



Universidade Federal de Santa Catarina
Centro Tecnológico
Departamento de Engenharia Mecânica



PLANO DE ENSINO

EMC 410197 – Cinética química da combustão – Mecanismos cinéticos detalhados e bases de dados termodinâmicos.

1) Identificação

Carga horária: 45 horas-aula teóricas.

Nome dos professores:

Amir Antônio Martins de Oliveira Junior, Email: amir.oliveira@gmail.com

Leonel Rincón Cancino, Email: leonel.cancino@labmci.ufsc.br

Período: 4º bimestre de 2023

Horário: 4ª/ 16-18h e 6ª/ 14-18h

2) Cursos

Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

3) Requisitos

(não há)

4) Ementa

Introdução, abordagem numérica de um processo de combustão. Mecanismos cinéticos globais e detalhados, bases de dados termodinâmicos disponíveis na literatura. Simulações de Equilíbrio Químico e Propriedades de Chamas Adiabáticas. Simulações de Cinética Química: Reatores PSR, Chama Plana Laminar, Tubos de coque, Máquina de compressão rápida. Análise de mecanismos cinéticos detalhados: Análise de coeficiente logarítmico de primeira ordem, análise de sensibilidade de força bruta. Discussão de artigo científico.

5) Objetivos

Geral:

Ao final da disciplina, o aluno adquirirá uma compreensão da abordagem numérica de um processo de combustão, a sua complexidade e as possibilidades de solução e análise em termos de ferramentas computacionais disponíveis e em desenvolvimento.

Específicos:

1. Entender e discernir sob a complexidade fenomenológica de um processo de combustão

2. Adquirir conhecimentos de bases de dados cinéticos e termodinâmicos para diferentes combustíveis
3. Analisar modelos cinéticos em diferentes condições de simulação de reatores químicos
4. Adquirir destreza no uso de programas para simulação numérica de processos de combustão

6) Conteúdo Programático

UNIDADE 1. ABORDAGEM NUMÉRICA DE PROCESSOS DE COMBUSTÃO

- 1.1 Introdução
- 1.2 Abordagem numérica de um processo de combustão
- 1.3 Programas para simulação numérica de processos de combustão

UNIDADE 2. MECANISMOS CINÉTICOS E BASES DE DADOS

- 2.1 Introdução
- 2.2 Mecanismos cinéticos globais e detalhados
- 2.3 bases de dados termodinâmicos disponíveis na literatura

UNIDADE 3. EQUILÍBRIO QUÍMICO E CHAMAS ADIABÁTICAS

- 3.1 Introdução
- 3.2 Simulações de equilíbrio químico
- 3.3 Simulações e propriedades de chamas adiabáticas

UNIDADE 4. SIMULAÇÕES DE CINÉTICA QUÍMICA

- 4.1 Introdução
- 4.2 Simulações de reatores PSR
- 4.3 Simulações de chama plana laminar,
- 4.4 Simulações de tubos de coque,
- 4.5 Simulações de máquina de compressão rápida

UNIDADE 5. ANÁLISE DE MECANISMOS CINÉTICOS

- 5.1 Introdução
- 5.2 Análise de coeficiente logarítmico de primeira ordem
- 5.3 Análise de sensibilidade de força bruta

7) Metodologia

Os conteúdos serão desenvolvidos com aulas expositivas / dissertativas e resolução de exercícios. Palestras e aulas expositivas dissertativas: serão ministradas pelo professor responsável, conforme cronograma distribuído a todos os alunos matriculados na disciplina e devidamente reunidos para este fim.

8) Avaliação

A avaliação será formada por 4 trabalhos (TU2, TU3, TU4 e TU5). Cada um dos trabalhos receberá uma nota entre 0,0 e 10,0. A média final será computada pela média aritmética simples das notas dos trabalhos:

$$\text{Nota Final} = (\text{TU2} + \text{TU3} + \text{TU4} + \text{TU5})/4$$

Os trabalhos serão realizados de forma não presencial em datas e horários a serem definidos no Cronograma e anunciadas no MOODLE. Os trabalhos terão a forma de listas de exercícios, ou questões em estilo de análise ou projeto. O enunciado dos trabalhos será disponibilizado no MOODLE em dia e hora pré-estabelecidas. Espera-se que o aluno discuta com seus colegas de classe a solução dos trabalhos, mas realize a sua entrega individualmente. Para ser aprovado, além do requisito da nota, o aluno deverá ter frequência igual a superior a 75%, que será aferida pela participação nas atividades síncronas e pelo acesso nas atividades assíncronas.

Conforme parágrafo 2º do artigo 70 da Resolução 17/CUn/97, o aluno com frequência suficiente (FS) e média final no período (MF) entre 3,0 e 5,5 terá direito a uma nova avaliação ao final do semestre (REC), sendo a nota final (NF) calculada conforme parágrafo 3º do artigo 71 desta resolução, ou seja: $NF = (MF + REC) / 2$.

9) Cronograma

	Dia da semana	Data	Aula#	Conteúdo	Professor
Semana 1	Quarta feira	11/10/2023	1	Apresentação do plano de ensino. Guia de instalação de programas para a disciplina	Leonel
			2		
	Sexta feira	13/10/2023	---	Sem Aula	Leonel

Semana 2	Quarta feira	18/10/2023	3	Discussão de artigo científico	Amir / Leonel
			4		
	Sexta feira	20/10/2023	5	1.1 - 1.2 - 1.3	Leonel
			6		
			7		
Semana 3	Quarta feira	25/10/2023	9	Discussão de artigo científico (Entrega Trabalho Unidade 2 - TU2)	Amir / Leonel
			10		
	Sexta feira	27/10/2023	11	2.1 - 2.2 - 2.3	Leonel
			12		
			13		
Semana 4	Quarta feira	01/11/2023	15	Discussão de artigo científico (Entrega Trabalho Unidade 3 - TU3)	Amir / Leonel
			16		
	Sexta feira	03/11/2023	17	3.1 - 3.2 - 3.3	Leonel
			18		
			19		

			20		
Semana 5	Quarta feira	08/11/2023	21	Discussão de artigo científico	Amir / Leonel
			22		
			23		
	Sexta feira	10/11/2023	24	4.1 - 4.2 - 4.3	Leonel
			25		
26					
Semana 6	Quarta feira	15/11/2023	27	Discussão de artigo científico	Amir / Leonel
			28		
	Sexta feira	17/11/2023	29	4.4 - 4.5	Leonel
			30		
			31		
Semana 7	Quarta feira	22/11/2023	33	Discussão de artigo científico (Entrega Trabalho Unidade 4 - TU4)	Amir / Leonel
			34		
	Sexta feira	24/11/2023	35	5.1 - 5.2 - 5.3	Leonel
			36		
			37		
Semana 8	Quarta feira	29/11/2023	39	(Entrega Trabalho Unidade 5 - TU5)	Amir / Leonel
			40		
	Sexta feira	01/12/2023	41	Discussão geral da disciplina	Leonel
			42		
			43		

Observação: O aluno precisará de 02 horas de aula em casa para realização dos trabalhos, complementando desta forma os 45 créditos / horas-aula da disciplina.

10) Bibliografia Básica

- J. Warnatz, Ulrich Maas Robert W. Dibble, Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation, 4a edição, Springer, 2006. ISBN-13: 978-3540259923
- Stephen R. Turns, An Introduction to Combustion: Concepts and Applications, 3a. edição, McGraw Hill, 2011; ISBN-13: 978-0073380193
- H. Scott Fogler, Elements of Chemical Reaction Engineering, Third Ed., Prentice-Hall, 1999, ISBN 0-13-973785-5, 967 páginas.

11) Bibliografia Complementar

- Stephen R. Turns, Introdução à Combustão: Conceitos e Aplicações, 3a. edição, McGraw Hill, 2013; ISBN 9788580552744.

- Mario Costa e Pedro Coelho, Combustão, Editora Orion, 2007. ISBN 9789728620103.
- Chung K. Law, Combustion Physics, Cambridge University Press, 2006. ISBN-13: 978-0521870528
- Jürgen Warnatz, Ulrich Maas Robert W. Dibble, Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation, 4a edição, Springer, 2006. ISBN-13: 978-3540259923
- Irwin Glassman e Richard Yetter, Combustion, 4a edição, Academic Press, 2008, ISBN-13: 978-0120885732
- Thierry Poinso e Denis Veynante, Theoretical and Numerical Combustion, 2ª. Edição, R.T. Edwards, 2005, ISBN-13: 978-1930217102.
- Amable Linan, Forman A. Williams, Fundamental Aspects of Combustion, The Oxford Engineering Science Series, vol. 34, Oxford Univ Press; 1993, ISBN: 0195076265
- Robert B. Bird, Edwin N. Lightfoot e Warren E. Stewart, Transport Phenomena, John-Wiley & Sons, 1960, ISBN: 0471410772, 912 páginas.
- Stanley I. Sandler, Chemical Engineering Thermodynamics, John Wiley, 1998, 735 páginas.
- H. Scott Fogler, Elements of Chemical Reaction Engineering, Third Ed., Prentice-Hall, 1999, ISBN 0-13-973785-5, 967 páginas.
- Richard I. Masel, Chemical Kinetics and Catalysis, Wiley-Interscience; 2001, ISBN: 0471241970 ; 896 páginas.
- John Heywood, Internal Combustion Engines Fundamentals, McGraw-Hill Higher Education, 1988, ISBN: 007028637X, 930 páginas.
- Alan C. Eckbreth, Laser Diagnostics for Combustion Temperature and Species, Combustion Science and Technology Book Series, Vol 3, 2nd Edition, Gordon & Breach Science Pub., 1996, ISBN: 2884492259, 596 páginas.