

## ESTUDO E CARACTERIZAÇÃO DO ETANOL COM EXCESSO DE ÁGUA UTILIZANDO UM QUEIMADOR POROSO.

Elisa Hasse Tonet, Roberto Wolf Francisco Jr.

### INTRODUÇÃO

A crescente preocupação com as mudanças climáticas e a necessidade de reduzir emissões de gases de efeito estufa têm impulsionado a busca por fontes de energia mais limpas e sustentáveis. Instituições como a Agência Internacional de Energia (IEA, 2024) destacam alternativas como biomassa, biogás, energia eólica e hidrogênio. Este último se diferencia por ser um combustível limpo e livre de carbono, com aplicações em transporte, geração de energia e redução da dependência de fontes fósseis finitas.

Segundo a IEA (2024), o método mais empregado para a produção de gás de síntese é a reforma a partir do gás natural. Embora consolidado, esse processo apresenta limitações, como altos custos operacionais, degradação catalítica e complexidade do sistema (Faye et al., 2022). Nesse contexto, a oxidação parcial surge como alternativa promissora. Trata-se de um processo exotérmico, capaz de gerar calor e produzir gás de síntese, cujo desempenho pode ser ampliado com o uso de meios porosos que promovem recirculação de calor, conceito proposto por Weinberg (1986).

A escolha do combustível é decisiva para essa rota. O Brasil, segundo maior produtor mundial de etanol (ANP, 2025), dispõe desse biocombustível em formas anidra (99,3%) e hidratada (95,5%), sendo a segunda economicamente vantajosa por reduzir os custos de purificação. Estudos anteriores demonstraram a viabilidade da oxidação parcial do etanol em queimadores porosos (Moser et al., 2006; Dai et al., 2023), mas permanecem lacunas relevantes, como os efeitos da diluição do combustível e da configuração do queimador sobre o rendimento e a composição do gás de síntese.

Assim, este trabalho avalia numericamente a influência da concentração de etanol, da razão de equivalência e da temperatura de entrada sobre a formação de gás de síntese em condições de equilíbrio químico. Os resultados obtidos permitirão identificar os parâmetros de operação para o uso de etanol e água em um queimador poroso existente no laboratório, visando a futura validação experimental.

### DESENVOLVIMENTO

A determinação das frações molares dos produtos foi realizada considerando equilíbrio químico, dado que a combustão do etanol envolve a formação de múltiplas espécies, inviabilizando um balanço atômico direto. O equilíbrio leva em conta todas as reações possíveis, diretas e inversas, e permite identificar a composição final dos produtos (Turns, 2012).

As simulações foram conduzidas no software CHEMKIN 2025, integrado à plataforma ANSYS, empregando o mecanismo cinético AramcoMech 3.0 (2018). Foram analisadas razões de equivalência ( $\phi$ ) de 1,5 a 3,0, diluições de etanol (100% e 80%) e temperaturas de entrada de 298 K, 350 K e 400 K.

### RESULTADOS

Os resultados foram organizados em três etapas de análise: a influência da razão de equivalência, da diluição do combustível e da temperatura de entrada. Para simplificação da

interpretação, espécies com fração molar inferior a 0,01% foram desconsideradas, assim como o  $N_2$ , por se tratar de um gás inerte.

No que se refere à razão de equivalência ( $\phi$ ), verificou-se que, para valores inferiores a 2, houve predominância de vapor d'água ( $H_2O$ ), resultado da maior disponibilidade de oxigênio no meio reacional. Esse excesso de oxigênio limita a formação de hidrogênio ( $H_2$ ), já que os radicais de hidrogênio tendem a se combinar preferencialmente com o oxigênio, favorecendo a produção de  $H_2O$ . À medida que a razão de equivalência aumenta, observou-se maior formação de monóxido de carbono ( $CO$ ) e de  $H_2$ , acompanhada por uma redução da temperatura adiabática devido ao déficit de oxigênio. Nessa condição, em vez da oxidação completa para dióxido de carbono ( $CO_2$ ) e  $H_2O$ , predominam produtos parcialmente oxigenados, que liberam menor quantidade de energia.

A diluição do etanol, por sua vez, demonstrou impacto direto sobre a temperatura adiabática, que apresentou redução média de 40 K a cada 10% de adição de água na mistura. Apesar disso, a fração molar de  $H_2$  manteve-se praticamente constante em todas as concentrações avaliadas. Observou-se ainda um aumento na formação de  $H_2O$  e uma diminuição na de  $CO$ , acompanhada de um pequeno acréscimo na fração de  $CO_2$ . Em termos energéticos, o poder calorífico do gás de síntese sofreu pouca variação, apresentando valores de 5307, e 5234 kJ/kg para misturas contendo 100% e 80% de etanol, respectivamente, considerando a razão de equivalência  $\phi = 2,5$ .

Por fim, a avaliação da temperatura de entrada indicou que a variação entre 298 K e 400 K resultou em alterações inferiores a 0,3% na composição final dos produtos, evidenciando que esse parâmetro exerce pouca influência sobre o equilíbrio químico do processo.

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

A análise indicou que razões de equivalência entre 2,0 e 2,8 favorecem a produção de syngas, equilibrando rendimento e temperatura de operação, enquanto razões superiores a 3 não são recomendadas devido à queda acentuada da temperatura. A diluição do etanol mostrou-se viável, embora concentrações inferiores a 80 % reduzam excessivamente a temperatura, comprometendo a estabilidade do processo. A influência da temperatura de entrada foi mínima, confirmando que a serpentina fixa do queimador não representa uma limitação significativa. Dessa forma, o queimador deverá operar com razões de equivalência entre 2,0 e 2,8, utilizando diluições de etanol na ordem de 80%, e a temperatura de entrada não será um fator limitante durante o experimento.

**Palavras-chave:** Conversão termoquímica; Combustíveis renováveis; Queimadores porosos.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS (ANP). **Levantamento de preços de combustíveis – últimas semanas pesquisadas**. Brasília: ANP, 2025. Disponível em: <https://www.gov.br/anp/pt-br/assuntos/precos-e-defesa-da-concorrencia/precos/levantamento-de-precos-de-combustiveis-ultimas-semanas-pesquisadas>. Acesso em: 3 jun. 2025.
- DAI, H.; WANG, Z.; ZHAI, C. Co-partial oxidation of acetic acid, methanol, and ethanol in an integrated porous media with efficient heat recirculation: green hydrogen production and its expansion method. *Journal of Cleaner Production*, v. 418, p. 138122, 2023.

- FAYE, O. et al. **A critical review on the current technologies for the generation, storage, and transportation of hydrogen**. International Journal of Hydrogen Energy, v. 47, n. 28, p. 13468-13504, 2022.
- HARDESTY, D. R.; WEINBERG, F. J. **Burners producing large excess enthalpies**. Combustion Science and Technology, v. 8, p. 201-214, 1974.
- INTERNATIONAL ENERGY AGENCY (IEA). **Global hydrogen review 2024**. Paris: IEA, 2024. Disponível em: <https://www.iea.org/reports/global-hydrogen-review-2024>. Acesso em: 25 ago. 2025.
- MOSER, R. H.; BRISOT, G.; CATAPAN, R. C.; PEREIRA, F. M.; OLIVEIRA, A. A. M. **Desenvolvimento de um queimador poroso radiante para testes de inflamabilidade superficial de materiais**. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE CIÊNCIAS TÉRMICAS – ENCIT, 11., 2006, Curitiba. **Anais [...]**. Curitiba: ABCM, 2006.
- TURNER, S. R. **An introduction to combustion: concepts and applications**. 3. ed. New York: McGraw-Hill, 2012.
- ZHOU, C.-W. et al. **An experimental and chemical kinetic modeling study of 1,3-butadiene combustion: ignition delay time and laminar flame speed measurements**. Combustion and Flame, v. 197, p. 423-438, 2018.

---

#### DADOS CADASTRAIS

---

**BOLSISTA:** Elisa Hasse Tonet

**MODALIDADE DE BOLSA:** PROBIC/UDESC (IC)

**VIGÊNCIA:** 01/09/2024 a 31/05/2025 (8 meses)

**ORIENTADOR(A):** Roberto Wolf Francisco Jr.

**CENTRO DE ENSINO:** CCT

**DEPARTAMENTO:** Departamento de Engenharia Mecânica

**ÁREAS DE CONHECIMENTO:** Engenharias/Engenharia Mecânica/Engenharia Térmicas

**TÍTULO DO PROJETO DE PESQUISA:** Estudo da Velocidade de Chama Laminar e da Energia de Ativação Global Aparente de Combustíveis Líquidos e Gasosos Parte 2.

**Nº PROTOCOLO DO PROJETO DE PESQUISA:** NPP2964-2022