

Análise do mecanismo completo do butano para obtenção de um mecanismo cinético reduzido

Vinicius Torres Marques¹

Régis Sperotto Quadros

Resumo: O aquecimento global é um dos maiores problemas do mundo moderno. A emissão de gases poluentes na atmosfera é o principal fator que agrava esse problema, causando alterações drásticas no clima. Com o intuito de reduzir essa emissão de poluentes na atmosfera surge o Protocolo de Kyoto envolvendo diversos países. Para otimizar o comportamento, de dispositivos de combustão, são usados mecanismos cinéticos químicos juntamente com códigos computacionais. O butano é um gás inodoro e incolor altamente inflamável, obtido através do aquecimento do petróleo e do gás natural. Por ser um derivado do petróleo, é uma fonte de energia não renovável. Para projetar um sistema mais limpo e livre de poluentes, têm sido usados mecanismos cinéticos químicos juntamente com códigos computacionais. Para se obter o mecanismo reduzido são necessárias quatro etapas: taxa de reação, cadeia principal, hipótese de estado estacionário e equilíbrio parcial, e por fim análise assintótica. Sendo assim neste trabalho, propõe-se uma estratégia para obter o mecanismo cinético reduzido utilizando as hipóteses de equilíbrio parcial e de um estado estacionário visando compreender a cinética química da combustão do butano. Serão apresentados métodos para o cálculo do mecanismo reduzido do butano a partir do seu mecanismo completo de oxidação.

Palavra-chave: Butano. Mecanismo. Cinética. Química.

Introdução

Atualmente, uma das maiores preocupações do ser humano tem sido o aquecimento global. Com isso, um tópico importante na preservação do meio ambiente tem sido a formação de poluentes durante a combustão. Com o intuito de conscientizar as pessoas e reduzir a emissão de gases surgiu o Protocolo de Kyoto, que é um tratado internacional que tem como principal objetivo fazer com que os países industrializados assumissem um compromisso com a redução de emissão de gases poluentes.

Para otimizar o comportamento operacional de dispositivos de combustão, têm sido usados mecanismos cinéticos químicos juntamente com códigos computacionais para projetar um sistema mais limpo e eficiente. Além de facilitar na minimização da formação de subprodutos e de substâncias poluentes, a incorporação completa de

¹ Graduando em licenciatura plena em Matemática – UFPEL.

processos químicos em modelos para processos industriais também maximiza a eficiência e qualidade do produto. Um dos principais objetivos atualmente da matemática aplicada voltada para a parte de química é contribuir com a proteção do meio ambiente. Logo, procura-se estudar formas de evitar as grandes emissões de poluentes na atmosfera visando a minimização desses subprodutos e poluentes gerados pela combustão.

O butano (C_4H_{10}) ou n-butano é um gás incolor e inodoro altamente inflamável que é obtido pelo aquecimento do petróleo e do gás natural. Assim, ele é um derivado do petróleo e, portanto, é uma fonte de energia não renovável. O butano é utilizado para aquecimento e como combustível, sendo mais comum nos botijões de gás para cozinha. Além disso o uso do butano é muito variável: combustível de isqueiros, matéria-prima na produção de borracha sintética, aquecimento de piscinas e saunas, entre outros.

A combustão do butano é de interesse para aplicações práticas e também por sua importância para a oxidação de hidrocarbonetos de ordem superior. Por exemplo, turbinas a gás estão em alta demanda na indústria de geração de energia. Apesar do butano não poder ser um combustível propriamente para uso, quantidades significativas de C_4H_{10} estão presentes no gás natural liquefeito (GNL). Assim, é necessário compreender a cinética química, para evitar problemas em sistemas de combustão de motores como o flashback (propagação devido a instabilidades na combustão), o blow off (desaparecimento da chama), e a autoignição indesejada.

É importante conhecer os mecanismos completos, porém as simulações computacionais se tornam muito complexas devido a existência de radicais altamente reativos devido às diferenças nas escalas de tempo das conversões entre espécies. Conseqüentemente, existe a necessidade de desenvolver, a partir desses mecanismos detalhados, os correspondentes mecanismos reduzidos com menos variáveis e rigidez moderada, mantendo a precisão e a abrangência dos mecanismos cinéticos detalhados (LU; LAW, 2006) (ANDREIS, 2011). Para obter um mecanismo de redução para o butano, C_4H_9 , C_2H_3 , CH_3 , C_4H_8O , $CHCO$, CH_2 , CHO e CH_2O são considerados estar em estado estacionário.

Cinética química

A seguir será apresentada a estratégia usada para se obter o mecanismo reduzido do butano, que será dividida em quatro etapas: taxa de reação, cadeia principal, hipótese de estado estacionário e de equilíbrio parcial e análise assintótica.

A) Taxa de reação

Para cada reação que acontece no mecanismo do butano utilizaremos a seguinte reação, para determinar a velocidade k :

$$k_k = AT^\beta \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) \quad (1)$$

onde A é o fator de frequência, T a temperatura, β o expoente de temperatura, E_A a energia de ativação e R a constante universal dos gases (PETERS, 1983).

B) Cadeia principal

A cadeia principal será definida através dos cálculos das velocidades realizadas no item anterior gerado pelo mecanismo completo do butano, com 54 espécies e 288 reações, na qual se obtém a tabela 1 (FROLOV, 2006).

C) Hipóteses de estado estacionário e de equilíbrio parcial

Em um sistema homogêneo, a hipótese de estado estacionário é válida para espécies intermediárias que são produzidas por reações lentas e consumidas por reações rápidas, o que faz com que suas concentrações permaneçam pequenas (TURNS, 2000). A hipótese do equilíbrio parcial é justificada quando as velocidades das reações de ida e retorno são muito maiores do que as velocidades específicas do mecanismo (PETERS, 1998).

D) Análise assintótica

A análise assintótica vai consistir em assumir o estado estacionário para determinadas espécies, obtendo entre as taxas de reações equações algébricas. Desse modo, o mecanismo reduzido será determinado através das estequiometrias dessas reações (ANDREIS, 2011).

Mecanismo completo do butano

Tabela 1: Mecanismo de oxidação do n-butano (unidades são mol, l, s e K), (FROLOV, 2006)

No.	Reação	A Mole, l, s	E/R K
1	$C_4H_{10}+O_2=C_4H_9 + HO_2$	0.259E+10	0.240E+05
2	$C_4H_{10}+ OH = C_4H_9 + H_2O$	0.409E+10	0.580E+03
3	$C_4H_{10}+ H = C_4H_9 + H_2$	0.603E+11	0.401E+04
4	$C_4H_{10}+ O = C_4H_9 + OH$	0.328E+12	0.481E+04
5	$C_4H_{10}+ HO_2 = C_4H_9 + H_2O_2$	0.389E+09	0.862E+04
6	$C_4H_8+ H = C_4H_9$	0.141E+10	0.652E+03
7	$C_4H_9+O_2=C_4H_8 + HO_2$	0.300E+11	0.700E+04
8	$C_4H_9+ OH = C_4H_8 + H_2O$	0.803E+10	-0.337E+03
9	$C_4H_{10} = H + C_4H_9$	0.233E+14	0.376E+05
10	$C_4H_{10} = CH_3 + C_3H_7$	0.324E+16	0.422E+05
11	$C_4H_{10} = C_4H_5 + C_2H_5$	0.194E+17	0.428E+05
12	$C_4H_9+ H = C_4H_8 + H_2$	0.803E+10	-0.337E+03
13	$C_4H_9 + CH_3 = C_4H_8 + CH_4$	0.470E+09	-0.443E+03
14	$C_4H_9 + C_2H_5 = C_4H_8 + C_2H_6$	0.131E+09	0.128E+03
15	$C_4H_9 + C_3H_7 = C_4H_8 + C_3H_8$	0.184E+09	0.151E+03
16	$C_4H_9+ O = C_4H_8 + OH$	0.268E+12	-0.337E+03
17	$C_4H_9+ O_2 = C_4H_9O_2$	0.684E+09	-0.659E+03
18	$C_4H_{10}+CH_3O_2=C_4H_9 + CH_3O_2H$	0.890E+10	0.600E+04
19	$C_4H_{10}+C_2H_5O_2=C_4H_9 + C_2H_5O_2H$	0.890E+10	0.600E+04
20	$C_4H_{10}+C_3H_7O_2=C_4H_9 + C_3H_7O_2H$	0.890E+10	0.600E+04
21	$C_4H_{10}+C_4H_9O_2=C_4H_9 + C_4H_9O_2H$	0.890E+10	0.600E+04
22	$C_4H_9O_2H=C_4H_9O + OH$	0.643E+16	0.198E+05
23	$C_4H_9O=H_2CO + C_3H_7$	0.257E+15	0.983E+04
24	$C_4H_9O=CH_3CHO + C_2H_5$	0.627E+15	0.975E+04
25	$C_4H_9O=C_2H_5CHO + CH_3$	0.126E+15	0.991E+04
26	$C_4H_9O=C_4H_8O + H$	0.108E+13	0.834E+04
27	$C_4H_9O_2 + H=C_4H_9O + OH$	0.105E+10	-0.830E+03
28	$C_4H_9O_2 + CH_3=C_4H_9O + CH_3O$	0.162E+08	0.614E+03
29	$C_4H_9O_2 + C_2H_5=C_4H_9O + C_2H_5O$	0.369E+08	0.131E+03
30	$C_4H_9O_2 + C_3H_7=C_4H_9O + C_3H_7O$	0.281E+08	0.780E+03
31	$C_4H_9O_2 + C_4H_9=C_4H_9O + C_4H_9O$	0.214E+08	0.140E+04
32	$C_4H_9O_2 + H_2CO=C_4H_{10}O_2 + HCO$	0.111E+08	0.353E+04
33	$C_4H_9O_2 + CH_3CHO=C_4H_{10}O_2 + CH_3CO$	0.109E+08	0.364E+04
34	$C_4H_9O_2 + C_2H_5CHO=C_4H_{10}O_2 + C_2H_5CO$	0.109E+08	0.382E+04
35	$C_4H_9O_2 + C_4H_8O=C_4H_{10}O_2 + C_4H_7O$	0.109E+08	0.401E+04
36	$C_4H_9 + HO_2=C_4H_9O + OH$	0.229E+11	0.622E+03
37	$C_4H_9 + O_2=C_4H_8O + OH$	0.479E+10	0.893E+04
38	$C_4H_9 + C_2H_5=C_4H_{10} + C_2H_4$	0.963E+09	0.355E+03
39	$C_4H_9 + C_3H_7=C_4H_{10} + C_3H_6$	0.293E+10	0.201E+02
40	$C_4H_9 + C_4H_9=C_4H_{10} + C_4H_8$	0.392E+10	-0.317E+03
41	$C_4H_9 + O_2=H_2CO + C_3H_7O$	0.400E+09	0.500E+04
42	$C_4H_9 + O_2=CH_3CHO + C_2H_5O$	0.400E+09	0.500E+04
43	$C_4H_9 + O_2=C_2H_5CHO + CH_3O$	0.400E+09	0.500E+04
44	$C_4H_9 + OH=CH_3 + C_3H_7O$	0.229E+11	-0.194E+04

45	$C_4H_9 + OH = C_2H_5 + C_2H_5O$	0.179E+12	-0.228E+03
46	$C_4H_9 + OH = C_3H_7 + CH_3O$	0.132E+11	0.481E+03
47	$C_4H_9 + H = CH_3 + C_3H_7$	0.480E+11	0.547E+03
48	$C_4H_9 + H = C_2H_5 + C_2H_5$	0.287E+12	0.322E+03
49	$C_4H_9 + H = CH_2 + C_3H_8$	0.845E+10	0.302E+04
50	$C_4H_9 + H = C_2H_4 + C_2H_6$	0.127E+10	-0.643E+04
51	$C_4H_9 + H = C_3H_6 + CH_4$	0.232E+10	-0.711E+04
52	$C_4H_9 + O = H + C_4H_8O$	0.842E+09	0.494E+03
53	$C_4H_9 + O = CH_3 + C_2H_5CHO$	0.979E+11	-0.951E+03
54	$C_4H_9 + O = C_2H_5 + CH_3CHO$	0.478E+12	-0.111E+04
55	$C_4H_9 + O = C_3H_7 + H_2CO$	0.200E+12	-0.252E+01
56	$C_4H_7O + HO_2 = C_4H_8O + O_2$	0.530E+08	0.629E+02
57	$C_4H_8O + OH = C_4H_7O + H_2O$	0.100E+11	-0.629E+02
58	$C_4H_8O + H = C_4H_7O + H_2$	0.140E+11	0.159E+04
59	$C_4H_8O + O = C_4H_7O + OH$	0.568E+10	0.717E+03
60	$C_4H_8O + HO_2 = C_4H_7O + H_2O_2$	0.600E+09	0.494E+04
61	$C_3H_7 + HCO = C_4H_8O$	0.216E+11	-0.679E+02
62	$C_3H_7 + CO = C_4H_7O$	0.181E+09	0.229E+04
63	$C_4H_7O + H = C_3H_7 + HCO$	0.501E+10	0.253E+04
64	$C_4H_7O + O = C_3H_7O + CO$	0.381E+10	0.780E+03
65	$C_4H_8 + OH = C_4H_7 + H_2O$	0.241E+11	0.392E+04
66	$C_4H_7 + H_2 = C_4H_8 + H$	0.319E+12	0.735E+04
67	$C_4H_7 + O_2 = C_2H_5O_2 + C_2H_2$	0.608E+11	0.547E+04
68	$C_4H_8 + HCO = C_4H_7 + H_2CO$	0.161E+11	0.698E+04
69	$C_4H_8 + CH_3 = C_4H_7 + CH_4$	0.286E+08	0.336E+04
70	$C_4H_8 + C_2H_5 = C_4H_7 + C_2H_6$	0.797E+07	-0.105E+04
71	$C_4H_8 + C_3H_7 = C_4H_7 + C_3H_8$	0.112E+08	-0.112E+04
72	$C_2H_5 + C_2H_2 = C_4H_7$	0.330E+09	0.176E+04
73	$C_4H_8 = C_2H_3 + C_2H_5$	0.446E+14	0.369E+05
74	$C_4H_8 = C_3H_5 + CH_3$	0.268E+13	0.429E+05
75	$C_4H_8 + O_2 = C_4H_7 + HO_2$	0.161E+11	0.215E+05
76	$C_4H_8 + O = C_3H_7 + HCO$	0.373E+10	0.565E+03
77	$C_4H_7 + OH = C_3H_7 + HCO$	0.168E+11	-0.339E+03
78	$C_4H_7 + H = C_2H_6 + C_2H_2$	0.278E+11	0.679E+01
79	$C_4H_7 + O = C_3H_7 + CO$	0.168E+11	-0.339E+03
80	$C_4H_7 + O = C_2H_5O + C_2H_2$	0.227E+12	-0.105E+04
81	$CH_3 + C_3H_7 = C_4H_8 + H_2$	0.268E+10	0.188E+03
82	$C_2H_5 + C_2H_5 = C_4H_8 + H_2$	0.449E+09	0.190E+03
83	$C_4H_8 + H + H = CH_3 + C_3H_7$	0.134E+07	-0.467E+04
84	$C_4H_8 + H + H = C_2H_5 + C_2H_5$	0.802E+07	-0.489E+04

Resultados

As espécies envolvidas neste mecanismo são:

C_4H_{10} , H , O_2 , C_4H_9 , HO_2 , OH , H_2O , H_2 , O , H_2O_2 , C_4H_8 , CH_3 , C_3H_7 , C_2H_5 , CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 ,
 $C_4H_9O_2$, CH_3O_2 , CH_3O_2H , $C_2H_5O_2$, $C_2H_5O_2H$, $C_3H_7O_2$, $C_3H_7O_2H$, $C_4H_9O_2H$, C_4H_9O , H_2CO ,

$C_4H_7, CH_3CHO, C_2H_5CHO, C_3H_5, CO, CH_3O, C_4H_8O, C_2H_5O, C_3H_7O, C_4H_{10}O_2, HCO, C_2H_4, C_3H_6, C_2H_2, CH_3CO, C_4H_7O, C_2H_5CO, C_2H_3.$

Dessa maneira, o sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO'S) será dado por:

$$L(C_4H_{10}) = -w_1 - w_2 - w_3 - w_4 - w_5 - w_9 - w_{10} - w_{11} - w_{18} - w_{19} - w_{20} - w_{21} - w_{38} + w_{39} + w_{40} \quad (2)$$

$$L(H) = -w_3 - w_6 + w_9 - w_{12} + w_{26} - w_{27} - w_{47} - w_{48} - w_{49} - w_{50} - w_{51} + w_{52} - w_{58} - w_{63} + w_{66} - w_{78} - 2w_{83} - 2w_{84} \quad (3)$$

$$L(O_2) = -w_1 - w_7 - w_{17} - w_{37} - w_{41} - w_{42} - w_{43} - w_{56} - w_{75} \quad (4)$$

$$L(C_4H_9) = w_1 + w_2 + w_3 + w_4 + w_5 + w_6 - w_7 - w_8 + w_9 - w_{12} - w_{13} - w_{14} - w_{15} - w_{16} - w_{17} + w_{18} + w_{19} + w_{20} + w_{21} - w_{31} - w_{36} - w_{37} - w_{38} - w_{39} - 2w_{40} - w_{41} - w_{42} - w_{43} - w_{44} - w_{45} - w_{46} - w_{47} - w_{48} - w_{49} - w_{50} - w_{51} - w_{52} - w_{53} - w_{54} - w_{55} \quad (5)$$

$$L(HO_2) = w_1 - w_5 + w_7 - w_{36} - w_{56} - w_{60} + w_{75} \quad (6)$$

$$L(OH) = -w_2 + w_4 - w_8 + w_{16} + w_{22} + w_{27} + w_{36} + w_{37} - w_{44} - w_{45} - w_{46} - w_{57} + w_{59} - w_{65} \quad (7)$$

$$L(H_2O) = w_2 + w_8 + w_{57} + w_{65} \quad (8)$$

$$L(H_2) = w_3 + w_{12} + w_{58} - w_{66} + w_{81} + w_{82} \quad (9)$$

$$L(O) = -w_4 - w_{16} - w_{52} - w_{53} - w_{54} - w_{55} - w_{59} - w_{64} - w_{76} - w_{79} - w_{80} \quad (10)$$

$$L(H_2O_2) = w_5 + w_{60} \quad (11)$$

$$L(C_4H_8) = -w_6 + w_7 + w_8 + w_{12} + w_{13} + w_{14} + w_{15} + w_{16} + w_{40} - w_{65} + w_{66} - w_{68} - w_{69} - w_{70} - w_{71} - w_{73} - w_{74} - w_{75} - w_{76} - w_{83} - w_{84} \quad (12)$$

$$L(CH_3) = w_{10} - w_{13} + w_{25} - w_{28} + w_{44} + w_{47} + w_{53} - w_{69} + w_{74} - w_{81} + w_{83} \quad (13)$$

$$L(C_3H_7) = w_{10} - w_{15} + w_{23} - w_{30} - w_{39} + w_{47} + w_{55} - w_{61} - w_{62} + w_{63} - w_{71} + w_{76} + w_{77} + w_{79} - w_{81} + w_{83} \quad (14)$$

$$L(C_2H_5) = w_{11} - w_{14} + w_{24} - w_{29} - w_{38} + w_{45} + 2w_{48} - w_{70} - w_{72} + w_{73} - 2w_{82} - 2w_{84} \quad (15)$$

$$L(CH_4) = w_{13} + w_{51} + w_{69} \quad (16)$$

$$L(C_2H_6) = w_{14} + w_{50} + w_{78} \quad (17)$$

$$L(C_3H_8) = w_{15} + w_{49} + w_{71} \quad (18)$$

$$L(C_4H_9O_2) = w_{17} - w_{21} - w_{27} - w_{28} - w_{29} - w_{30} - w_{31} - w_{32} - w_{33} - w_{34} - w_{35} \quad (19)$$

$$L(CH_3O_2) = -w_{18} \quad (20)$$

$$L(CH_3O_2H) = w_{18} \quad (21)$$

$$L(C_2H_5O_2) = -w_{19} + w_{67} \quad (22)$$

$$L(C_2H_5O_2H) = w_{19} \quad (23)$$

$$L(C_3H_7O_2) = -w_{20} \quad (24)$$

$$L(C_3H_7O_2H) = w_{20} \quad (25)$$

$$L(C_4H_9O_2H) = w_{21} - w_{22} \quad (26)$$

$$L(C_4H_9O) = w_{22} - w_{23} - w_{24} - w_{25} - w_{26} + w_{27} + w_{28} + w_{29} + w_{30} + 2w_{31} + w_{36} \quad (27)$$

$$L(H_2CO) = w_{23} - w_{32} + w_{41} + w_{55} + w_{68} \quad (28)$$

$$L(C_4H_7) = w_{65} - w_{66} - w_{67} + w_{68} + w_{69} + w_{70} + w_{71} + w_{72} + w_{75} - w_{77} - w_{78} - w_{79} \quad (29)$$

$$-w_{80}$$

$$L(CH_3CHO) = w_{24} - w_{33} + w_{42} + w_{54} \quad (30)$$

$$L(C_2H_5CHO) = w_{25} - w_{34} + w_{43} + w_{59} \quad (31)$$

$$L(C_3H_5) = w_{74} \quad (32)$$

$$L(CO) = -w_{62} + w_{64} + w_{79} \quad (33)$$

$$L(CH_3O) = -w_{28} - w_{43} - w_{46} \quad (34)$$

$$L(C_4H_8O) = w_{26} - w_{35} + w_{37} + w_{52} + w_{56} - w_{57} - w_{58} - w_{59} - w_{60} + w_{61} \quad (35)$$

$$L(C_2H_5O) = w_{29} + w_{42} + w_{45} + w_{80} \quad (36)$$

$$L(C_3H_7O) = w_{30} + w_{41} + w_{44} + w_{64} \quad (37)$$

$$L(C_4H_{10}O_2) = w_{32} + w_{33} + w_{34} + w_{35} \quad (38)$$

$$L(HCO) = w_{32} - w_{61} + w_{63} - w_{68} + w_{76} + w_{77} \quad (39)$$

$$L(C_2H_4) = w_{38} + w_{50} \quad (40)$$

$$L(C_3H_6) = w_{39} + w_{51} \quad (41)$$

$$L(C_2H_2) = w_{67} - w_{72} + w_{78} + w_{80} \quad (42)$$

$$L(CH_3CO) = w_{33} \quad (43)$$

$$L(C_4H_7O) = w_{35} - w_{56} + w_{57} + w_{58} + w_{59} + w_{60} + w_{62} - w_{63} - w_{64} \quad (44)$$

$$L(C_2H_5CO) = w_{34} \quad (45)$$

$$L(C_2H_3) = w_{73} \quad (46)$$

$L_{(i)}$ é operador diferencial aplicado a concentração da espécie i e w_k representa a taxa da reação k , sendo $w_i = k_i [A][B]$. Considera-se o sinal positivo para as espécies do lado direito da reação (produto) e o sinal negativo para as espécies do lado esquerdo da reação (reagente).

Conclusões

Neste trabalho foi realizada a análise da cadeia principal do butano com o intuito de obter-se a hipótese de estado estacionário para as espécies da cadeia principal do butano. Como perspectiva futura pretende-se obter o mecanismo reduzido do butano e simular numericamente esse mecanismo reduzido a fim de verificar qual conjunto de reações e espécies possui uma melhor representação química para o problema e assim obter maiores informações sobre o processo de combustão do butano.

Referências

A.L. De Bortoli; ANDREIS, G. S. L. Asymptotic Analysis for coupled Hydrogen, Carbon Monoxide, Methanol and Ethanol Reduced Kinetic Mechanisms. Latin American Applied Research, 42 (2012) 299-304.

FREITAS, E., Protocolo de Kyoto, Brasil Escola, (2018).

FROLOV, S. M.; BASEVICH, V. Ya.; BELYAEV, A. A.; PASMANN, H. J., "Detailed reaction mechanism of n-butane oxidation", Delft University of Technology, Delft, The Netherlands (2006).

LU, T.; LAW, C. K. Linear time reduction of large kinetic mechanisms with directed relation graph: n heptane and iso octane. Combustion and Flame, v. 144, p. 24–36, 2006.

MARTINS, I. P. Redução Sistemática de Mecanismos Cinéticos de Combustão. 89 p. Dissertation (Mestrado) — UFRGS, Porto Alegre, Maio 2011.

PETERS, N; ROGG, B Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems, Springer-Verlag, 15 (1993) 148-156.

SEHNEM, R. “Modelagem numérica para a obtenção de mecanismos reduzidos via método de Rosenbrock: a combustão do metano”, Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) - Universidade Federal de Pelotas, (2018) 24-46.

TURNER, S. R., An introduction to combustion. Boston: McGraw Hill, (2000).