol;
233 % Propriedades da mistura
234 h=sum(h0.*Y);
235 s=sum((s0-log(Y)).*Y);
236 cp=sum(Y.*cp0+h0.*dYdT*T);
237 MW=sum(Y.*M);
238 MT=sum(dYdT.*M);
239 Mp=sum(dYdp.*M);
240 R=Ru/MW;
241 v=R*T/p;

```

```
242 cp=R*(cp-h*T*MT/MW);
243
244
245
246 dlvlT=1+max(-T*MT/MW,0);
247 dlvlp=-1-max(p*Mp/MW,0);
248 h=R*T*h;
249 s=R*(-log(patm)+s);
250 u=h-R*T;
251
```

B.5 enginedata.m

```

1  % enginedata.m
2  %
3  % Arquivo usado pela função ahrind.m para
4  % definir a propriedades do motor e as condições iniciais
5  % ***** Geometria do motor
6  *****
7
8  b=0.09; % engine bore (m)
9  stroke=0.09; % engine stroke (m)
10 eps=0.25; % Relação meia carreira viela, s/2l
11 r=12; % Relação de compressão
12 Vtdc=pi/4*b^2*stroke/(r-1); % volume no ponto morto superior
13 Vbdc=pi/4*b^2*stroke+Vtdc; % volume no ponto morto inferior
14
15
16 % ***** Parâmetros de termofluidos no motor
17 *****
18 Cblowby=0.8; % constante de blowby (s^-1)
19 f=0.1; % Fração residual
20 fueltype='syngas';
21 airscheme='GMcB';
22 phi=0.9434; % Relação equivalente
23 thetas=-20*pi/180; % Ângulo de inicio da combustão
24 thetab=70*pi/180; % Ângulo de duração da combustão
25 RPM=1800;
26 omega=RPM*pi/30; % Velocidade do motor em rad/s
27 heattransferlaw='constant'; % 'constant', ou 'Woschni'
28 hcu=500; % Coeficiente (ponderação) de transferência de calor
29 na zona de não queimados
30 hcb=500; % Coeficiente (ponderação) de transferência de calor
31 na zona de queimados
32 Tw=420; % Temperatura da superfície do motor
33
34
35 % ***** Condições iniciais
36 *****
37 p1=100000;
38 n_vol=0.78;
39 p1=p1*n_vol;
40 T1=350;
41 theta1=-pi;
42 V1=Vbdc;

```

```
43 [h1,u1,v1,s1,Y1,cp1,dlv1T1,dlv1p1]=farg(p1,T1,phi,f,fueltype,a
44 irscheme);
45 mass1=Vbdc/v1;
46 U1=u1*mass1;
```


B.6 farg.m

```

1  function
2  [h,u,v,s,Y,cp,dlvlT,dlvlp]=farg(p,T,phi,f,fueltype,airscheme);
3  %
4  %
5  [h,u,v,s,Y,cp,dlvlT,dlvlp]=farg(p,T,phi,f,fueltype,airscheme)
6  %
7  % Rotina par determinar o estado da mistura de: combustível,
8  ar e
9  % produtos residuais da combustão em baixas temperatura .
10 % Método baseado em:
11 % 1. Ferguson, C.R., 1986, "Internal Combustion Engines",
12 Wiley, p108;
13 % who uses the results of:
14 % 2. Hires, S.D., Ekchian, A., Heywood, J.B., Tabaczynski,
15 R.J., and
16 % Wall, J.C., 1976, "Performance and NOx Emissions Modeling of
17 a Jet
18 % Ignition Pre-Chamber Stratified Charge Engine", SAE Trans.,
19 Vol 85,
20 % Paper 760161.
21 %
22 *****
23 *****
24 % Entrada:
25 % p,T,phi - Pressão (Pa), Temperatura (K), Relação
26 equivalente
27 % f - Fração mássica residual; Ajustas f=0 se não tem produtos
28 da
29 % combustão e f=1 se só tem produtos da combustão
30 % fueltype - 'gasoline', 'diesel', etc - ver fueldata.m Para
31 lista
32 % completa.
33 % airscheme - 'GMcB' (Gordon e McBride) ou 'Chemkin'
34 % Saída:
35 % h - Entalpia (J/kg), u - Energia interna (J/kg),
36 % v - Volume específico (m^3/kg), s - Entropia (J/kgK),
37 % Y - Fração molar de seis espécies : CO2, H2O, N2, O2, CO, e
38 H2,
39 % cp - Calor específico (J/kgK),
40 % dlvlT - Derivada parcial de log(v) wrt log(T)
41 % dlvlp - Derivada parcial de log(v) wrt log(p)

```

```

42  %
43  *****
44  *****
45  [alpha,beta,gamma,delta,Afuel]=fueldata(fueltype);
46  switch airscheme
47  case 'GMCB'
48  A=airdata('GMCB_low');
49  case 'Chemkin'
50  A=airdata('Chemkin_low');
51  end
52
53
54  Ru=8314.34; % J/kmolK
55  table=[-1 1 0 0 1 -1]';
56  M=[44.01 18.02 28.008 32.000 28.01 2.018]'; % kg/kmol
57  MinMol=1e-25;
58  dlvlT=1; dlvlp=-1;
59  eps=0.210/(alpha+0.25*beta-0.5*gamma);
60  if phi <= 1.0 % estequiométrica ou pobre
61  nu=[alpha*phi*eps beta*phi*eps/2 0.79+delta*phi*eps/2 ...
62  0.21*(1-phi) 0 0]';
63  dcdT=0;
64  else % rica
65  z=1000/T;
66  K=exp(2.743+z*(-1.761+z*(-1.611+z*0.2803)));
67  dKdT=-K*(-1.761+z*(-3.222+z*0.8409))/1000;
68  a=1-K;
69  b=0.42-phi*eps*(2*alpha-gamma)+K*(0.42*(phi-1)+alpha*phi*eps);
70  c=-0.42*alpha*phi*eps*(phi-1)*K;
71  nu5=(-b+sqrt(b^2-4*a*c))/2/a;
72  dcdT=dKdT*(nu5^2-nu5*(0.42*(phi-1)+alpha*phi*eps)+ ...
73  0.42*alpha*phi*eps*(phi-1))/(2*nu5*a+b);
74  nu=[alpha*phi*eps-nu5 0.42-phi*eps*(2*alpha-gamma)+nu5 ...
75  0.79+delta*phi*eps/2 0 nu5 0.42*(phi-1)-nu5]';
76  end
77  % frações molares e peso molecular de residual
78  tmoles=sum(nu);
79  Y=nu/tmoles;
80  Mres=sum(Y.*M);
81  % frações molares e peso molecular de Combustível - ar
82  fuel=eps*phi/(1+eps*phi);
83  o2=0.21/(1+eps*phi);
84  n2=0.79/(1+eps*phi);
85  Mfa=fuel*(12.01*alpha+1.008*beta+16*gamma+14.01*delta)+ ...
86  32*o2+28.02*n2;
87  % Fração molar da mistura: combustível - ar - produtos
88  residuais
89  Yres=f/(f+Mres/Mfa*(1-f));
90  Y=Y*Yres;
91  Yfuel=fuel*(1-Yres);

```

```

92  Y(3)=Y(3)+n2*(1-Yres);
93  Y(4)=Y(4)+o2*(1-Yres);
94  % Propriedades dos componentes
95  Tcp0=[1 T T^2 T^3 T^4]';
96  Th0=[1 T/2 T^2/3 T^3/4 T^4/5 1/T]';
97  Ts0=[log(T) T T^2/2 T^3/3 T^4/4 1]';
98
99
100 cp0=A(1:6,1:5)*Tcp0;
101 h0=A(1:6,1:6)*Th0;
102 s0=A(1:6,[1:5 7])*Ts0;
103 Mfuel=12.01*alpha+1.008*beta+16.000*gamma+14.01*delta;
104 a0=Afuel(Lloyd's Register of Shipping (Firm : 1914- ));
105 b0=Afuel(2); c0=Afuel(3); d0=Afuel(Beenackers et al.);
106 e0=Afuel(7);
107 cpfuel=Afuel(1:5)*[1 T T^2 T^3 1/T^2]';
108 hfuel=Afuel(1:6)*[1 T/2 T^2/3 T^3/4 -1/T^2 1/T]';
109 s0fuel=Afuel([1:5 7])*[log(T) T T^2/2 T^3/3 -1/T^2/2 1]';
110
111 if Yfuel<MinMol
112 Yfuel=MinMol;
113 end
114 i=find(Y<MinMol);
115 Y(i)=ones(length(i),1)*MinMol;
116
117 % Propriedades da mistura
118 h=hfuel*Yfuel+sum(h0.*Y);
119 s=(s0fuel-log(Yfuel))*Yfuel+sum((s0-log(Y)).*Y);
120 cp=cpfuel*Yfuel+sum(cp0.*Y)+sum(h0.*table*T*dcdT*Yres/tmoles);
121 MW=Mfuel*Yfuel+sum(Y.*M);
122 R=Ru/MW;
123 h=R*T*h;
124 u=h-R*T;
125 v=R*T/p;
126 s=R*(-log(p/101.325e3)+s);
127 cp=R*cp;

```

B.7 fueldata.m

```
1  function [alpha,beta,gamma,delta,Afuel]=fueldata(fuel)
2
3
4
5  SVal=4.184e3/8.31434;
6  SVec=SVal*[1e-3 1e-6 1e-9 1e-12 1e3 1 1];
7  switch fuel
8  case 'syngas'
9
10 %Carregando frações molares
11 load FM.txt
12 %FM=[FM_CH4,FM_CO,FM_CO2,FM_H2,FM_N2]
13
14 FM_CH4=FM(Beenackers et al.);
15 FM_CO=FM(2);
16 FM_CO2=FM(3);
17 FM_H2=FM(4);
18 FM_N2=FM(5);
19
20
21
22 R=8.314472; %J/mol.K
23
24 % T-->K
25 VT=[298.15
26 300.00
27 400.00
28 500.00
29 600.00
30 700.00
31 800.00
32 900.00
33 1000.00
34 1100.00
35 1200.00
36 1300.00
37 1400.00
38 1500.00
39 1600.00
40 1700.00
41 1800.00
42 1900.00
43 2000.00];
```

```
44
45
46 %tabelas termodinamicas originais
47 % [Cp S H] Cp-->J/K.mol      S-->J/K.mol      H-->kJ/mol
48
49 CH4=[35.6450  186.2140  -74.8730
50      35.7070  186.4340  -74.8070
51      40.4890  197.3100  -71.0150
52      46.3490  206.9680  -66.6760
53      52.2320  215.9420  -61.7450
54      57.7980  224.4170  -56.2400
55      62.9290  232.4750  -50.2000
56      67.5910  240.1600  -43.6700
57      71.7820  247.5030  -36.6980
58      75.5230  254.5230  -29.3290
59      78.8390  261.2400  -21.6070
60      81.7640  267.6680  -13.5740
61      84.3330  273.8240   -5.2660
62      86.5830  279.7210   3.2820
63      88.5530  285.3730  12.0410
64      90.2810  290.7940  20.9850
65      91.8080  295.9990  30.0910
66      93.1740  301.0000  39.3410
67      94.4200  305.8110  48.7210];
68
69 CO=[29.1400  197.6610 -110.5410
70      29.1440  197.8410 -110.4870
71      29.3420  206.2500 -107.5640
72      29.7940  212.8410 -104.6090
73      30.4440  218.3280 -101.5990
74      31.1710  223.0750  -98.5180
75      31.8980  227.2850  -95.3640
76      32.5780  231.0820  -92.1400
77      33.1830  234.5470  -88.8510
78      33.7100  237.7350  -85.5060
79      34.1720  240.6880  -82.1110
80      34.5730  243.4400  -78.6740
81      34.9190  246.0150  -75.1990
82      35.2200  248.4340  -71.6910
83      35.4810  250.7160  -68.1560
84      35.7100  252.8740  -64.5960
85      35.9120  254.9210  -61.0150
86      36.0900  256.8680  -57.4150
87      36.2490  258.7230  -53.7970];
88
89 CO2=[37.1320  213.7700 -393.5050
90      37.2170  214.0000 -393.4360
91      41.3260  225.2910 -389.5010
92      44.6250  234.8800 -385.1980
93      47.3230  243.2620 -380.5960
```

```
94      49.5630  250.7310 -375.7490
95      51.4340  257.4750 -370.6960
96      52.9990  263.6260 -365.4720
97      54.3080  269.2800 -360.1050
98      55.4120  274.5090 -354.6170
99      56.3420  279.3710 -349.0280
100     57.1300  283.9130 -343.3540
101     57.8030  288.1720 -337.6060
102     58.3810  292.1800 -331.7960
103     58.8830  295.9650 -325.9320
104     59.3210  299.5480 -320.0220
105     59.7050  302.9500 -314.0700
106     60.0460  306.1870 -308.0820
107     60.3490  309.2750 -302.0620];
108
109     H2=[ 28.8360  130.6800      0
110         28.8490  130.8580   0.0530
111         29.1820  139.2160   2.9590
112         29.2600  145.7370   5.8820
113         29.3260  151.0770   8.8110
114         29.4420  155.6060  11.7490
115         29.6250  159.5490  14.7020
116         29.8800  163.0520  17.6760
117         30.2050  166.2160  20.6800
118         30.5790  169.1120  23.7190
119         30.9920  171.7900  26.7970
120         31.4240  174.2880  29.9180
121         31.8630  176.6330  33.0820
122         32.2980  178.8460  36.2900
123         32.7250  180.9440  39.5410
124         33.1380  182.9410  42.8350
125         33.5360  184.8460  46.1680
126         33.9160  186.6700  49.5410
127         34.2790  188.4190  52.9510];
128
129     N2=[ 29.1230  191.6090      0
130         29.1250  191.7890   0.0540
131         29.2460  200.1810   2.9710
132         29.5830  206.7390   5.9110
133         30.1130  212.1770   8.8940
134         30.7520  216.8660  11.9370
135         31.4300  221.0170  15.0460
136         32.0940  224.7570  18.2220
137         32.6960  228.1710  21.4630
138         33.2400  231.3130  24.7600
139         33.7230  234.2260  28.1090
140         34.1480  236.9430  31.5030
141         34.5190  239.4870  34.9360
142         34.8440  241.8800  38.4050
143         35.1280  244.1380  41.9040
```

```

144     35.3780  246.2760  45.4290
145     35.5980  248.3040  48.9780
146     35.7940  250.2340  52.5480
147     35.9690  252.0750  56.1370];
148
149 %Tabela termodinamica da mistura de gases
150
151 T_mixh=FM_CH4*CH4+FM_CO*CO+FM_CO2*CO2+FM_H2*H2+FM_N2*N2;
152
153 T_mix=[T_mixh(:,1) T_mixh(:,2) 1000*T_mixh(:,3)];
154
155 cp_mix=T_mix(:,1);
156
157
158
159 % Dados de "cp_mix vs. VT":
160 %     X = VT:
161 %     Y = cp_mix:
162
163
164 % --- Criando o ajuste "cp_fit"
165 ok_ = isfinite(VT) & isfinite(cp_mix);
166 if ~all( ok_ )
167     warning( 'GenerateMFile:IgnoringNansAndInfs', ...
168             'Ignoring NaNs and Infs in data' );
169 end
170 ft_ = fittype({'1/(T^2)', 'T^3', 'T^2', 'T', '1'},...
171             'dependent',{'cp'},'independent',{'T'},...
172             'coefficients',{'c5', 'c4', 'c3', 'c2', 'c1'});
173
174 % Ajuste este modelo usando novos dados
175 cf_ = fit(VT(ok_),cp_mix(ok_),ft_);
176
177 COF=coeffvalues(cf_);
178
179 a5=COF(Beenackers et al.)/R;
180 a4=COF(2)/R;
181 a3=COF(3)/R;
182 a2=COF(4)/R;
183 a1=COF(5)/R;
184
185 To=VT(Beenackers et al.);
186 ho=T_mix(1,3);
187 so=T_mix(1,2);
188
189 a6=(ho/R)-(a1*To+(a2/2)*(To^2)+(a3/3)*(To^3)+(a4/4)*(To^4)-
190 a5*(1/To));
191
192

```

```

193 a7=(so/R)-(a1*log(To)+a2*To+(a3/2)*(To^2)+(a4/3)*(To^3)-
194 (a5/2)*(1/(To^2)));
195
196 Afuel=[a1,a2,a3,a4,a5,a6,a7];
197
198
199
200 % Cálculo dos subscritos
201 %C-->alpha   H-->beta,   O-->gamma   N-->delta
202
203 % Balanço de carbono
204 alpha=FM_CH4*(Beenackers et al.)+FM_CO*(Beenackers et
205 al.)+FM_CO2*(Beenackers et al.)+FM_H2*(Beenackers et
206 al.)+FM_N2*(Beenackers et al.);
207
208
209 % Balanço de hidrogênio
210 beta=FM_CH4*(4)+FM_CO*(Beenackers et al.)+FM_CO2*(Beenackers
211 et al.)+FM_H2*(2)+FM_N2*(Beenackers et al.);
212
213 % Balanço de oxigênio
214 gamma=FM_CH4*(Beenackers et al.)+FM_CO*(Beenackers et
215 al.)+FM_CO2*(2)+FM_H2*(Beenackers et al.)+FM_N2*(Beenackers et
216 al.);
217
218 % Balanço de nitrogênio
219 delta=FM_CH4*(Beenackers et al.)+FM_CO*(Beenackers et
220 al.)+FM_CO2*(Beenackers et al.)+FM_H2*(Beenackers et
221 al.)+FM_N2*(2);
222
223
224 %=====
225 =====
226 %=====
227 =====
228 %                               Outros combustíveis
229 %=====
230 =====
231 %=====
232 =====
233
234 case 'gasoline' % Ferguson
235 alpha=7; beta=17; gamma=0; delta=0;
236 Afuel=[4.0652 6.0977E-02 -1.8801E-05 0 0 -3.5880E+04 15.45];
237 case 'diesel' % Ferguson
238 alpha=14.4; beta=24.9; gamma=0; delta=0;
239 Afuel=[7.9710 1.1954E-01 -3.6858E-05 0 0 -1.9385E+04 -1.7879];
240 case 'methane' % Ferguson
241 alpha=1; beta=4; gamma=0; delta=0;

```



```
242 Afuel=[1.971324 7.871586E-03 -1.048592E-06 0 0 -9.930422E+03
243 8.873728];
244 case 'methanol' % Ferguson
245 alpha=1; beta=4; gamma=1; delta=0;
246 Afuel=[1.779819 1.262503E-02 -3.624890E-06 0 0 -2.525420E+04
247 1.50884E+01];
248 case 'nitromethane' % Ferguson
249 alpha=1; beta=3; gamma=2; delta=1;
250 Afuel=[1.412633 2.087101E-02 -8.142134E-06 0 0 -1.026351E+04
251 1.917126E+01];
252 case 'benzene' % Ferguson
253 alpha=6; beta=6; gamma=0; delta=0;
254 Afuel=[-2.545087 4.79554E-02 -2.030765E-05 0 0 8.782234E+03
255 3.348825E+01];
256 case 'toluene' % Raine
257 alpha=7; beta=8; gamma=0; delta=0;
258 Afuel=[-2.09053 5.654331e-2 -2.350992e-5 0 0 4331.441411
259 34.55418257];
260 case 'isooctane' % Raine
261 alpha=8; beta=18; gamma=0; delta=0;
262 Afuel=[6.678E-1 8.398E-2 -3.334E-5 0 0 -3.058E+4 2.351E+1];
263 case 'methane_h' % Heywood
264 alpha=1; beta=4; gamma=0; delta=0;
265 Afuel=[-0.29149 26.327 -10.610 1.5656 0.16573 -18.331
266 19.9887/SVal].*SVec;
267 case 'propane' % Heywood
268 alpha=3; beta=8; gamma=0; delta=0;
269 Afuel=[-1.4867 74.339 -39.065 8.0543 0.01219 -27.313
270 26.4796/SVal].*SVec;
271 case 'hexane' % Heywood
272 alpha=6; beta=14; gamma=0; delta=0;
273 Afuel=[-20.777 210.48 -164.125 52.832 0.56635 -39.836
274 79.5542/SVal].*SVec;
275 case 'isooctane_h' % Heywood
276 alpha=8; beta=18; gamma=0; delta=0;
277 Afuel=[-0.55313 181.62 -97.787 20.402 -0.03095 -60.751
278 27.2162/SVal].*SVec;
279 case 'methanol_h' % Heywood
280 alpha=1; beta=4; gamma=1; delta=0;
281 Afuel=[-2.7059 44.168 -27.501 7.2193 0.20299 -48.288
282 31.1406/SVal].*SVec;
283 case 'ethanol' % Heywood
284 alpha=2; beta=6; gamma=1; delta=0;
285 Afuel=[6.990 39.741 -11.926 0 0 -60.214 8.01623/SVal].*SVec;
286 case 'gasoline_h1' % Heywood
287 alpha=8.26; beta=15.5; gamma=0; delta=0;
288 Afuel=[-24.078 256.63 -201.68 64.750 0.5808 -27.562
289 NaN].*SVec;
290 case 'gasoline_h2' % Heywood
291 alpha=7.76; beta=13.1; gamma=0; delta=0;
```

```
292 Afuel=[-22.501 227.99 -177.26 56.048 0.4845 -17.578
293 NaN].*SVec;
294 case 'diesel_h' % Heywood
295 alpha=10.8; beta=18.7; gamma=0; delta=0;
296 Afuel=[-9.1063 246.97 -143.74 32.329 0.0518 -50.128
297 NaN].*SVec;
298 end
```

B.8 plotresults.m

```

1  % plotresults.m
2  %
3  % Programa que gráfica as saídas de  ahrind.m
4  % with output listed in:
5  % resultados de ahrind.mat
6
7  % Ajustando alguns parâmetros das figuras
8  NLW=1; % largura da linha
9  NFS=14; % tamanho da fonte
10 NMS=1; % tamanho do marcador
11 close all;
12
13 figure(Beenackers et al.); % Pressão
14 plot(thetacomp*180/pi,pTuWQlHl(:,1)/1e6); hold on;
15 plot(thetacomb*180/pi,pTbTuWQlHl(:,1)/1e6);
16 plot(thetaexp*180/pi,pTbWQlHl(:,1)/1e6);
17 axis([-180 180 0 7]);
18 set(gca,'FontSize',NFS)
19 set(gca,'LineWidth',NLW)
20 set(gca,'XTick',[-180 -90 0 90 180]);
21 set(gca,'XTickLabel',[-180 -90 0 90 180]);
22 xlabel('Ângulo da Manivela [ ° ]')
23 ylabel('Pressão [MPa]')
24 print -deps p_ahr.eps
25
26 figure(2); %temperatura
27 plot(thetacomp*180/pi,pTuWQlHl(:,2)); hold on;
28 plot(thetacomb*180/pi,pTbTuWQlHl(:,3));
29 plot(thetacomb*180/pi,pTbTuWQlHl(:,2));
30 plot(thetaexp*180/pi,pTbWQlHl(:,2));
31 axis([-180 180 0 3000]);
32 set(gca,'FontSize',NFS)
33 set(gca,'LineWidth',NLW)
34 set(gca,'XTick',[-180 -90 0 90 180]);
35 set(gca,'XTickLabel',[-180 -90 0 90 180]);
36 xlabel('Ângulo da manivela [ ° ]')
37 ylabel('Temperatura [K]')
38 legend('Queimados','Não Queimados',2);
39 print -deps T_ahr.eps
40
41 figure(3);
42 nn=4; % trabalho
43 plot(thetacomp*180/pi,pTuWQlHl(:,nn-1)); hold on;

```

```

44 plot(thetacomb*180/pi,pTbTuWQlHl(:,nn));
45 plot(thetaexp*180/pi,pTbWQlHl(:,nn-1));
46 axis([-180 180 -300 600]);
47 set(gca,'FontSize',NFS)
48 set(gca,'LineWidth',NLW)
49 set(gca,'XTick',[-180 -90 0 90 180]);
50 set(gca,'XTickLabel',[-180 -90 0 90 180]);
51 set(gca,'YTick',[-300 -150 0 150 300 450 600]);
52 set(gca,'YTickLabel',[-300 -150 0 150 300 450 600]);
53 xlabel('Ângulo da Manivela [ ° ]')
54 ylabel('Trabalho [J]')
55 print -deps W_ahr.eps
56
57 figure(4);
58 nn=5; % Transferência de calor
59 plot(thetacomp*180/pi,pTuWQlHl(:,nn-1)); hold on;
60 plot(thetacomb*180/pi,pTbTuWQlHl(:,nn));
61 plot(thetaexp*180/pi,pTbWQlHl(:,nn-1));
62 axis([-180 180 -50 300]);
63 set(gca,'FontSize',NFS)
64 set(gca,'LineWidth',NLW)
65 set(gca,'XTick',[-180 -90 0 90 180]);
66 set(gca,'XTickLabel',[-180 -90 0 90 180]);
67 xlabel('Ângulo da Manivela [ ° ]')
68 ylabel('Transferência de Calor [J]')
69 print -deps Ql_ahr.eps
70
71 figure(5);
72 nn=6; % calor perdido
73 plot(thetacomp*180/pi,pTuWQlHl(:,nn-1)); hold on;
74 plot(thetacomb*180/pi,pTbTuWQlHl(:,nn));
75 plot(thetaexp*180/pi,pTbWQlHl(:,nn-1));
76 axis([-180 180 -8 0]);
77 set(gca,'FontSize',NFS)
78 set(gca,'LineWidth',NLW)
79 set(gca,'XTick',[-180 -90 0 90 180]);
80 set(gca,'XTickLabel',[-180 -90 0 90 180]);
81 xlabel('Ângulo da Manivela [ ° ]')
82 ylabel('Calor Perdido [J]')
83 print -deps Hl_ahr.eps
84
85 figure(Beenackers et al.);
86 doflamearrivalplot=0;
87 thetaflame=-5*pi/180;
88 lengththeta=length(thetacomb);
89 plot(thetacomp*180/pi,qcomp); hold on;
90 if doflamearrivalplot==1,
91 nflameb=min(find(thetacomb>thetaflame));
92 nflameu=nflameb-1;
93 plot(thetacomb(nflameu:nflameb)*180/pi, ...

```

```
94 [qcombu(nflameu) qcombb(nflameb)];
95 else
96 nflameb=1;
97 nflameu=length(thetacomb);
98 end
99 Nunburned=1:nflameu;
100 Nburned=nflameb:lengththeta;
101 plot(thetacomb(Nunburned)*180/pi,qcombu(Nunburned));
102 plot(thetacomb(Nburned)*180/pi,qcombb(Nburned));
103 plot(thetaexp*180/pi,qexp);
104 axis([-180 180 -0.2e6 1.2e6]);
105 set(gca,'FontSize',NFS)
106 set(gca,'LineWidth',NLW)
107 set(gca,'XTick',[-180 -90 0 90 180]);
108 set(gca,'XTickLabel',[-180 -90 0 90 180]);
109 xlabel('Ângulo da Manivela [ ° ]')
110 ylabel('Fluxo de Calor (W/m^2)')
111 print -deps qflux_ahr.eps
112
```

B.9 RatesComb.m

```

1  function yprime=RatesComb(theta,y,flag);
2  %
3  % yprime=RatesComb(theta,y,flag)
4  %
5  % Function that returns the drivatives of the following 6
6  variables
7  % w.r.t. crank angle (theta) for the combustion phase:
8  % 1) pressure; 2) unburned temperature; 3) burned temperature;
9  % 4) work; 5) heat transfer; and 6) heat leakage.
10 % Baseado em: Ferguson, C.R., 1986, "Internal Combustion
11 Engines", Wiley.
12
13 global b stroke eps r Cblowby f fueltype airscheme phi ...
14 thetas thetab RPM omega ...
15 heattransferlaw hcu hcb ...
16 p1 T1 V1 Tw thetal Vtdc Vbdc mass1
17 p=y(Beenackers et al.);
18 Tb=y(2);
19 Tu=y(3);
20 yprime=zeros(6,1);
21 % Massa no cilindro de acordo com a constante de blowby:
22 mass=mass1*exp(-Cblowby*(theta-thetal)/omega);
23 % Volume do cilindro:
24 V=Vtdc*(1+(r-1)/2*(1-cos(theta)+ ...
25 1/eps*(1-(1-eps^2*sin(theta).^2).^0.5));
26 % Derivada do volume:
27 dVdtheta=Vtdc*(r-1)/2*(sin(theta)+ ...
28 eps/2*sin(2*theta)./sqrt(1-eps^2*sin(theta).^2));
29 % Fração mássica de queimados e derivadas
30 x=0.5*(1-cos(pi*(theta-thetas)/thetab));
31 dxdtheta=pi/2/thetab*sin(pi*(theta-thetas)/thetab);
32 if x<0.0001, x=0.0001; end;
33 if x>0.9999, x=0.9999; end;
34 switch heattransferlaw
35 case 'constant'
36 hcoeffu=hcu;
37 hcoeffb=hcb;
38 case 'Woschni'
39 upmean=omega*stroke/pi; % Velocidade media do pistão
40 C1=2.28;
41 C2=3.24e-3;
42 Vs=Vbdc-Vtdc;
43 k=1.3;

```

```

44 pm=p1*(V1/V)^k; % pressão
45 hcoeffu=hcu*130*b^(-0.2)*Tu^(-0.53)*(p/100e3)^(0.8)* ...
46 (C1*upmean+C2*Vs*T1/p1/V1*(p-pm))^(0.8);
47 hcoeffb=hcb*130*b^(-0.2)*Tb^(-0.53)*(p/100e3)^(0.8)* ...
48 (C1*upmean+C2*Vs*T1/p1/V1*(p-pm))^(0.8);
49 end
50
51 A=1/mass*(dVdtheta+V*Cblowby/omega);
52 Qconvu=hcoeffu*(pi*b^2/2+4*V/b)*(1-sqrt(x))*(Tu-Tw);
53 Qconvb=hcoeffb*(pi*b^2/2+4*V/b)*sqrt(x)*(Tb-Tw);
54 Const1=1/omega/mass;
55 [hu,uu,vu,s,Y,cpu,dlvlTu,dlvlpu]= ...
56 farg(p,Tu,phi,f,fueltype,airscheme);
57 [hb,ub,vb,s,Y,cpb,dlvlTb,dlvlpb]= ...
58 ecp(p,Tb,phi,fueltype,airscheme);
59 B=Const1*(vb/cpb*dlvlTb*Qconvb/Tb+ ...
60 vu/cpu*dlvlTu*Qconvu/Tu);
61 C=-(vb-vu)*dxdtheta-vb*dlvlTb*(hu-hb)/cpb/Tb*(dxdtheta- ...
62 (x-x^2)*Cblowby/omega);
63 D=x*(vb^2/cpb/Tb*dlvlTb^2+vb/p*dlvlpb);
64 E=(1-x)*(vu^2/cpu/Tu*dlvlTu^2+vu/p*dlvlpu);
65
66
67 yprime(Beenackers et al.)=(A+B+C)/(D+E);
68 yprime(2)=-Const1/cpb/x*Qconvb+vb/cpb*dlvlTb*yprime(Beenackers
69 et al.)+ ...
70 (hu-hb)/cpb*(dxdtheta/x-(1-x)*Cblowby/omega);
71 yprime(3)=-Const1/cpu/(1-
72 x)*Qconvu+vu/cpu*dlvlTu*yprime(Beenackers et al.);
73 yprime(4)=p*dVdtheta;
74 yprime(5)=Const1*mass*(Qconvb+Qconvu);
75 yprime(Beenackers et al.)=Cblowby*mass/omega*((1-
76 x^2)*hu+x^2*hb);
77

```

B.10 RatesComp.m

```

1  function yprime=RatesComp(theta,y,flag);
2  %
3  % yprime=RatesComp(theta,y,flag)
4  %
5  % Função de retorna as derivadas das seguintes 5 variáveis
6  contra o
7  % ângulo da manivela na fase de compressão :
8  % 1) Pressão; 2) Temperatura da mistura de não queimados;
9  % 3) trabalho; 4) Transferência de calor ; e 5) calor perdido.
10 % Baseado em: Ferguson, C.R., 1986, "Internal Combustion
11 Engines", Wiley.
12 global b stroke eps r Cblowby f fueltype airscheme phi ...
13 thetas thetab omega ...
14 heattransferlaw hcu ...
15 Tw theta1 Vtdc mass1 ...
16
17 p=y(Beenackers et al.);
18 Tu=y(2);
19 yprime=zeros(5,1);
20 % Massa no cilindro de acordo com a constante de blowby:
21 mass=mass1*exp(-Cblowby*(theta-theta1)/omega);
22 % Volume do cilindro:
23 V=Vtdc*(1+(r-1)/2*(1-cos(theta)+ ...
24 1/eps*(1-(1-eps^2*sin(theta).^2).^0.5));
25 % Derivada do volume:
26 dVdtheta=Vtdc*(r-1)/2*(sin(theta)+ ...
27 eps/2*sin(2*theta)./sqrt(1-eps^2*sin(theta).^2));
28 switch heattransferlaw
29 case 'constant'
30 hcoeff=hcu;
31 case 'Woschni'
32 upmean=omega*stroke/pi; % Velocidade media do pistão
33 C1=2.28;
34 hcoeff=hcu*130*b^(-0.2)*Tu^(-0.53)*(p/100e3)^(0.8)*C1*upmean;
35 end
36 A=1/mass*(dVdtheta+V*Cblowby/omega);
37 Qconv=hcoeff*(pi*b^2/2+4*V/b)*(Tu-Tw);
38 Const1=1/omega/mass;
39 [h,u,v,s,Y,cp,dlv1T,dlv1p]=farg(p,Tu,phi,f,fueltype,airscheme)
40 ;
41 B=Const1*v/cp*dlv1T*Qconv/Tu;
42 C=0;
43 D=0;

```



```
44 E=v^2/cp/Tu*dvlvT^2+v/p*dvlvp;  
45 yprime(Beenackers et al.)=(A+B+C)/(D+E);  
46 yprime(2)=-Const1/cp*Qconv+v/cp*dvlvT*yprime(Beenackers et  
47 al.);  
48 yprime(3)=p*dVdtheta;  
49 yprime(4)=Qconv/omega;  
50 yprime(5)=Cblowby*mass/omega*h;  
51  
52  
53
```

B.11 RatesExp.m

```

1  function yprime=RatesExp(theta,y,flag);
2  %
3  % yprime=RatesExp(theta,y,flag)
4  %
5  % Função de retorna as derivadas das seguintes 5 variáveis
6  contra
7  % o ângulo da manivela na fase de expansão:
8  % 1) Pressão; 2) Temperatura da mistura de não queimados;
9  % 3) Trabalho; 4) Transferência de calor ; e 5) fugas de
10 calor.
11 % Baseado em: Ferguson, C.R., 1986, "Internal Combustion
12 Engines", Wiley.
13
14 global b stroke eps r Cblowby f fueltype airscheme phi ...
15 thetas thetab RPM omega ...
16 heattransferlaw hcb ...
17 p1 T1 V1 Tw thetal Vtdc Vbdc mass1
18 p=y(Beenackers et al.);
19 Tb=y(2);
20 yprime=zeros(5,1);
21 % Massa no cilindro de acordo com a constante de blowby:
22 mass=mass1*exp(-Cblowby*(theta-thetal)/omega);
23 % Volume do cilindro:
24 V=Vtdc*(1+(r-1)/2*(1-cos(theta)+ ...
25     1/eps*(1-(1-eps^2*sin(theta).^2).^0.5)));
26 % Derivada do volume:
27 dVdtheta=Vtdc*(r-1)/2*(sin(theta)+ ...
28 eps/2*sin(2*theta)./sqrt(1-eps^2*sin(theta).^2));
29 switch heattransferlaw
30 case 'constant'
31 hcoeff=hcb;
32 case 'Woschni'
33 upmean=omega*stroke/pi; % Velocidade media do pistão
34 C1=2.28;
35 C2=3.24e-3;
36 Vs=Vbdc-Vtdc;
37 k=1.3;
38 pm=p1*(V1/V)^k; % pressão
39 hcoeff=hcb*130*b^(-0.2)*Tb^(-0.53)*(p/100e3)^(0.8)* ...
40 (C1*upmean+C2*Vs*T1/p1/V1*(p-pm))^(0.8);
41 end
42 A=1/mass*(dVdtheta+V*Cblowby/omega);
43 Qconv=hcoeff*(pi*b^2/2+4*V/b)*(Tb-Tw);

```

```
44 Const1=1/omega/mass;
45 if Tb<1000
46 [h,u,v,s,Y,cp,dvlT,dvlp]=farg(p,Tb,phi,1,fueltype,airscheme)
47 ;
48 else
49 [h,u,v,s,Y,cp,dvlT,dvlp]=ecp(p,Tb,phi,fueltype,airscheme);
50 end
51 B=Const1*v/cp*dvlT*Qconv/Tb;
52 C=0;
53 D=v^2/cp/Tb*dvlT^2+v/p*dvlp;
54 E=0;
55 yprime(Beenackers et al.)=(A+B+C)/(D+E);
56 yprime(2)=-Const1/cp*Qconv+v/cp*dvlT*yprime(Beenackers et
57 al.);
58 yprime(3)=p*dVdtheta;
59 yprime(4)=Qconv/omega;
60 yprime(5)=Cblowby*mass/omega*h;
```

B.12 Tadiabatic.m

```

1  function Tb=Tadiabatic(p,Tu,phi,f,fueltype,airscheme);
2  %
3  % Tb=Tadiabatic(p,Tu,phi,f,fueltype,airscheme)
4  %
5  % Rotina para calcular a temperatura adiabática de chama .
6  % O método consiste da seleção iterativa da temperatura de
7  chama até que
8  % a entalpia dos produtos da combustão (em equilíbrio) se
9  ajuste a
10 % temperatura inicial da mistura de gases.
11 % farg.m É usado para determinar a entalpia da mistura de não
12 queimados,
13 % and ecp.m É usado para determinar a entalpia do gás queimado
14 .
15 %
16 *****
17 *****
18 % input:
19 % p - Pressão (Pa)
20 % Tu - Temperatura da mistura de não queimados (K)
21 % phi - Relação equivalente
22 % f - Fração mássica residual; Ajusta f=0 se não tem produtos
23 da combustão
24 % presentes e f=1 se só tem produtos da combustão
25 % fueltype - 'gasoline', 'diesel', etc - ver fueldata.m Para a
26 lista
27 % completa
28 % airscheme - 'GMcB' (Gordon and McBride) ou 'Chemkin'
29 % saida:
30 % Tb - temperatura dos gases queimados (K) - temperatura
31 adiabática de chama
32 %
33 *****
34 *****
35 MaxIter=50;
36 Tol=0.00001; % 0.001% Erro permissível no cálculo da
37 temperatura
38 Tb=2000; % Estimada inicial
39 DeltaT=2*Tol*Tb;
40 Iter=0;
41 [hu,u,v,s,Y,cp,dlv1T,dlv1p]=farg(p,Tu,phi,f,fueltype,airscheme
42 );
43 while (Iter<MaxIter)&(abs(DeltaT/Tb)>Tol)

```

```
44  Iter=Iter+1;
45  [hb,u,v,s,Y,cp,dlv1T,dlv1p]=ecp(p,Tb,phi,fueltype,airscheme);
46  DeltaT=(hu-hb)/cp;
47  Tb=Tb+DeltaT;
48  end
49  if Iter>=MaxIter
50  warning('Falho a convergência no loop da temperatura
51  adiabática de chama ');
52  end
53
54
55
56
```

Anexo A

Tabelas Termodinâmicas

A.1 ÁGUA

T [K]	C _p [J/K mol]	S [J/K mol]	-(G - H ₂₉₈)/T [J/K mol]	H [kJ/mol]	H-H ₂₉₈ [kJ/mol]	ΔG [kJ/mol]	ΔH _f [kJ/mol]	ΔG [kJ/mol]	log kf [-]
298,15	33,590	188,959	188,959	-241,826	0,000	-298,164	-241,826	-228,620	40,053
300	33,596	189,167	188,960	-241,764	0,062	-298,514	-241,844	-228,538	39,792
400	34,261	198,910	190,284	-238,375	3,451	-317,939	-242,847	-223,951	29,245
500	35,230	206,656	192,809	-234,902	6,924	-338,230	-243,826	-219,113	22,891
600	36,322	213,174	195,673	-231,326	10,500	-359,230	-244,758	-214,081	18,637
700	37,494	218,860	198,588	-227,635	14,191	-380,838	-245,633	-208,898	15,588
800	38,723	223,947	201,445	-223,825	18,001	-402,982	-246,444	-203,595	13,293
900	39,988	228,580	204,207	-219,889	21,937	-425,612	-247,186	-198,193	11,503
1000	41,267	232,860	206,861	-215,827	25,999	-448,687	-247,858	-192,713	10,066
1100	42,535	236,853	209,408	-211,636	30,190	-472,174	-248,461	-187,168	8,888
1200	43,769	240,607	211,853	-207,321	34,505	-496,049	-248,998	-181,572	7,904
1300	44,943	244,157	214,202	-202,885	38,941	-520,289	-249,475	-175,934	7,069
1400	46,055	247,529	216,463	-198,334	43,492	-544,875	-249,895	-170,260	6,352
1500	47,091	250,742	218,642	-193,676	48,150	-569,789	-250,266	-164,559	5,730
1600	48,050	253,812	220,745	-188,919	52,907	-595,018	-250,593	-158,834	5,185
1700	48,934	256,752	222,777	-184,069	57,757	-620,548	-250,882	-153,090	4,704
1800	49,747	259,572	224,744	-179,134	62,692	-646,365	-251,139	-147,330	4,275
1900	50,496	262,282	226,649	-174,122	67,704	-672,458	-251,369	-141,557	3,892
2000	51,185	264,890	228,496	-169,037	72,789	-698,818	-251,576	-135,772	3,546
2100	51,821	267,403	230,289	-163,886	77,940	-725,433	-251,763	-129,977	3,233
2200	52,407	269,828	232,032	-158,675	83,151	-752,296	-251,935	-124,173	2,948
2300	52,947	272,169	233,726	-153,407	88,419	-779,396	-252,093	-118,363	2,688
2400	53,445	274,433	235,375	-148,087	93,739	-806,727	-252,241	-112,545	2,449
2500	53,904	276,625	236,982	-142,719	99,107	-834,280	-252,381	-106,721	2,230
2600	54,329	278,747	238,547	-137,307	104,519	-862,049	-252,515	-100,892	2,027
2700	54,722	280,805	240,075	-131,854	109,972	-890,028	-252,644	-95,058	1,839
2800	55,088	282,802	241,565	-126,363	115,463	-918,208	-252,772	-89,219	1,664
2900	55,429	284,741	243,021	-120,837	120,989	-946,586	-252,898	-83,376	1,502
3000	55,747	286,625	244,443	-115,278	126,548	-975,155	-253,025	-77,528	1,350
3100	56,044	288,458	245,833	-109,689	132,137	-1003,909	-253,153	-71,676	1,208
3200	56,323	290,242	247,193	-104,070	137,756	-1032,845	-253,284	-65,820	1,074
3300	56,584	291,979	248,524	-98,425	143,401	-1061,956	-253,417	-59,960	0,949
3400	56,830	293,672	249,827	-92,754	149,072	-1091,239	-253,555	-54,095	0,831
3500	57,060	295,323	251,104	-87,059	154,767	-1120,689	-253,697	-48,227	0,720
3600	57,278	296,933	252,355	-81,342	160,484	-1150,302	-253,844	-42,354	0,615
3700	57,483	298,506	253,581	-75,604	166,222	-1180,075	-253,998	-36,477	0,515
3800	57,676	300,041	254,783	-69,846	171,980	-1210,002	-254,158	-30,596	0,421
3900	57,859	301,542	255,963	-64,069	177,757	-1240,082	-254,325	-24,711	0,331
4000	58,033	303,009	257,121	-58,275	183,551	-1270,309	-254,501	-18,821	0,246

Fonte: (Barin e Platzki, 1995).

A.2 DIÓXIDO DE CARBONO

T	C _p	S	-(G - H ₂₉₈)/T	H	H-H ₂₉₈	ΔG	ΔH _f	ΔG	log kf
[K]	[J/K mol]	[J/K mol]	[J/K mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[-]
298,15	37,132	213,770	213,770	-393,505	0,000	-457,240	-393,505	-394,364	69,091
300	37,217	214,000	213,770	-393,436	0,069	-457,636	-393,506	-394,370	68,666
400	41,326	225,291	215,282	-389,501	4,004	-479,618	-393,580	-394,646	51,535
500	44,625	234,880	218,266	-385,198	8,307	-502,638	-393,666	-394,903	41,255
600	47,323	243,262	221,748	-380,596	12,909	-526,554	-393,805	-395,139	34,400
700	49,563	250,731	225,364	-375,749	17,756	-551,260	-393,990	-395,347	29,501
800	51,434	257,475	228,963	-370,696	22,809	-576,676	-394,198	-395,527	25,825
900	52,999	263,626	232,478	-365,472	28,033	-602,735	-394,412	-395,680	22,965
1000	54,308	269,280	235,879	-360,105	33,400	-629,384	-394,626	-395,810	20,675
1100	55,412	274,509	239,156	-354,617	38,888	-656,577	-394,837	-395,918	18,801
1200	56,342	279,371	242,307	-349,028	44,477	-684,274	-395,042	-396,007	17,238
1300	57,130	283,913	245,335	-343,354	50,151	-712,441	-395,242	-396,079	15,915
1400	57,803	288,172	248,244	-337,606	55,899	-741,047	-395,437	-396,136	14,780
1500	58,381	292,180	251,041	-331,796	61,709	-770,067	-395,628	-396,179	13,796
1600	58,883	295,965	253,732	-325,932	67,573	-799,476	-395,815	-396,210	12,935
1700	59,321	299,548	256,322	-320,022	73,483	-829,253	-396,000	-396,229	12,175
1800	59,705	302,950	258,819	-314,070	79,435	-859,379	-396,185	-396,237	11,499
1900	60,046	306,187	261,228	-308,082	85,423	-889,837	-396,371	-396,235	10,893
2000	60,349	309,275	263,553	-302,062	91,443	-920,612	-396,561	-396,223	10,348
2100	60,620	312,226	265,801	-296,013	97,492	-951,688	-396,757	-396,201	9,855
2200	60,864	315,052	267,976	-289,939	103,566	-983,053	-396,961	-396,170	9,406
2300	61,086	317,762	270,082	-283,841	109,664	-1014,694	-397,173	-396,129	8,996
2400	61,288	320,366	272,124	-277,722	115,783	-1046,602	-397,394	-396,079	8,620
2500	61,473	322,872	274,104	-271,584	121,921	-1078,764	-397,627	-396,020	8,274
2600	61,644	325,286	276,026	-265,428	128,077	-1111,173	-397,870	-395,951	7,955
2700	61,804	327,616	277,894	-259,256	134,249	-1143,819	-398,126	-395,872	7,659
2800	61,953	329,866	279,710	-253,068	140,437	-1176,694	-398,393	-395,784	7,383
2900	62,094	332,043	281,477	-246,865	146,640	-1209,790	-398,673	-395,686	7,127
3000	62,228	334,150	283,198	-240,649	152,856	-1243,100	-398,965	-395,578	6,888

Fonte: (Barin e Platzki, 1995).

A.3 HIDROGÊNIO

T	C _p	S	-(G - H ₂₉₈)/T	H	H-H ₂₉₈	ΔG	ΔH _f	ΔG	log kf
[K]	[J/K mol]	[J/K mol]	[J/K mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[-]
298,15	28,836	130,680	130,680	0,000	0,000	-38,962	0,000	0,000	0,000
300	28,849	130,858	130,681	0,053	0,053	-39,204	0,000	0,000	0,000
400	29,182	139,216	131,818	2,959	2,959	-52,727	0,000	0,000	0,000
500	29,260	145,737	133,974	5,882	5,882	-66,987	0,000	0,000	0,000
600	29,326	151,077	136,393	8,811	8,811	-81,836	0,000	0,000	0,000
700	29,442	155,606	138,822	11,749	11,749	-97,175	0,000	0,000	0,000
800	29,625	159,549	141,172	14,702	14,702	-112,937	0,000	0,000	0,000
900	29,880	63,052	143,412	17,676	17,676	-129,070	0,000	0,000	0,000
1000	30,205	66,216	145,536	20,680	20,680	-145,536	0,000	0,000	0,000
1100	30,579	69,112	147,550	23,719	23,719	-162,305	0,000	0,000	0,000
1200	30,992	71,790	149,460	26,797	26,797	-179,352	0,000	0,000	0,000
1300	31,424	74,288	151,275	29,918	29,918	-196,657	0,000	0,000	0,000
1400	31,863	76,633	153,003	33,082	33,082	-214,204	0,000	0,000	0,000
1500	32,298	78,846	154,653	36,290	36,290	-231,979	0,000	0,000	0,000
1600	32,725	80,944	156,231	39,541	39,541	-249,970	0,000	0,000	0,000
1700	33,138	182,941	157,744	42,835	42,835	-268,165	0,000	0,000	0,000
1800	33,536	184,846	159,197	46,168	46,168	-286,555	0,000	0,000	0,000
1900	33,916	186,670	160,595	49,541	49,541	-305,131	0,000	0,000	0,000
2000	34,279	188,419	161,943	52,951	52,951	-323,886	0,000	0,000	0,000
2100	34,625	190,100	163,244	56,396	56,396	-342,813	0,000	0,000	0,000
2200	34,953	191,718	164,502	59,875	59,875	-361,904	0,000	0,000	0,000
2300	35,264	193,279	165,719	63,386	63,386	-381,154	0,000	0,000	0,000
2400	35,560	194,786	166,899	66,928	66,928	-400,558	0,000	0,000	0,000
2500	35,842	196,243	168,044	70,498	70,498	-420,110	0,000	0,000	0,000
2600	36,111	197,654	169,156	74,096	74,096	-439,805	0,000	0,000	0,000
2700	36,369	199,022	170,237	77,720	77,720	-459,639	0,000	0,000	0,000
2800	36,616	200,349	171,289	81,369	81,369	-479,608	0,000	0,000	0,000
2900	36,856	201,638	172,313	85,043	85,043	-499,708	0,000	0,000	0,000
3000	37,089	202,891	173,311	88,740	88,740	-519,934	0,000	0,000	0,000
3100	37,311	204,111	174,285	92,460	92,460	-540,285	0,000	0,000	0,000
3200	37,529	205,299	175,236	96,202	96,202	-560,756	0,000	0,000	0,000
3300	37,740	206,457	176,165	99,966	99,966	-581,344	0,000	0,000	0,000
3400	37,946	207,587	177,072	103,750	103,750	-602,046	0,000	0,000	0,000
3500	38,149	208,690	177,960	107,555	107,555	-622,860	0,000	0,000	0,000
3600	38,348	209,767	178,829	111,380	111,380	-643,783	0,000	0,000	0,000
3700	38,544	210,821	179,679	115,224	115,224	-664,813	0,000	0,000	0,000
3800	38,737	211,851	180,512	119,088	119,088	-685,947	0,000	0,000	0,000
3900	38,928	212,860	181,329	122,971	122,971	-707,182	0,000	0,000	0,000
4000	39,116	213,848	182,129	126,874	126,874	-728,518	0,000	0,000	0,000

Fonte: (Barin e Platzki, 1995).

A.4 METANO

T [K]	C _p [J/K mol]	S [J/K mol]	-(G - H ₂₉₈)/T [J/K mol]	H [kJ/mol]	H-H ₂₉₈ [kJ/mol]	ΔG [kJ/mol]	ΔH _f [kJ/mol]	ΔG [kJ/mol]	log k _f [-]
298,15	35,645	186,214	186,214	-74,873	0,000	-130,393	-74,873	-50,757	8,892
300	35,707	186,434	186,214	-74,807	0,066	-130,737	-74,930	-50,607	8,811
400	40,489	197,310	187,665	-71,015	3,858	-149,939	-77,986	-42,036	5,489
500	46,349	206,968	190,574	-66,676	8,197	-170,160	-80,824	-32,714	3,418
600	52,232	215,942	194,062	-61,745	13,128	-191,310	-83,331	-22,851	1,989
700	57,798	224,417	197,798	-56,240	18,633	-213,332	-85,480	-12,596	0,940
800	62,929	232,475	201,633	-50,200	24,673	-236,180	-87,270	-2,057	0,134
900	67,591	240,160	205,491	-43,670	31,203	-259,814	-88,722	8,685	-0,504
1000	71,782	247,503	209,327	-36,698	38,175	-284,200	-89,876	19,572	-1,022
1100	75,523	254,523	213,119	-29,329	45,544	-309,304	-90,773	30,562	-1,451
1200	78,839	261,240	216,852	-21,607	53,266	-335,095	-91,454	41,624	-1,812
1300	81,764	267,668	220,515	-13,574	61,299	-361,543	-91,954	52,736	-2,119
1400	84,333	273,824	224,105	-5,266	69,607	-388,619	-92,304	63,880	-2,383
1500	86,583	279,721	227,617	3,282	78,155	-416,299	-92,531	75,044	-2,613
1600	88,553	285,373	231,052	12,041	86,914	-444,555	-92,659	86,221	-2,815
1700	90,281	290,794	234,407	20,985	95,858	-473,366	-92,706	97,402	-2,993
1800	91,808	295,999	237,686	30,091	104,964	-502,707	-92,688	108,585	-3,151
1900	93,174	301,000	240,887	39,341	114,214	-532,559	-92,617	119,765	-3,293
2000	94,420	305,811	244,014	48,721	123,594	-562,901	-92,504	130,940	-3,420

Fonte: (Barin e Platzki, 1995).

A.5 MONÓXIDO DE CARBONO

T	Cp	S	-(G - H298)/T	H	H-H298	ΔG	ΔH_f	ΔG	log kf
[K]	[J/K mol]	[J/K mol]	[J/K mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[-]
298,15	29,140	197,661	197,661	-110,541	0,000	-169,474	-110,541	-137,180	24,033
300	29,144	197,841	197,662	-110,487	0,054	-169,840	-110,530	-137,345	23,914
400	29,342	206,250	198,807	-107,564	2,977	-190,064	-110,129	-146,354	19,112
500	29,794	212,841	200,977	-104,609	5,932	-211,030	-110,035	-155,426	16,237
600	30,444	218,328	203,424	-101,599	8,942	-232,596	-110,185	-164,494	14,320
700	31,171	223,075	205,900	-98,518	12,023	-254,671	-110,510	-173,522	12,948
800	31,898	227,285	208,315	-95,364	15,177	-277,193	-110,949	-182,494	11,916
900	32,578	231,082	210,637	-92,140	18,401	-300,114	-111,460	-191,408	11,109
1000	33,183	234,547	212,857	-88,851	21,690	-323,398	-112,021	-200,261	10,461
1100	33,710	237,735	214,976	-85,506	25,035	-347,014	-112,619	-209,056	9,927
1200	34,172	240,688	216,997	-82,111	28,430	-370,937	-113,245	-217,796	9,480
1300	34,573	243,440	218,926	-78,674	31,867	-395,145	-113,890	-226,482	9,100
1400	34,919	246,015	220,770	-75,199	35,342	-419,619	-114,551	-235,118	8,772
1500	35,220	248,434	222,535	-71,691	38,850	-444,343	-115,224	-243,707	8,487
1600	35,481	250,716	224,225	-68,156	42,385	-469,302	-115,906	-252,250	8,235
1700	35,710	252,874	225,848	-64,596	45,945	-494,482	-116,596	-260,751	8,012
1800	35,912	254,921	227,407	-61,015	49,526	-519,873	-117,293	-269,210	7,812
1900	36,090	256,868	228,906	-57,415	53,126	-545,463	-117,997	-277,631	7,633
2000	36,249	258,723	230,351	-53,797	56,744	-571,243	-118,708	-286,015	7,470
2100	36,391	260,495	231,745	-50,165	60,376	-597,205	-119,429	-294,362	7,322
2200	36,519	262,191	233,090	-46,520	64,021	-623,340	-120,157	-302,675	7,186
2300	36,634	263,817	234,391	-42,862	67,679	-649,641	-120,893	-310,955	7,062
2400	36,740	265,378	235,650	-39,193	71,348	-676,101	-121,639	-319,203	6,947
2500	36,836	266,880	236,869	-35,514	75,027	-702,714	-122,393	-327,419	6,841
2600	36,924	268,326	238,052	-31,826	78,715	-729,475	-123,157	-335,605	6,742
2700	37,005	269,722	239,199	-28,130	82,411	-756,378	-123,929	-343,762	6,650
2800	37,081	271,069	240,313	-24,425	86,116	-783,418	-124,712	-351,889	6,565
2900	37,151	272,371	241,396	-20,714	89,827	-810,590	-125,503	-359,989	6,484
3000	37,216	273,632	242,450	-16,995	93,546	-837,891	-126,305	-368,061	6,409

Fonte: (Barin e Platzki, 1995).

A.6 NITROGÊNIO

T	C _p	S	-(G-H298)/T	H	H-H298	ΔG	ΔH _f	ΔG	log kf
[K]	[J/K mol]	[J/K mol]	[J/K mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[-]
298,15	29,123	191,609	191,609	0,000	0,000	-57,128	0,000	0,000	0,000
300	29,125	191,789	191,610	0,054	0,054	-57,483	0,000	0,000	0,000
400	29,246	200,181	192,753	2,971	2,971	-77,101	0,000	0,000	0,000
500	29,583	206,739	194,918	5,911	5,911	-97,459	0,000	0,000	0,000
600	30,113	212,177	197,353	8,894	8,894	-118,412	0,000	0,000	0,000
700	30,752	216,866	199,814	11,937	11,937	-139,869	0,000	0,000	0,000
800	31,430	221,017	202,209	15,046	15,046	-161,767	0,000	0,000	0,000
900	32,094	224,757	204,510	18,222	18,222	-184,059	0,000	0,000	0,000
1000	32,696	228,171	206,708	21,463	21,463	-206,708	0,000	0,000	0,000
1100	33,240	231,313	208,804	24,760	24,760	-229,684	0,000	0,000	0,000
1200	33,723	234,226	210,803	28,109	28,109	-252,963	0,000	0,000	0,000
1300	34,148	236,943	212,710	31,503	31,503	-276,523	0,000	0,000	0,000
1400	34,519	239,487	214,533	34,936	34,936	-300,346	0,000	0,000	0,000
1500	34,844	241,880	216,277	38,405	38,405	-324,416	0,000	0,000	0,000
1600	35,128	244,138	217,948	41,904	41,904	-348,718	0,000	0,000	0,000
1700	35,378	246,276	219,552	45,429	45,429	-373,239	0,000	0,000	0,000
1800	35,598	248,304	221,094	48,978	48,978	-397,969	0,000	0,000	0,000
1900	35,794	250,234	222,577	52,548	52,548	-422,897	0,000	0,000	0,000
2000	35,969	252,075	224,006	56,137	56,137	-448,013	0,000	0,000	0,000
2100	36,126	253,834	225,385	59,742	59,742	-473,309	0,000	0,000	0,000
2200	36,267	255,517	226,717	63,361	63,361	-498,777	0,000	0,000	0,000
2300	36,395	257,132	228,004	66,994	66,994	-524,410	0,000	0,000	0,000
2400	36,511	258,684	229,251	70,640	70,640	-550,201	0,000	0,000	0,000
2500	36,616	260,176	230,458	74,296	74,296	-576,145	0,000	0,000	0,000
2600	36,713	261,615	231,629	77,963	77,963	-602,235	0,000	0,000	0,000
2700	36,802	263,002	232,765	81,639	81,639	-628,466	0,000	0,000	0,000
2800	36,884	264,342	233,869	85,323	85,323	-654,834	0,000	0,000	0,000
2900	36,961	265,637	234,942	89,015	89,015	-681,333	0,000	0,000	0,000
3000	37,031	266,892	235,987	92,715	92,715	-707,960	0,000	0,000	0,000
3100	37,097	268,107	237,003	96,421	96,421	-734,710	0,000	0,000	0,000
3200	37,159	269,286	237,994	100,134	100,134	-761,580	0,000	0,000	0,000
3300	37,217	270,430	238,959	103,853	103,853	-788,566	0,000	0,000	0,000
3400	37,272	271,542	239,901	107,578	107,578	-815,665	0,000	0,000	0,000
3500	37,324	272,623	240,821	111,307	111,307	-842,873	0,000	0,000	0,000
3600	37,373	273,675	241,719	115,042	115,042	-870,189	0,000	0,000	0,000
3700	37,420	274,700	242,597	118,782	118,782	-897,608	0,000	0,000	0,000
3800	37,464	275,698	243,455	122,526	122,526	-925,128	0,000	0,000	0,000
3900	37,507	276,672	244,294	126,275	126,275	-952,746	0,000	0,000	0,000
4000	37,548	277,622	245,115	130,028	130,028	-980,461	0,000	0,000	0,000

Fonte: (Barin e Platzki, 1995).

A.7 OXIGÊNIO

T	Cp	S	-(G - H298)/T	H	H-H298	ΔG	ΔHf	ΔG	log kf
[K]	[J/K mol]	[J/K mol]	[J/K mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[kJ/mol]	[-]
298,15	29,376	205,147	205,147	0,000	0,000	-61,165	0,000	0,000	0,000
300	29,385	205,329	205,148	0,054	0,054	-61,544	0,000	0,000	0,000
400	30,106	213,871	206,307	3,025	3,025	-82,523	0,000	0,000	0,000
500	31,091	220,693	208,524	6,084	6,084	-104,262	0,000	0,000	0,000
600	32,089	226,451	211,044	9,244	9,244	-126,626	0,000	0,000	0,000
700	32,981	231,466	213,611	12,499	12,499	-149,528	0,000	0,000	0,000
800	33,734	235,921	216,126	15,836	15,836	-172,901	0,000	0,000	0,000
900	34,354	239,931	218,552	19,241	19,241	-196,697	0,000	0,000	0,000
1000	34,870	243,578	220,875	22,703	22,703	-220,875	0,000	0,000	0,000
1100	35,302	246,922	223,093	26,212	26,212	-245,402	0,000	0,000	0,000
1200	35,667	250,010	225,209	29,761	29,761	-270,251	0,000	0,000	0,000
1300	35,987	252,878	227,228	33,344	33,344	-295,397	0,000	0,000	0,000
1400	36,276	255,555	229,157	36,957	36,957	-320,820	0,000	0,000	0,000
1500	36,543	258,067	231,002	40,598	40,598	-346,503	0,000	0,000	0,000
1600	36,797	260,434	232,768	44,266	44,266	-372,429	0,000	0,000	0,000
1700	37,041	262,672	234,462	47,957	47,957	-398,585	0,000	0,000	0,000
1800	37,278	264,796	236,089	51,673	51,673	-424,959	0,000	0,000	0,000
1900	37,511	266,818	237,653	55,413	55,413	-451,541	0,000	0,000	0,000
2000	37,741	268,748	239,160	59,176	59,176	-478,320	0,000	0,000	0,000
2100	37,969	270,595	240,613	62,961	62,961	-505,288	0,000	0,000	0,000
2200	38,194	272,366	242,017	66,769	66,769	-532,436	0,000	0,000	0,000
2300	38,418	274,069	243,373	70,600	70,600	-559,759	0,000	0,000	0,000
2400	38,638	275,709	244,687	74,453	74,453	-587,248	0,000	0,000	0,000
2500	38,855	277,290	245,959	78,327	78,327	-614,898	0,000	0,000	0,000
2600	39,069	278,818	247,194	82,224	82,224	-642,704	0,000	0,000	0,000
2700	39,277	280,297	248,393	86,141	86,141	-670,660	0,000	0,000	0,000
2800	39,479	281,729	249,558	90,079	90,079	-698,762	0,000	0,000	0,000
2900	39,675	283,118	250,691	94,037	94,037	-727,005	0,000	0,000	0,000
3000	39,862	284,466	251,795	98,013	98,013	-755,384	0,000	0,000	0,000
3100	40,047	285,776	252,870	102,009	102,009	-783,897	0,000	0,000	0,000
3200	40,224	287,050	253,918	106,023	106,023	-812,538	0,000	0,000	0,000
3300	40,395	288,291	254,941	110,054	110,054	-841,306	0,000	0,000	0,000
3400	40,559	289,499	255,940	114,101	114,101	-870,195	0,000	0,000	0,000
3500	40,717	290,677	256,916	118,165	118,165	-899,204	0,000	0,000	0,000
3600	40,868	291,826	257,869	122,245	122,245	-928,330	0,000	0,000	0,000
3700	41,014	292,948	258,802	126,339	126,339	-957,569	0,000	0,000	0,000
3800	41,154	294,044	259,715	130,447	130,447	-986,919	0,000	0,000	0,000
3900	41,290	295,114	260,609	134,569	134,569	-1016,377	0,000	0,000	0,000
4000	41,421	296,161	261,485	138,705	138,705	-1045,941	0,000	0,000	0,000

Fonte: (Barin e Platzki, 1995).