



Universidade Federal de Santa Catarina
Centro Tecnológico
Departamento de Engenharia Mecânica



PLANO DE ENSINO

Em caráter excepcional e transitório, para substituição do ensino presencial pelo ensino não presencial, enquanto durar a pandemia do novo coronavírus (COVID-19), em atenção à Portaria MEC Nº 544, de 16 de junho de 2020, e à Resolução Normativa Nº 140/2020/CUn, de 21 de julho de 2020.

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 2021

Horário: 4ª/ 16-18h e 6ª/ 08-12h

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

A disciplina será oferecida por meios síncronos e assíncronos. As aulas expositivas, realizadas com ferramenta síncrona de vídeo-conferência, serão gravadas na plataforma BBB-Moodle da disciplina. (Sala virtual da disciplina).

As aulas síncronas terão por objetivo apresentar as deduções principais, descrever os métodos de solução recomendados e de discutir as dúvidas originadas na solução de problemas. Estas aulas síncronas serão realizadas no horário oficial da disciplina, nos dias identificados no cronograma.

As atividades assíncronas, principalmente de análise e discussão de artigos científicos relacionados à modelagem da cinética química, serão realizadas com o auxílio de notas de aula disponibilizadas no MOODLE. As notas de aula serão fornecidas na forma de textos e slides e cobrirão aspectos específicos do conteúdo. Além das notas de aula, outros conteúdos poderão ser disponibilizados no MOODLE, como vídeos e apresentações, conforme a necessidade.

Não será permitido gravar, fotografar ou copiar as aulas disponibilizadas no MOODLE. O uso não autorizado de material original retirado das aulas constitui contrafação – violação de direitos autorais – conforme a Lei nº 9.610/98 – Lei de Direitos Autorais.

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 (online) 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 e devolvidos via MOODLE. 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	Modalidade
Semana 1	Quarta feira	28/10/2021	1	Apresentação do plano de ensino. Guia de instalação de programas para a disciplina	Síncrona
			2		
	Sexta feira	30/10/2021	3	1.1 - 1.2 - 1.3	Síncrona
			4		
			5		
			6		
Semana 2	Quarta feira	04/11/2021	7	Discussão de artigo científico	Assíncrona
			8		

	Sexta feira	06/11/2021	9 10 11 12	2.1 - 2.2 - 2.3	Síncrona
Semana 3	Quarta feira	11/11/2021	13 14	Discussão de artigo científico (Entrega Trabalho Unidade 2 - TU2)	Assíncrona
	Sexta feira	13/11/2021	15 16 17 18	3.1 - 3.2 - 3.3	Síncrona
	Quarta feira	18/11/2021	19 20	Discussão de artigo científico (Entrega Trabalho Unidade 3 - TU3)	Assíncrona
	Sexta feira	20/11/2021	21 22 23 24	4.1 - 4.2	Síncrona
Semana 5	Quarta feira	25/11/2021	25 26	Discussão de artigo científico	Assíncrona
	Sexta feira	27/11/2021	27 28 29 30	4.3 - 4.4(a)	Síncrona
	Quarta feira	02/12/2021	31 32	Discussão de artigo científico	Assíncrona
	Sexta feira	04/12/2021	33 34 35 36	4.4(b) - 4.5	Síncrona
Semana 7	Quarta feira	09/12/2021	37 38	Discussão de artigo científico (Entrega Trabalho Unidade 4 - TU4)	Assíncrona
	Sexta feira	11/12/2021	39 40 41 42	5.1 - 5.2 - 5.3	Síncrona
	Quarta feira	16/12/2021	43 44	(Entrega Trabalho Unidade 5 - TU5)	Assíncrona
	---	---	--- --- ---	---	---

Observação: O aluno precisará de 01 hora 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 Poinot 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.