



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO TECNOLÓGICO DE JOINVILLE
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA E CIÊNCIAS
MECÂNICAS
SEMESTRE 2019/2

I. IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA

Código: ECM410062

Nome: Combustão

Carga Horária: 45 horas-aula **Créditos:** 03

Professor responsável: Rafael C. Catapan, Dr. Eng.

Website: rcatapan.joinville.ufsc.br **Email:** rafael.catapan@ufsc.br

II. EMENTA

Cinética química. Equações de conservação simplificadas para escoamentos reativos. Chamas pré-misturadas em gases combustíveis. Chamas de difusão. Ignição. Emissões em combustão.

III. OBJETIVOS

Introdução à ciência da combustão. Prática de técnicas computacionais de resolução de problemas de escoamento reativo. Familiarizar o aluno com aplicações potenciais de escoamentos reativos.

IV. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

1. Introdução

- Apresentação da disciplina e plano de ensino
- Introdução à combustão
- Introdução ao Cantera

2. Fundamentos de química

- Propriedades intensivas e extensivas
- Base mássica e base molar
- Equação de estado de gases ideais
- Entalpia de formação e energias de ligação
- Equação de estado calórica e entalpia padrão
- Propriedades de misturas de gases ideais
- Estequiometria de combustão e mistura reagente
- Forma padrão de polinômios de propriedades termodinâmicas

3. Termoquímica de combustão

- Entalpia de reação e poder calorífico
- Temperatura de chama adiabática
- Constante de equilíbrio
- Equilíbrio químico de sistemas complexos

4. Cinética química em fase gasosa

- Reação global e reações elementares
- Taxa de reação e sua dependência com a temperatura
- Constante de reação: equação de Arrhenius, frequência de colisão, energia de ativação, teoria de estruturas de transição, efeito da pressão
- Mecanismos de reação: taxas de reação, taxa de progresso, taxa de consumo de uma espécie, relação entre constante de reação e equilíbrio, reações em cadeia, aproximação estado estacionário, aproximação de equilíbrio parcial

5. Cinética química catalítica

- Conceitos básicos: sítios ativos, metais catalisadores, índice de Muller, superfícies reais, densidade de sítios, partícula catalítica, poro, pellet
- Adsorção física, adsorção química, dessorção
- Reação de catálise heterogênea
- Taxa de reação, constante de reação, equação modificada de Arrhenius
- Propriedades termodinâmicas
- Interação lateral

6. Técnicas de análise de mecanismo de reação

- análise de sensibilidade
- análise da taxa de reação
- equilíbrio parcial
- Análise do componente principal
- Redução de mecanismos

7. Reatores zero-dimensionais

- Caso Especial de Redes de Reatores
- Hipóteses e Limitações
- Equações gerais: Equações de conservação da massa e da massa da espécie química, equações de espécies de superfície, equação de energia de fase gasosa, troca de calor entre reatores em clusters, balanço energético e efeitos de capacidade térmica
- Modelo do motor de combustão interna
- Opções de transferência de calor para o modelo de motor IC HCCI
- Modelo HCCI multizona

8. Reatores unidimensionais

- Hipóteses e Limitações
- Equações gerais: Equações de conservação da massa e da massa da espécie química, equações de espécies de superfície, equação de energia de fase gasosa

- Reator de fluxo pistonado (PFR)
- Reator de monólito catalítico

9. Chama laminar unidimensional

- Estrutura de uma chama laminar
- Velocidade de chama
- Teoria de Mallar e Le Châtelier
- Cálculo de velocidade de chama por equações de conservação
- Propriedades de transporte com média de mistura
- Propriedades de transporte multicomponente
- Modelo de radiação térmica a de gás e partículas para chamas
- Condições de contorno
- Comparações com técnicas de medição experimental

V. METODOLOGIA DE AVALIAÇÃO

O aluno será avaliado de acordo com seu desempenho na execução de listas propostas e em um trabalho final da disciplina. Tanto os exercícios quanto o trabalho serão resolvidos pelo aluno com o auxílio do software Cantera. O conceito do aluno seguirá o padrão estabelecido para os programas de pós graduação da UFSC.

VI. BIBLIOGRAFIA BÁSICA

URNS, S. R., Introdução à Combustão: Conceitos e Aplicações. 3ª edição traduzida, McGraw-Hill, São Paulo, 2013. ISBN: 9788580552744.

COELHO, P., COSTA, M., Combustão. 2ª edição, Orion, Amadora-Portugal, 2012. ISBN: 9789728620103

GLASSMAN, I., YETTER, R., Combustion. 4ª edição, Academic Press, 2008. ISBN-10: 0120885735, ISBN-13: 978-0120885732.

KOLASINSKI, K., W., Surface Science, Wiley, 2nd edition, 2008. ISBN: 978-0-470-99781-9

SCHMAL, M., Cinética e Reatores, 2ª edição, Synergia, 2013. ISBN: 8561325720. ISBN13: 9788561325725

Franklin (Feng) Tao, William F. Schneider, Prashant V. Kamat, Heterogeneous Catalysis at Nanoscale for Energy Applications 1st Edition, 2014. ISBN: 978-0-470-95260-3.

FOGLER, H. S. Elementos de engenharia das reações químicas. 4 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2009. ISBN-10: 852161716X. ISBN-13: 978-8521617167

Artigos científicos selecionados ao longo do semestre de acordo com o interesse dos participantes.

ANSYS Chemkin Theory Manual 17.0 (15151), Reaction Design: San Diego, 2015.

Software Cantera 2.3.0. Disponível em: <https://cantera.org/>

Notas de aula.

Atualizado em: 01/08/2019