

1 Introdução

1.1 Motivação

Os combustíveis fósseis representam na atualidade a principal fonte de energia no planeta e, segundo as prospecções recentes (Shafiee e Topal, 2009), eles estarão presentes pelos próximos cem anos. A maioria das usinas termelétricas, as indústrias de alimentos, de transformação de materiais e de refino, assim como o transporte (terrestre, marítimo e aéreo) e algumas atividades domésticas (cozimento e calefação), empregam a conversão da energia química contida nos combustíveis fósseis em energia térmica. Este processo, que é comumente chamado de combustão, é necessário para o conforto e o desenvolvimento da humanidade.

Não obstante, a combustão também afeta de maneira negativa, ameaçando a vida humana e dos animais, pois, gera poluentes (tais como CO, NOx, SOx, UHCs, fuligem, etc.) que são prejudiciais para a saúde. Além disso, existe na comunidade científica e governamental a crescente preocupação de que a queima dos combustíveis fósseis seja a principal responsável pelo aquecimento global. Assim, considerando a importância da combustão e a possível diminuição das reservas dos combustíveis fósseis, a obtenção de processos de combustão que sejam extremamente eficientes e que levem à mínima produção de poluentes são os principais desafios no desenvolvimento de sistemas de combustão (Wang, 2004).

Estes sistemas de combustão são encontrados nas mais diversas aplicações da indústria e do transporte. Tanto nas refinarias quanto nas usinas termelétricas e de produção de alimentos manufaturados, equipamentos de combustão tais como fornos, caldeiras, câmaras de combustão interna e de turbina a gás constituem elementos indispensáveis no refino do petróleo, na geração de energia elétrica e no processamento de matérias primas (alimentos, metais, cerâmicos, polímeros, etc.). No que diz respeito ao transporte terrestre, marítimo e aéreo, os automóveis e os navios utilizam motores de combustão interna alternativos, enquanto que a propulsão dos aviões depende das câmaras

de combustão de turbinas a gás.

Assim, fornos e caldeiras são equipamentos de combustão nos quais a energia química contida no combustível é convertida, por meio da combustão, em energia térmica. Parte desta energia térmica, contida nos gases produtos da combustão, é transferida para as fronteiras do equipamento através dos mecanismos de transferência de calor de condução, convecção e radiação. Estas fronteiras são, geralmente, compostas de materiais refratários, tais como tubos de alta pressão e/ou tijolos.

De forma esquemática, seis principais componentes claramente identificados e diferenciados (Baukal, 2004) são encontrados em fornos e caldeiras aquatubulares, cujo esquema representativo é mostrado na Figura 1.1. O primeiro é o queimador, dispositivo empregado para garantir a reação do combustível com oxidante, de forma a converter a energia química contida no combustível em energia térmica. A energia contida nos produtos da combustão, gerados da queima destes reagentes, são aproveitados pelos dutos aquatubulares (habitualmente chamado de carga), que constitui o segundo componente. Na maioria das vezes, o queimador e a carga estão localizadas no interior da câmara de combustão, que é o terceiro componente. Os três componentes restantes são o recuperador de calor e os sistemas de controle de vazão e de emissões, cujas funções devem permitir uma operação eficiente do sistema e uma formação mínima de poluentes.

Destes seis componentes, o conjunto forno/queimador é aquele fundamental na operação de caldeiras e fornos de refino, pois constitui o espaço no qual o processo de combustão e a transferência da energia contida na mistura de combustível e de ar para a carga são realizados. Maximizar esta transferência sem aumentar a emissão de poluentes é o principal desafio para engenheiros e cientistas na área da combustão. Este desafio foi abordado durante décadas mediante o emprego de técnicas experimentais com condições de operação controladas (Spangelo, 2004). Em particular, experimentalistas buscaram simular o padrão do escoamento inerte no interior de fornos industriais mediante o emprego de “protótipos” de configurações geométricas reduzidas. Embora a física complexa no interior de um forno real (o qual envolve combustão, radiação, formação de poluentes, etc.) tenha sido simplificada, estes obtiveram resultados que permitiram conhecer com maior detalhe o padrão do escoamento. No entanto, a análise do escoamento reativo de fornos industriais utilizando queimadores protótipos é de realização complexa. Isto ocorre pois, para garantir a “similaridade”, os números de Reynolds e Damkohler devem ser inalterados, o que é praticamente impossível. Assim, algum tipo de escalonamento deve ser realizado. Tipicamente, equipamentos de combustão são escalonados

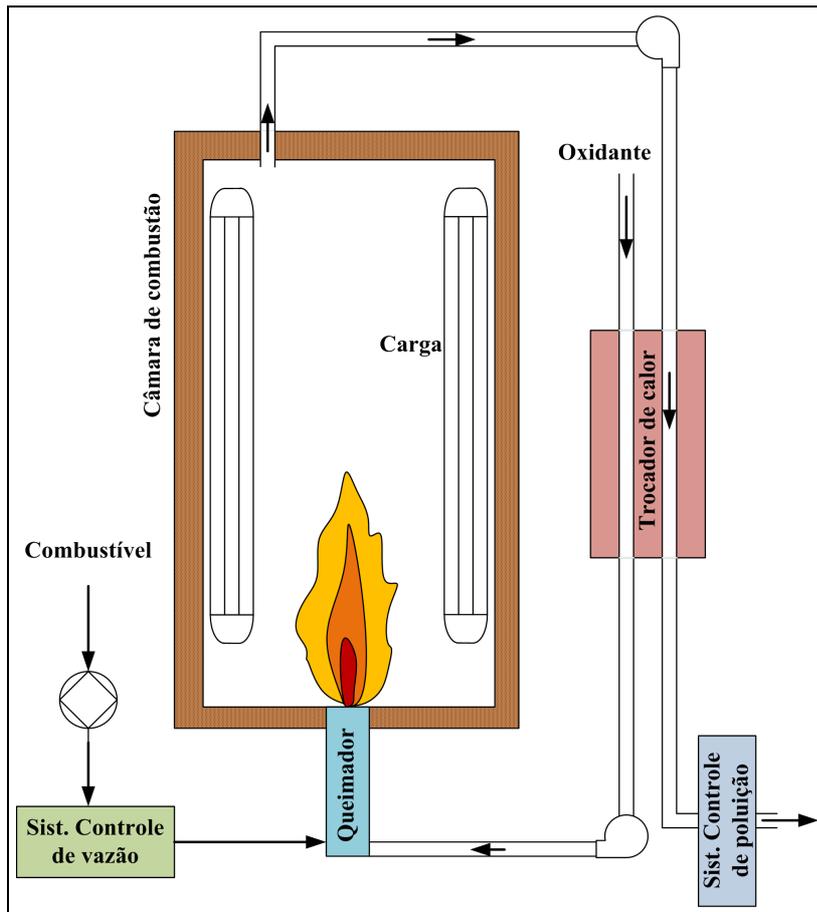


Figura 1.1: it Esquema simplificado de um sistema de combustão de fornos e caldeiras.

utilizando o método de “velocidade constante” ou “fluxo constante”.

Na atualidade, a maioria dos desenvolvimentos de equipamentos de combustão mediante a experimentação é realizada através do emprego de queimadores simples em escala real. Este método frequentemente produz um sistema de combustão que funciona bem na operação industrial. Não obstante, o emprego de queimadores múltiplos que operam no interior dos fornos e caldeiras produz emissões maiores (NO_x , fuligem, etc.) do que as evidenciadas com um único queimador. Outros problemas, como a de interação de chamas, podem ser observados. As chamas de queimadores individuais podem se juntar e, desta forma, a altura do envelope de chama é incrementada de maneira considerável. Isto ocorre em particular, quando a distância entre os queimadores não é suficientemente grande para que os queimadores operem de forma autônoma. Além disso, o escoamento em um ambiente de operação pode ser muito diferente daquele obtido no laboratório. A experimentação de equipamentos de combustão em escala real é excessivamente cara, com custos da ordem de dezenas de milhões de dólares (Baukal Jr. *et al.*, 2001).

Mais recentemente, a Dinâmica dos Fluidos Computacional [do inglês *Computational Fluids Dynamics, CFD*] como ferramenta numérico-computacional constitui a alternativa mais plausível na análise e no projeto de equipamentos de combustão em escala industrial. Esta ferramenta compreende a análise, mediante a simulação assistida por computador, de escoamentos que podem envolver a fluidodinâmica, a transferência de calor e de massa, a combustão e outros fenômenos associados, tais como a radiação e a formação de emissões poluentes (Versteeg e Malalasekera, 2007).

No caso da análise e projeto de sistemas de combustão, a Dinâmica dos Fluidos Computacional é atualmente empregada no desenvolvimento de novos equipamentos. Assim, é possível obter um modelo computacional em escala real e com um baixo custo quando comparado com aqueles das montagens experimentais. Assim é plausível obter uma ampla gama de resultados quantitativos e qualitativos em condições de funcionamento do conjunto forno/queimador, que vão desde aquelas de operação “padrão”, até as mais restritivas. Inclusive, é factível abordar, no contexto do CFD, problemas críticos oriundos da combustão tais como a extinção, reignição, detonação, explosão, vibração, acústica, etc.

No entanto, a universalização de seu uso como ferramenta de projeto é limitada, em particular, pelo desenvolvimento de modelos que descrevam as interações entre turbulência, combustão, radiação e formação de emissões poluentes. Além disso, o grau de realismo dos resultados obtidos está diretamente relacionado à capacidade preditiva destes modelos empregados. É esta capacidade preditiva que constitui o calcanhar de Aquiles das simulações.

A tecnologia da Dinâmica dos Fluidos Computacional envolve a integração de três partes. A primeira parte corresponde aos modelos físicos, que consistem em um conjunto de equações de transporte de massa, quantidade de movimento e energia, além das equações de estado, de turbulência, das reações químicas, da radiação, da formação de poluentes (NO_x, SO_x, fuligem), etc. A segunda parte corresponde a uma discretização das equações de transporte para resolver estes modelos físicos. Para este fim, a uma série de abordagens ou métodos de solução tais como volumes finitos, elementos finitos, ordenadas discretas, montecarlo, etc., podem ser empregadas. A terceira parte é a discretização do domínio computacional, solução do sistema algébrico e o pós-processamento dos resultados numéricos.

Uma vez que existe, nas indústrias, uma necessidade de minimizar o custo operacional de fornos e caldeiras buscando uma maior eficiência energética, assim como uma diminuição das emissões de poluentes, o desenvolvimento de equipamentos de combustão que apresentem um desempenho ótimo é um dos

grandes desafios industriais na atualidade.

No entanto, a grande complexidade envolvida na descrição dos fenômenos físicos-químicos, assim como as limitações computacionais ainda presentes na atualidade, constituem os principais problemas no emprego da Dinâmica dos Fluidos Computacional em equipamentos de combustão. Smith e Webster (2002) discutem as questões mais importantes que limitam a aplicação do CFD na solução dos problemas industriais envolvendo a combustão:

- **Compreensão limitada da física da combustão em escoamentos turbulentos**, que envolve as incertezas da cinética das reações químicas, a natureza caótica da turbulência e da mistura turbulenta e de suas interações não lineares. Outros aspectos também contribuem para esta limitação, tais como (i) a formação/consumo da fuligem, (ii) as complexidades na determinação das propriedades radiantes dos gases, (iii) o transporte e vaporização de combustíveis líquidos (gotículas), etc.
- **A grande disparidade nas escalas de comprimento e de tempo**. A dificuldade computacional provém, principalmente, da grande disparidade nas escalas de comprimento e de tempo presentes em um processo de combustão turbulenta. Por exemplo, o escoamento no interior dos equipamentos de combustão é geralmente turbulento, apresentando grandes valores de escalas de comprimento integral, da ordem das dimensões do equipamento. Por outro lado, a cinética de combustão, que envolve até centenas de espécies químicas e milhares de reações elementares, envolve escalas que vão desde microsegundos até vários segundos. Para capturar todas as características responsáveis pela transferência de quantidade de movimento, precisa-se resolver o escoamento em escalas de comprimento menores do que a escala de Kolmogorov, tais como a escala de Batchelor [escala de Kolmogorov sobre o inverso da raiz quadrada do número de Schmidt, (Fox, 2003)], o que é necessário para descrever o transporte de das espécies químicas.
- **Dificuldade na validação de códigos CFD em equipamentos de combustão**. Devido, principalmente, ao alto custo na montagem experimental de um conjunto forno/queimador em escala real e, também, à dificuldade em obter medições suficientemente detalhados para a validação dos modelos em situações complexas.
- **Modelos físicos foram desenvolvidos com base em resultados obtidos em equipamentos de combustão de escala laboratorial**. Os quais nem sempre cobrem os parâmetros de operação comuns na indústria (pressões elevadas, tipo de combustível, etc.).

Na atualidade, especial atenção vem sendo dada pela comunidade científica à interação existente entre a combustão, radiação térmica e a produção da fuligem. De fato, nas regiões de elevadas temperaturas no interior de combustores a fuligem, que é formada pela combustão incompleta, exerce um grande impacto na radiação térmica, levando a uma mudança significativa no campo de temperatura.

Assim, são evidentes as limitações existentes da aplicação de CFD em equipamentos de combustão. A simulação que considera, de maneira simultânea, a dinâmica dos fluidos, a cinética química detalhada e todos fenômenos de transferência de energia e de espécies químicas, requer a resolução de centenas de equações diferenciais parciais acopladas em milhares de volumes de controle elementares. Para contornar esta limitação, muitos modelos de CFD empregam um número limitado de equações para descrever a transformação química de apenas alguns dos elementos representativos do processo de combustão. Estes tipos de modelos podem ser capazes, em algumas circunstâncias, de prever os principais parâmetros aerotermoquímicos, não obstante, podem vir a falhar, por exemplo, na descrição da formação de NO_x e da fuligem.

Adicionalmente, no que diz respeito à combustão, há carência de experimentos detalhados de validação de modelos físicos que consideram a medida simultânea de diversas propriedades termoquímicas e de seus gradientes. No que se refere à aplicação de CFD em equipamentos de combustão em escala industrial, os resultados experimentais são escassos e, muitas vezes, de disponibilidade restrita. Desta forma, os resultados obtidos com CFD poderiam conduzir a erros de diversos tipos, que aparecem como consequência das incertezas e das hipóteses utilizadas para a derivação de modelos (turbulência, combustão, radiação, etc.). Ainda assim, a aplicação da Dinâmica dos Fluidos Computacional permite explorar parâmetros de operação de sistemas de combustão, em particular, aqueles para os quais o custo da realização de ensaios é elevado. Isto permite reduzir o ciclo de desenvolvimento destes equipamentos, melhorar a eficiência de operação e estender o ciclo de vida. Como consequência são reduzidos os custos de projeto, operação e manutenção.

1.2

Delimitação do Problema

A maioria dos equipamentos de combustão de porte industrial opera em regime turbulento, sendo encontrados em diversos processos cujo impacto econômico é importante. No âmbito da engenharia mecânica, o incremento da eficiência de combustão, a predição da transferência de calor e a redução da

formação de poluentes correspondem aos principais focos de interesse. Estes objetivos são de difícil alcance pois, entre outras razões, as reações químicas envolvidas no processo de combustão são funções não lineares das propriedades termoquímicas da mistura.

Dentre os desafios recentes no estudo da combustão turbulenta, um dos principais é o desenvolvimento de modelos matemáticos que descrevam adequadamente os fenômenos físico-químicos que acontecem na queima de combustíveis. Uma vez que as propriedades aerotermoquímicas (i.e., estrutura da chama, energia transferida, emissões poluentes, etc.) dependem fortemente das características aerodinâmicas e da mistura entre os reagentes e os produtos de combustão, uma correta descrição das interações existentes entre a combustão e a turbulência, assim como da mistura de reagentes e produtos de combustão, permite determinar todas as propriedades envolvidas neste processo. Além disso, há interesse crescente em se desenvolver dispositivos de combustão que causem o menor impacto ambiental possível. Para isto, é necessário se implantar novas tecnologias, capazes de reduzir significativamente a emissão de poluentes. Esta tendência é motivada pela necessidade de se respeitar as mudanças nas legislações ambientais nacional e internacional. Note-se que estas mudanças são fruto de uma demanda da sociedade diante da percepção dos riscos e também, da tendência de criação de barreiras tecnológicas/ambientais como forma velada de protecionismo mercantil.

Outros dos problemas abertos, no que diz respeito à operação destes equipamentos, são a transferência de calor por radiação, a formação da fuligem e o transporte e vaporização de combustível líquido em forma de gotículas. Estes fenômenos físicos exercem forte influência sobre os processos de combustão. Assim, serão levados em conta neste estudo as interações existentes entre estes fenômenos, bem como sua influência sobre a predição do processo aerotermoquímico induzido pela combustão turbulenta. Em particular, modelos que permitem descrever adequadamente as propriedades radiantes dos gases produtos da combustão e da fuligem, são de extrema importância. De fato, a radiação afeta diretamente a estrutura da chama e, por conseguinte, a termoquímica das reações, alterando desta forma, a formação de poluentes tais como óxidos de nitrogênio e fuligem. Cabe ressaltar que a radiação é causada pela emissão de energia na forma de ondas eletromagnéticas (ou fluxo de fótons) em uma ampla distribuição de bandas espectrais (Versteeg e Malalasekera, 2007). No caso particular de sistemas práticos de combustão, a radiação é emitida em comprimentos de onda localizados dentro do espectro infravermelho ($0,7 - 100 \mu\text{m}$). A energia máxima que é emitida por um corpo negro a temperatura ambiente se encontra ao redor de $10 \mu\text{m}$,

enquanto que ao se superar 1.000 – 1.500 K, uma fração apreciável de energia radiante é emitida em comprimentos de onda no espectro visível (0,2 – 0,7 μm)

Muitas vezes, a radiação térmica é negligenciada na simulação em CFD, pois esta envolve um sobrecusto computacional frequentemente injustificável. De fato, em alguns equipamentos de combustão, tais como câmaras de combustão de motores de combustão interna e turbinas a gás, a radiação exerce pouca influência sobre os demais processos de transferência de calor (difusão e advecção). Por exemplo, as temperaturas máximas alcançadas pela mistura dentro de uma câmara de combustão interna de ignição por centelha acontecem sobre uma pequena fração do tempo do ciclo térmico. No caso de turbinas a gás, as temperaturas máximas são menores do que as dos fornos e caldeiras. Isto permite negligenciar este fenômeno na análise e projeto destes equipamentos, cujo objetivo primordial é conversão direta da energia química em energia mecânica sob forma de pressão e/ou velocidade.

No entanto, em fornos e caldeiras, a radiação térmica é um mecanismo importante na transferência de energia térmica, pois redistribui a energia térmica através das interações entre (i) parcelas de fluido, (ii) as paredes e, (iii) o fluido com as paredes.

Este trabalho aborda a modelagem e simulação, através da Dinâmica dos Fluidos Computacional, do processo da combustão turbulenta de equipamentos de combustão de escala laboratorial. Esta modelagem é realizada levando-se em conta os fenômenos de radiação térmica e a sua interação na formação/consumo da fuligem. Para este fim é empregada a abordagem das Equações Médias de Navier-Stokes (*Reynolds Averaged Navier-Stokes, RANS*), junto com a combustão turbulenta de chamas não pré-misturadas adicionando modelos que descrevem a radiação, a formação da fuligem e o transporte e vaporização de gotículas de combustível (*droplets*).

1.3

Objetivo

O presente estudo tem por objetivo principal a caracterização, mediante a Dinâmica dos Fluidos Computacional, dos fenômenos de combustão turbulenta não pré-misturada de queimadores e equipamentos de combustão de escala laboratorial que são empregados nas universidades e centros de pesquisa. Atenção particular é dada aos modelos que descrevem as propriedades radiantes globais e espectrais, dos gases produtos de combustão e da fuligem. Assim, o estudo tem por intuito identificar aqueles modelos que permitem simular com maior precisão o transporte da energia radiante no interior do

sistema forno/queimador. A contribuição original do presente trabalho é a análise paramétrica dos modelos empregados por comparação com resultados analíticos e experimentais. Além disto, faz parte dos objetivos deste trabalho apontar linhas de desenvolvimentos de modelos mais promissores, que permitam liberar os gargalos existentes.

Para este fim, serão empregados, como meio de compração dos modelos de propriedades radiantes, dois queimadores não pré-misturados de porte laboratorial distintos:

- De Endrud (2000), que queima metano e ar enriquecido com oxigênio.
- De Nakamura *et al.* (2011) que queima o querosene com oxigênio puro.

1.4

Organização do trabalho

O presente trabalho é dividido em sete capítulos. No segundo capítulo, apresentam-se os resultados da pesquisa bibliográfica abordando o estudo experimental e computacional da caracterização das propriedades aerotermoquímicas e radiantes que envolve a combustão turbulenta de combustíveis fósseis, líquidos e gasosos, em queimadores de porte laboratorial e industrial. Nesta revisão bibliográfica, atenção especial é dada em estudos numéricos e experimentais que contemplam a radiação, a formação da fuligem e a interação entre ambos fenômenos.

O terceiro capítulo apresenta, dentre da abordagem RANS, a formulação matemática das equações de transporte (massa, quantidade de movimento, energia e espécies) para fluidos newtonianos compressíveis que, junto com a equação de estado e formulações complementares (leis de Newton, Fourier e Fick), representam o estado do escoamento. Em seguida, são detalhados os principais modelos de turbulência e combustão turbulenta não pré-misturada. Ênfase especial é dada no estado da arte dos modelos de transporte radiante de um meio participante (gas/fuligem) e de produção da fuligem, com foco nos modelos que calculam as propriedades cinza e espectral dos gases produtos da combustão e da fuligem. Finalmente, a descrição que representa no referencial lagrangeano a interação de gotas de combustível líquido com ambiente gasoso, tal como os encontrados nos processos de combustão turbulenta de “sprays”, é também contemplada. Neste caso, foi considerada apenas o Modelo de Fase Discreta [*Discrete Phase Model*, (DPM)] para a caracterização do transporte e vaporização de gotículas (*droplets*).

O capítulo quatro desenvolve uma descrição pormenorizada do Radcal, programa desenvolvido em Fortran por Grosshandler (1993), com o objetivo de

calcular mediante a abordagem de banda estreita [*Narrow Band Model*, NBM], as propriedades radiantes espectrais dos gases produtos da combustão e da fuligem. Além disso, a descrição da implementação do acoplamento do Radcal com o FluentTM é também contemplada neste capítulo. Assim o Radcal, junto com os demais modelos de propriedades radiantes, são em seguida, comparados com resultados de Linha por Linha [*Line By Lyne*, LBL] no caso de radiação unidimensional entre placas planas paralelas e infinitas (Mossi, 2011).

São apresentados e discutidos no quinto capítulo, os resultados correspondentes ao queimador não pré-misturado de Endrud na combustão de metano e ar enriquecido com oxigênio. O estado dos modelos de propriedades radiantes dos gases produtos da combustão e da fuligem é realizado mediante a comparação com dados experimentais de Wang *et al.* (2002), Wang (2004) e Wang *et al.* (2005).

No sexto capítulo, a comparação com os dados experimentais do queimador de querosene/oxigênio Nakamura *et al.* (2011), permite fazer uma análise crítica da capacidade preditiva da modelagem da combustão, no que diz respeito às propriedades aerotermoquímicas, radiação e formação de fuligem, que apresentam os códigos atuais de CFD.

Finalmente, no sétimo e último capítulo são apresentadas as conclusões e recomendações para trabalhos futuros.