

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

José Raimundo da Silva Junior <sup>1</sup> (FEG/UNESP, Bolsista PIBIC/CNPq)  
Fernando de Souza Costa <sup>2</sup> (LCP/INPE, Orientador)

## RESUMO

Esse projeto visa o desenvolvimento de códigos de equilíbrio químico e a comparação com resultados do programa CEA2 (*Chemical Equilibrium with Applications*) da NASA (2004), visando aplicações em combustão e propulsão espacial. Serão calculadas a temperatura e a composição dos produtos da combustão em processos com entalpia e pressão constantes, empregando-se o método das constantes de equilíbrio, obtidas a partir da minimização da energia livre de Gibbs. As propriedades dos reagentes e produtos, como entalpias de formação, entalpias sensíveis, entropia e energia livre de Gibbs, são obtidas ou calculadas a partir dos coeficientes listados no relatório *NASA Glenn Coefficients for Calculating Thermodynamic Properties of Individual Species*. Inicialmente, um código de equilíbrio foi escrito na linguagem Wolfram e resultados foram obtidos para a queima de metano (CH<sub>4</sub>) em ar, para razões de equivalência  $0.4 < \Phi < 2.5$ ,  $P = 1$  atm, temperatura inicial dos reagentes de 298K e considerando como produtos CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, OH, N<sub>2</sub>, NO, N, O, H, O<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>. O código será reescrito em linguagem Phyton para simular a queima de hidrocarbonetos de fórmula CHON em ar, em diferentes pressões e temperaturas iniciais dos reagentes. Em seguida será considerada a reação entre CHON (combustível) e OHN (oxidante). Ao final será desenvolvido código para uso do método direto da minimização da energia livre de Gibbs considerando os vínculos de conservação de átomos.

<sup>1</sup> Aluno do curso de Bacharelado em Física – E-mail: [raimundo.36@hotmail.com](mailto:raimundo.36@hotmail.com)

<sup>2</sup> Pesquisador do Laboratório de Combustão e Propulsão – E-mail: [fernando.costa@inpe.br](mailto:fernando.costa@inpe.br)