

Modelagem e simulação da formação de compostos aromáticos e óxidos de nitrogênio durante a combustão de hidrocarbonetos

Gláucia P. Leal¹ (PG), Camila R. Coelho² (IC), Liliâne F. de Souza² (IC), Leonardo Baptista^{2*} (PQ)

*leobap@gmail.com

¹ Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto de Química, Rua São Francisco Xavier 524, Rio de Janeiro

² Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Faculdade de Tecnologia, Departamento de Química e Ambiental, Rodovia Presidente Dutra Km 298, Resende - RJ

Palavras Chave: modelo cinético, combustão, HPA, nitro-HPA, óxidos de nitrogênio,.

Introdução

A crescente demanda por energia tem gerado maior poluição. O processo de combustão é uma das maiores fontes de energia utilizadas em nossa sociedade, em contrapartida é um dos maiores emissores de poluentes para atmosfera como: NO_x , HPA, aldeídos, material particulado e outros. Estes contribuem para a formação do smog fotoquímico, aumento do poder oxidante da atmosfera e problemas de saúde na população. Atualmente os compostos aromáticos nitrados, principalmente os nitro-HPA¹, tem chamado atenção dos pesquisadores devido aos efeitos nocivos a saúde da população.

O presente estudo tem como objetivo descrever a formação de óxidos de nitrogênio e HPA, através de modelos cinéticos, durante a combustão do metano, etano, eteno, propano, propeno e n-butano e misturas de hidrocarbonetos. O objetivo a longo prazo deste trabalho é desenvolver um modelo cinético para formação de nitro-HPA em processos de combustão.

Metodologia

O estudo da formação de NO_x durante combustão de hidrocarbonetos foi iniciado a partir modelo cinético de Hori². Enquanto que a formação de monoaromáticos e HPA foi iniciada a partir do modelo cinético de Marinov³. Ambos os modelos foram modificados de forma a atualizar os dados cinéticos e incluir mais reações em seu banco de dados. Todo o estudo foi conduzido utilizando o software Kintecus, que realiza a integração numérica das equações de velocidade que descrevem o mecanismo de combustão. Fez-se simulações variando-se parâmetros como temperatura, tempo de reação e concentração dos reagentes.

Resultados e Discussão

A formação de compostos aromáticos a partir da combustão do n-butano em um processo rico em combustível está mostrada na Figura 1. Pode ser observado que a medida que o benzeno se decompõe aumenta-se a concentração de pireno.

37^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

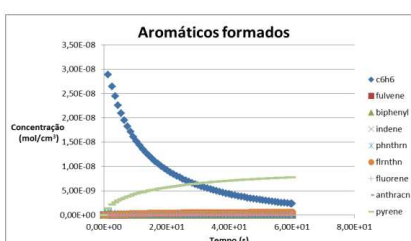


Figura 1. Formação de aromáticos para combustão com excesso de n-butano. Temperatura inicial 1300K.

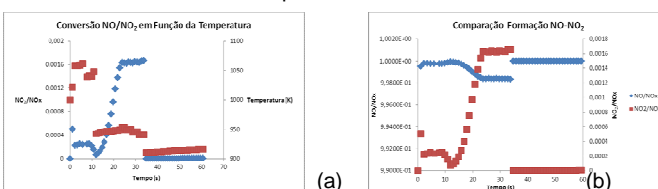


Figura 2. Conversão de NO-NO₂ em função da temperatura, (a), e em função da concentração de NO, (b). Ambas simulações foram iniciadas com T= 1000K. Na figura (a) a temperatura é o gráfico em magenta.

A conversão de NO-NO₂ é confirmado quando ocorre a diminuição da concentração de NO, Figura 1b, e a concentração de NO₂ se eleva. Foi observado em todas as simulações que a elevação da concentração de NO₂ ocorre logo após a ignição do combustível Figura 1(a).

Conclusões

Por meio das curvas de temperatura foi possível identificar a temperatura de ignição das misturas reacionais e seu comportamento para diferentes temperaturas iniciais e os produtos formados ao longo da reação. Propano, etano e eteno proporcionam maior conversão de NO a NO₂. Pireno foi o HPA formado em maior concentração a partir da combustão de uma mistura rica em n-butano.

Agradecimentos

FAPERJ, e ao professor Sérgio Machado Corrêa, UERJ, pela ideia original do projeto.

¹ Barrado, A. I.; García, S.; Castrillejo, Y., Barrado, E. Atmos. Environ. **2013**, *67*, 385.

² Hori, M.; Matsunaga, N.; Marinov, N. e Pitz, W. *27th Symposium on Combustion/The Combustion Institute*. **1998**, pp389-396.

³ Marinov, N. M. et al. **1998**, *114*, 192