

DESENVOLVIMENTO DE PROGRAMA DE EQUILÍBRIO QUÍMICO PARA APLICAÇÕES EM COMBUSTÃO E PROPULSÃO

José Raimundo da Silva Junior¹ (FEG/UNESP, Bolsista PIBIC/CNPq)
Fernando de Souza Costa² (LCP/COPDT/INPE, Orientador)

RESUMO

Este trabalho descreve o desenvolvimento de programa de equilíbrio químico escrito em linguagem *Python* para aplicações em combustão e propulsão. Inicialmente foi elaborado o código CEQINPE1 com base no método das constantes de equilíbrio, derivadas a partir da minimização da energia livre de Gibbs, considerando-se reações entre combustíveis CHON e oxidantes HON, gases perfeitos e processos a pressão e a entalpia constantes. Foram obtidas frações molares dos produtos e temperaturas de chama adiabática, para diversas misturas combustíveis e diferentes razões de equivalência. Os resultados obtidos foram comparados a dados do código CEA2 NASA, mostrando boa concordância. O código CEQINPE2 foi então elaborado para o cálculo do equilíbrio químico de misturas de vários combustíveis com vários oxidantes, porém o algoritmo não apresentou velocidade de processamento adequada, devido à complexidade do sistema de equações não lineares e às muitas condicionantes no código para identificação apenas das soluções positivas. Em consequência, elaborou-se o código CEQINPE3 com base na minimização direta da energia livre de Gibbs, aplicação da técnica dos multiplicadores de Lagrange, método de Newthon-Raphson e linearização do sistema de equações. Assim, as soluções de problemas de equilíbrio químico de misturas combustíveis puderam ser encontradas com tempos de processamento significativamente menores que nos códigos anteriores. Foi possível também incluir no código, de forma relativamente simples, novas funções para solução de diferentes problemas, considerando volume, pressão, entalpia ou entropia constantes, em 6 tipos de problemas (hp, tp, sp, hv, tv, sv). Uma interface gráfica foi desenvolvida para uso do código CEQINPE3, com opções para entrada de dados, desenho de gráficos e armazenamento de resultados em arquivos de extensão .xlsx. Dessa forma, obteve-se não apenas um código numérico, mas um programa potente e rápido, capaz de fornecer soluções e propriedades termodinâmicas relacionadas a diversos problemas de equilíbrio químico e visando aplicações em combustão e propulsão.

¹ Aluno do Curso de Bacharelado em Física – E-mail: raimundo.36@hotmail.com

² Pesquisador do laboratório de combustão e propulsão – E-mail: fernando.costa@inpe.br