



REVISTA CIENTÍFICA DA UMC



## DESENVOLVIMENTO DE UMA FERRAMENTA COMPUTACIONAL PARA MONITORAMENTO DA EMISSÃO DE NO<sub>x</sub> PELA COMBUSTÃO DO GÁS NATURAL

Gabriel Marcos De Sousa Motta <sup>1</sup>, Marcos Martins Ornelas Junior <sup>2</sup>, Hernandes de Souza Brandão<sup>3</sup>, Robson Rodrigues da Silva<sup>4</sup>

1. Estudante - Curso de Engenharia Química, e-mail: gabriel.motta@hotmail.com;
2. Estudante - Curso de Engenharia Química, e-mail:marcos.moj@outlook.com;
3. Professor - UMC, e-mail: hernandesbrandao@umc.br;
4. Professor - UMC, e-mail: robson.silva@umc.br.

**Área do conhecimento:** Engenharia Química.

**Palavras-chave:** Combustão; Gás natural; Emissões atmosféricas; Ferramenta computacional.

### INTRODUÇÃO

A combustão do gás natural para geração de energia apresenta crescimento acelerado no Brasil (ANP, 2019), e, assim como outros combustíveis, o gás natural tem entre seus fumos o NO<sub>x</sub> (óxidos de nitrogênio), que na atmosfera é o principal precursor da geração de poluentes secundários e com a formação dos oxidantes fotoquímicos (smog), está associado a chuva ácida. O NO<sub>x</sub> também pode afetar diretamente a saúde dos seres humanos atacando as vias respiratórias (FILHO, 2016).

Atualmente, a geração de energia na indústria se dá principalmente via processo de combustão, seja através da queima do gás natural ou outros combustíveis para a geração de vapor (ANP, 2019). Embora haja vasta utilização do processo de combustão, o controle de emissão se mostra limitado ao emprego de softwares de monitoramento dos fumos da combustão, gerando a necessidade de ajuste do processo de combustão após a emissão dos poluentes (PREFE, 2014).

A modelagem do simulador de reações de combustão com gás natural se dá num contexto de inexistência de ferramentas que usem métodos cinéticos e teóricos para calcular a emissão de NO<sub>x</sub>, sendo que atualmente só se utiliza métodos estatísticos.

### OBJETIVOS

Desenvolver uma ferramenta computacional para determinar a concentração do NO<sub>x</sub> através da queima do gás natural, atendendo aos seguintes objetivos específicos: i) Desenvolver um modelo matemático para determinação da concentração de NO<sub>x</sub> nos produtos da combustão; ii) Determinar uma relação entre a concentração do gás NO<sub>x</sub> e a temperatura de combustão; iii) Implementar ferramentas didáticas para utilização nas aulas de Química Tecnológica e Cinética Química; iv) Realizar experimentos “*in silico*” envolvendo a combustão do metano; v) Validar o modelo matemático utilizando dados reportados na literatura.



## METODOLOGIA

Para a determinação das concentrações do grupo de gases  $\text{NO}_x$ , considerou-se as leis de conservação de massa e energia e a lei cinética para as velocidades de reação, ou seja, o consumo de reagentes e formação de produto (ATKINS, 2012). Já, para determinação específica do mecanismo de combustão do gás natural e geração do  $\text{NO}_x$ , considerou-se o mecanismo de Zeldovich (HAYHURST & VINCE, 1980), que compreende os óxidos de Nitrogênio como produto da somatória ( $\text{NO}_x = \text{NO} + \text{NO}_2$ ), óxido nítrico (NO), e o dióxido de nitrogênio ( $\text{NO}_2$ ).

Para obter a taxa instantânea da concentração do  $\text{NO}_x$  foi desenvolvido um modelo matemático constituído por um sistema de Equações Diferenciais acopladas resolvido na plataforma MATLAB utilizando o Método de Runge Kutta de 4 ordem com passo de integração de  $10^{-5}$  segundos.

O desenvolvimento da ferramenta computacional sucedendo conseqüentemente o modelo matemático (código fonte, interfaces e gráficos), foram possíveis através de um estudo do software MATLAB e sua linguagem de programação como: Java, Python, C e C++. Dentro do MATLAB, diretamente da biblioteca de app, foi utilizado o app designer, uma evolução do seu antecessor GUI para modelar as interfaces da ferramenta.

Após o desenvolvimento da ferramenta, adotou-se protocolos de simulação a fim de verificar sua viabilidade. As simulações contaram com valores de entrada de  $\text{O}_2$  no processo (1 e 70% de excesso) e volume fixo de gás natural (65 mil mol).

A forma na qual as simulações foram estruturadas tende a abranger e resultar em valores teoricamente esperados de mínimo e máximo temperatura e concentração de  $\text{NO}_x$ .

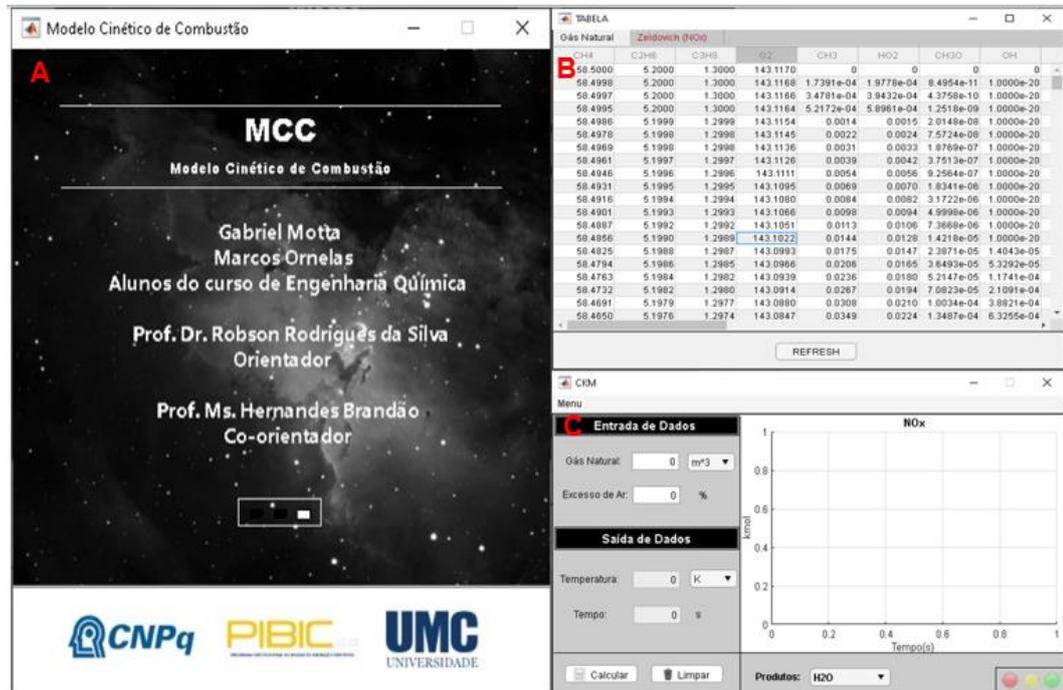
## RESULTADOS E DISCUSSÕES

A ferramenta computacional, denominada MCC (Modelo Cinético de Combustão), foi desenvolvida com o intuito de proporcionar uma interface de fácil acesso para o usuário. As linhas de códigos foram alocadas em 3 scripts principais, dois deles com as Equações Diferenciais e o outro com os comandos para resolução utilizando os métodos numéricos. Destaca-se que o download da ferramenta pode ser realizado através do link ([Formulário de cadastro](#)) após um breve cadastro.

O “script” do código onde estão listadas algumas das Equações Diferenciais Ordinárias (EDO's), as interfaces gráficas e as simulações didáticas foram desenvolvidas através do APP DESING e estruturadas conforme as Figuras (1) e (2).

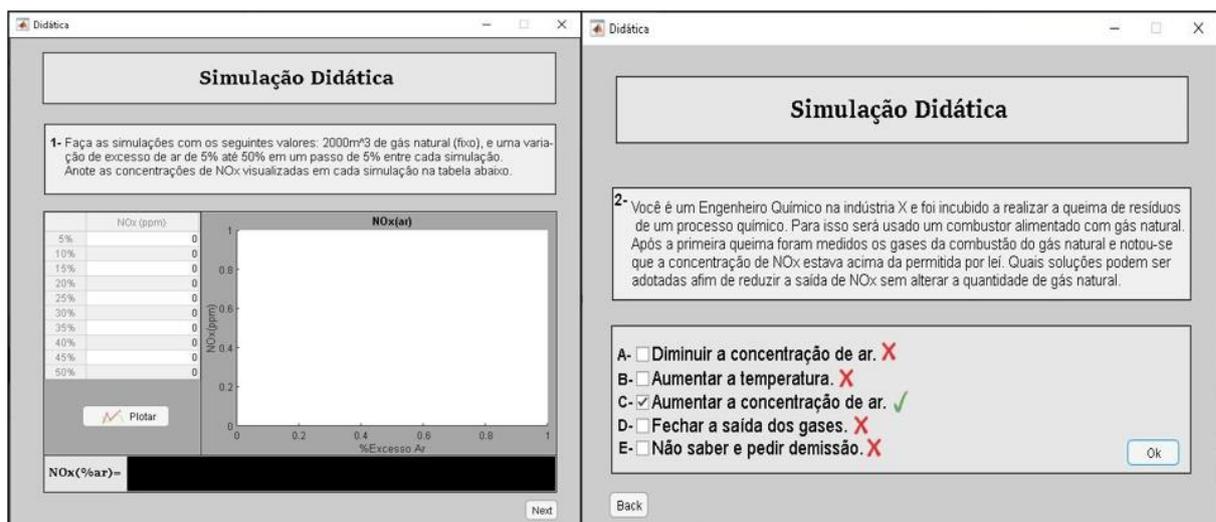


Figura 1. Principais interfaces da ferramenta.



A) Interface gráfica da tela inicial do software desenvolvido; B) Tabela com resumo dos resultados de saída por composição química; C) Interface da tela principal do software com dados de entrada e gráfico de saída.

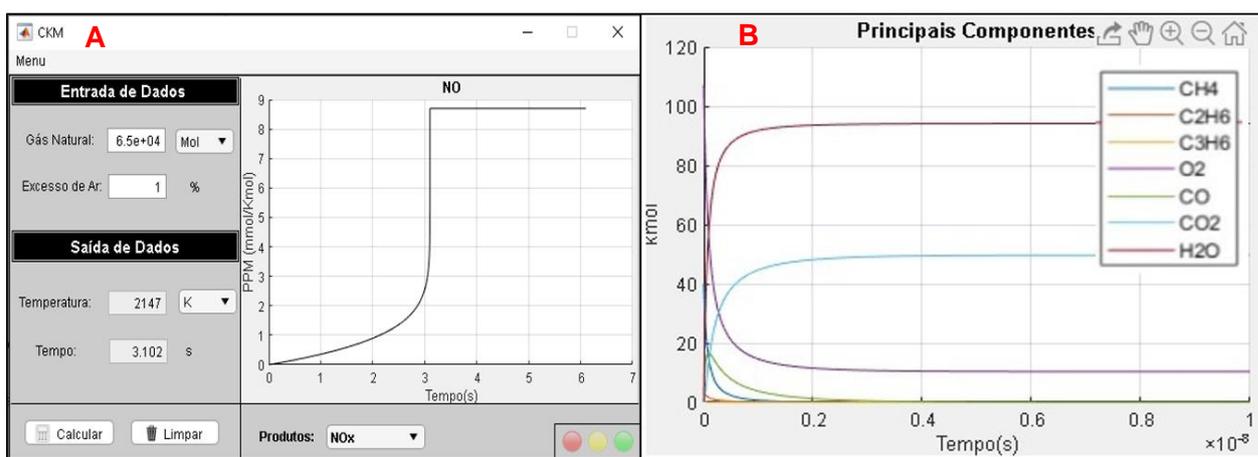
Figura 2. Ferramentas didáticas do simulador: resolução de problemas





A validação do mecanismo de combustão e da ferramenta, foi realizada através de *simulações in Silico*. Os resultados gráficos que quantificam as emissões dos produtos da reação de combustão são expostos na Figura (3).

**Figura 3.** Resultado dos experimentos “*in silico*”



**A) Simulação 1:** emissão (ppm) de  $\text{NO}_x$  com entrada de 1% de excesso de  $\text{O}_2$ ; **B) Simulação 2:** concentração (Kmol) dos demais produtos da combustão com entrada de 1% de excesso de  $\text{O}_2$ .

As simulações realizadas possibilitaram a coleta de resultados preliminares da ferramenta, que se apresentaram conforme o esperado para o modelo matemático proposto.

Como comentado anteriormente, o mecanismo Zeldovich (HAYHURST & VINCE, 1980), no qual o trabalho tem embasamento teórico, apresenta como característica a forte influência do excesso de ar  $\text{O}_2$  na formação do  $\text{NO}_x$ , ou seja, notou-se na Simulação 1 (com 1% de excesso de  $\text{O}_2$ ), que houvera uma alta na temperatura do processo de combustão (resultando em 2147 K) sendo próxima a TAC calculada para o estudo ( $TAC_{\text{teórica}} = 2160 \text{ K}$ ) e baixa emissão de  $\text{NO}_x$ .

A validação de dados da ferramenta foi pautada em estudos práticos realizados com equipamentos industriais que utilizam como combustível o gás natural. Eventualmente, tais equipamentos emitem Gases de Efeito Estufa (GEE), dentre eles o  $\text{NO}_x$ .

Para a determinação da precisão dos dados, utilizou-se, principalmente, o trabalho desenvolvido por LÓPEZ & POLUPAN (2011) no qual identificam vareáveis de trabalho de um equipamento industrial de geração de vapor e suas emissões de  $\text{NO}_x$  em cenários distintos.

Com a análise de dados é possível interpretar que, embora haja a separação de dados por entrada de combustível em diferentes partes do equipamento gerando dados diferentes de emissão de  $\text{NO}_x$ , a simulação desenvolvida na ferramenta apresentou baixo desvio percentual (>15%) em reação aos cenários extremos de emissão.

## CONCLUSÃO

Entende-se que o monitoramento dos processos de combustão para geração de energia é importante tanto para o controle das emissões de poluentes por questões ambientais, quanto para questões de eficiência energética uma vez que se nota a relevância do  $\text{O}_2$  no processo (PREFE, 2014).



Em linhas gerais, a ferramenta de monitoramento da emissão de  $\text{NO}_x$  pela combustão do gás natural apresentou dados com desvio inferior a 15% quando analisados frente a resultados reais de emissão de  $\text{NO}_x$ . Os resultados também se mostraram compatíveis aos teóricos, que foram explanados durante as simulações “*in silico*”.

A ferramenta também se mostra intuitiva, podendo ser facilmente direcionado para o uso didático apresentando, inclusive, uma área com situações problema para complementar o ensino nas disciplinas de Química Tecnológica e Cinética Química. Por tanto, conclui-se que a ferramenta alcançou os objetivos determinados inicialmente, sendo possível sua utilização como simulador efetivo da combustão do Gás natural e emissão de  $\text{NO}_x$  mediante a inserção dos parâmetros de controle da reação.

## REFERÊNCIAS

ANP. *Anuário Estatístico Brasileiro do Petróleo e do Gás Natural*, 2019. Rio de Janeiro, 2019. Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis – ANP.

ATKINS, P.; JONES, L. *Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente*. 5.ed. Porto Alegre: Bookman, 2012

COMPANHIA AMBIENTAL DO ESTADO DE SÃO PAULO-CETESB, *plano de redução de emissões de fontes estacionárias (PREFE)*. São Paulo, 2014.

FILHO, R. V. *Emissão de óxidos de nitrogênio ( $\text{NO}_x$ ) na combustão industrial*. IPT Notícias, São Paulo, v.1, n.3, dez., 2016.

HAYHURST, A.N; VINCE, I. M.. *Nitric oxide formation from  $\text{N}_2$  in flames" the importance of "prompt" no*. Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 6. Pergamon Press Ltd,1980.

LÓPEZ, G. J.; POLUPAN, G.; GARCÍA, J. A. J.; PYSMENNY, Y. *Metodología de cálculo de  $\text{NO}_x$  en generadores de vapor que queman gas natural*. Científica, ESIME Instituto Politécnico Nacional México. Vol.15 Núm. 2, pp. 93-100, 2011.

## AGRADECIMENTOS

Agradecemos o apoio dos nossos orientadores Prof. Dr. Robson Rodrigues da Silva e Prof. Ms. Hernandez de Souza Brandão e ao aluno da Pós-graduação, Matheus Leonardo, pelo suporte com as questões da plataforma no qual o software fora desenvolvido. Agradecemos ao CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) pelo apoio financeiro e pela oportunidade de desenvolvimento do trabalho.