

2

Revisão Bibliográfica

O estudo numérico da combustão turbulenta em queimadores mediante a aplicação da dinâmica dos fluidos computacional é uma tarefa complexa de ser realizada, pois abrange um conjunto de ferramentas teóricas, matemáticas e numéricas que são necessárias para a descrição detalhada dos fenômenos físico-químicos que acontecem no interior destes equipamentos. Isto, aliado ao elevadíssimo custo computacional, às limitações dos modelos físicos e à escassa informação experimental, coloca este estudo na fronteira do conhecimento disponível. Assim, ainda não é possível se caracterizar de modo completo e abrangente os diferentes processos aerotermodinâmicos envolvidos na combustão turbulenta de hidrocarbonetos.

Não obstante, é imprescindível desenvolver novas tecnologias que sejam capazes de mitigar, dos pontos de vista energético, ambiental e de segurança, os efeitos negativos da aplicação da combustão turbulenta nos setores industrial e de geração de energia. Assim, estão sendo desenvolvidos, na atualidade, diversos modelos que permitem descrever os fenômenos aerotermodinâmicos presentes na combustão turbulenta. Para o caso particular de sistemas forno/queimador em escala laboratorial e industrial, especial ênfase tem sido colocada em modelos que descrevem a radiação, a produção da fuligem, e a interação entre elas, pois estes fenômenos participam de maneira essencial no processo de conversão e transporte da energia.

A seguir, é relatada uma revisão bibliográfica referente a estudos realizados ao longo dos últimos 15 anos cujo objetivo principal tenha sido orientado à caracterização numérica e/ou experimental dos processos aerotermodinâmicos decorrentes da combustão turbulenta não pré-misturada em sistemas forno/queimador em escala laboratorial e industrial. Em particular, especial atenção será dada a trabalhos numéricos e experimentais que descrevem a radiação e sua interação com a fuligem.

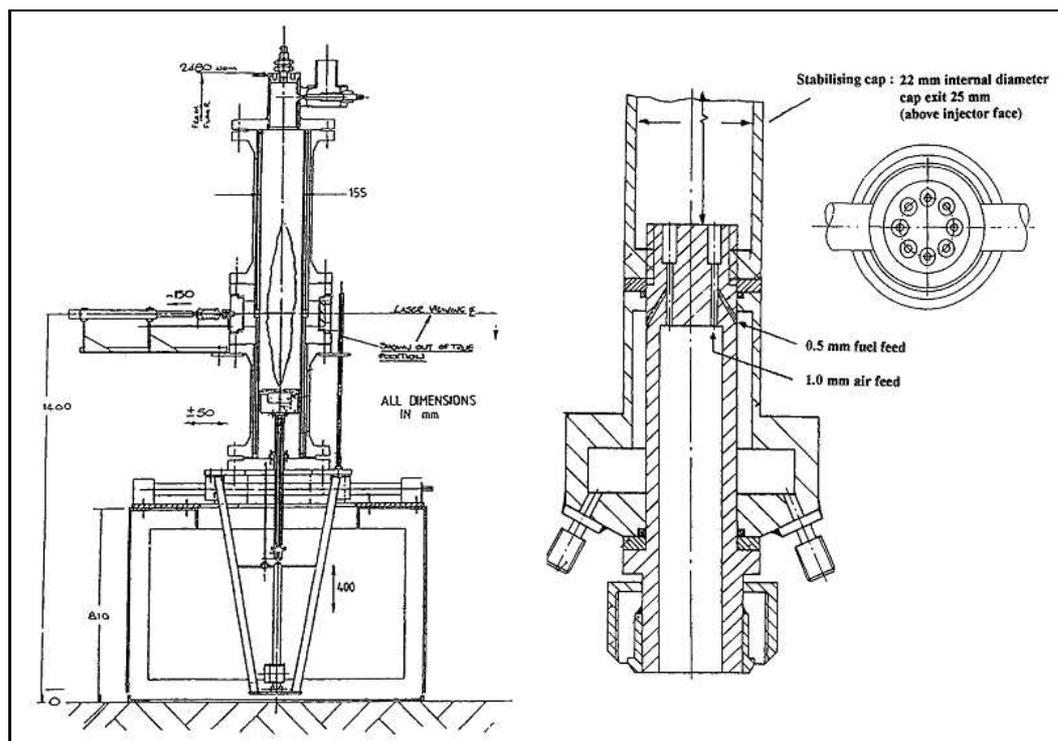


Figura 2.1: Diagrama esquemático da bancada experimental e do queimador “*twin-fluid*” (Fisher e Moss, 1998).

2.1

Estudos Experimentais de Queimadores Não Pré-Misturados

Fisher e Moss (1998) conduziram um estudo experimental de um queimador laboratorial cilíndrico de querosene líquido e ar que foi projetado por Young *et al.* (1994). A Figura 2.1 mostra o detalhe construtivo deste queimador. Utilizando tal dispositivo, mapas de fuligem e de propriedades relacionadas a este poluente foram obtidos para duas pressões de operação. Para isto, termopares de fio fino, micro-sonda de amostragem quartzo e analisador óptico espectral foram utilizados para medir a temperatura, fração de mistura e irradiância espectral, respectivamente. Além disso, a técnica de extinção de laser *He-Ne*, seguida de reconstrução tomográfica, foi utilizada para obter a fração volumétrica da fuligem.

A Figura 2.2 mostra alguns dos resultados obtidos a 2 bar por Fisher e Moss (1998), a combustão turbulenta de “*spray*”, os quais incluem os perfis radiais em diversas coordenadas axiais da fração de mistura, da temperatura, da fração volumétrica da fuligem e da radiação espectral. Os autores também investigaram, para uma vazão de querosene líquido constante (22,5 g/min), o comportamento da radiação total e da formação da fuligem como função da pressão do sistema. Para isto, foi mantida constante a carga de ar,

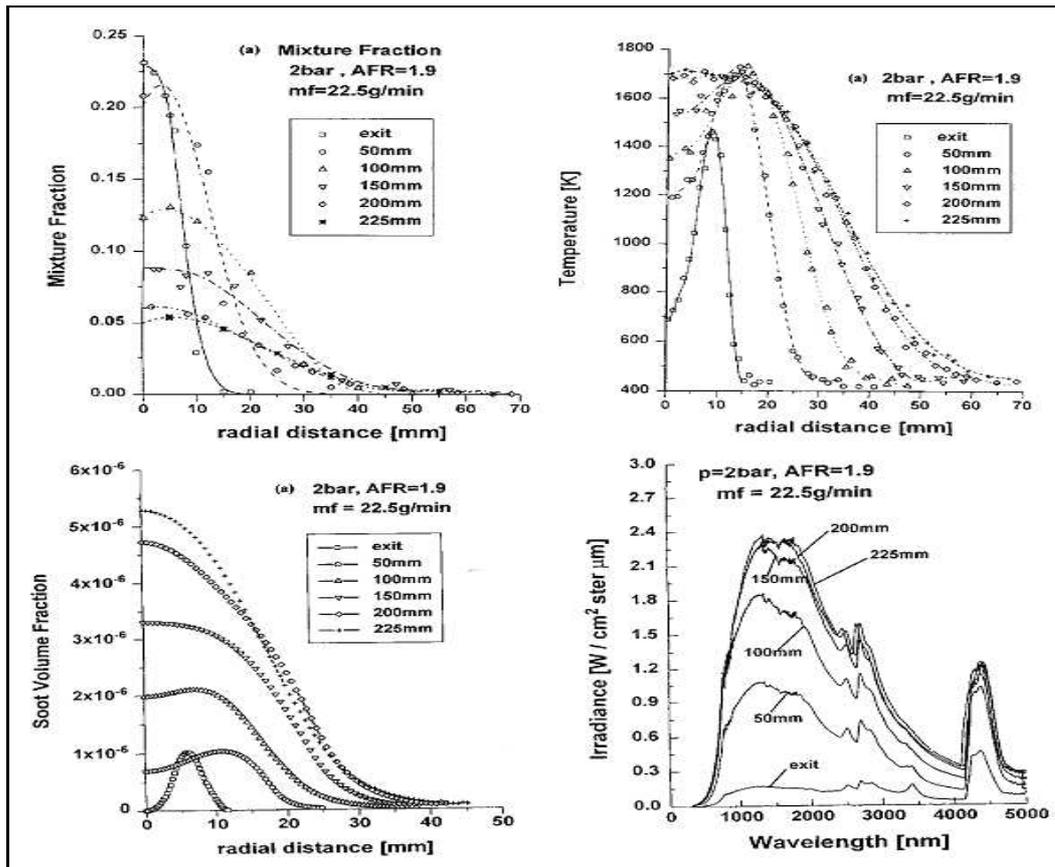


Figura 2.2: Perfis de fração de mistura, temperatura, fração volumétrica da fuligem e irradiância obtidos por Fisher e Moss (1998) no queimador de querosene líquido e ar a 2 bar.

$\dot{m}_{air} \sqrt{T}/p$, o que leva a um incremento da razão ar/combustível no atomizador [Air-Fuel Ratio, AFR], que é linear a pressão. Os resultados obtidos mostram uma dependência linear com a pressão, da fração volumétrica da fuligem no eixo de simetria e da intensidade de radiação total.

Resultados experimentais em um queimador industrial de gás/óleo de 15 MW foram obtidos por Colson *et al.* (1999). O esquema do conjunto forno/queimador é mostrado na Figura 2.3. Foi estudada a influência que exerce a estrutura da chama turbulenta sobre a produção de óxidos de nitrogênio, NO_x . Assim, os perfis de temperatura, velocidade e concentração de espécies químicas estáveis (i.e., CH_4 , C_2H_6 , C_2H_4 , C_2H_2 , CO , CO_2 , O_2 e NO_x) foram medidos para duas configurações de chamas que correspondem a níveis mínimos e máximos de NO_x na saída do conjunto forno queimador.

Os instrumentos de medição utilizados por Colson *et al.* (1999) foram um analisador FTIR (*Fourier Transform Infrared Spectroscopy*) para medição de concentração de espécies CH_4 , C_2H_6 , C_2H_4 , C_2H_2 , CO , CO_2 e NO_x , enquanto que o oxigênio foi medido utilizando um analisador paramagnético.

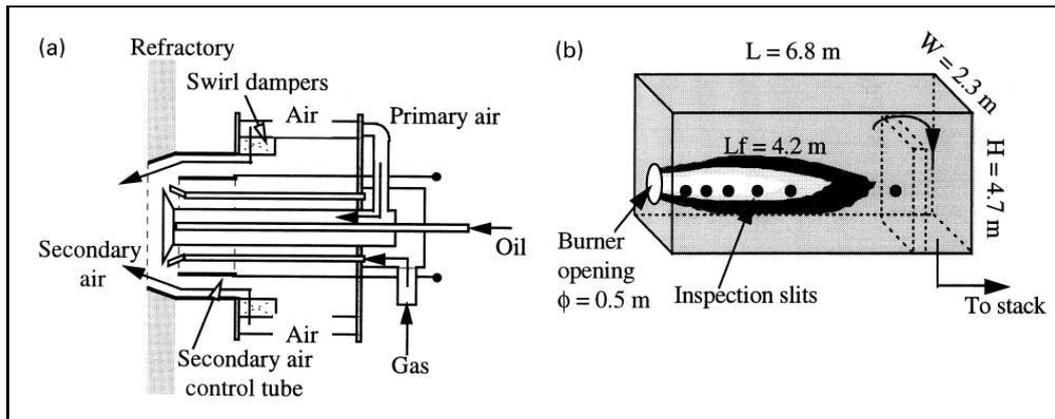


Figura 2.3: Diagrama esquemático do (a) queimador Elco-Mat RPD60 e, (b) forno de teste VUB (Vrije Universiteit Brussel) de 20 MW (Colson *et al.*, 1999).

As medidas de velocidade e temperatura foram obtidas através de tubo Pitot e de um termopar de platina/rodio. Figura 2.4, apresenta os perfis radiais de temperatura e concentrações de espécies químicas para a posição $x/D = 0,26$.

Os resultados obtidos para a combustão de gás natural, em duas posições ao longo do queimador, mostram que a temperatura na região central, no caso de máximo NO_x , é cerca de 200 K maior do que aquela observada para o caso de mínimo NO_x . Além disso, para o caso de máximo NO_x foi evidenciado, em ambas posições axiais do queimador, a presença de quantidades moderadas de O_2 e baixas concentrações de C_2H_2 e C_2H_4 na região central do queimador. Para o caso de mínimo NO_x , no entanto, foram medidas pequenas concentrações de O_2 e elevadas concentrações de C_2H_2 e C_2H_4 . Assim, conclui-se que o mecanismo predominante na formação NO_x , no caso de máximo NO_x , é o de NO_x -térmico, devido às elevadas temperaturas e à maior presença de O_2 encontradas na região próxima ao eixo de simetria. Por outro lado, o mecanismo NO_x -imediato parece ser aquele dominante no caso de mínimo NO_x , devido (i) às baixas temperaturas encontradas na região vizinha ao eixo longitudinal, (ii) à ausência de concentrações de O_2 e (iii) à presença de elevadas concentrações de C_2H_2 e C_2H_4 .

Recentemente Köhler *et al.* (2011) estudaram o processo de combustão turbulenta não pré-misturada em um queimador laboratorial de etileno e ar, tal como mostrado na Figura 2.5. Este queimador foi especialmente projetado pelos autores para permitir medições da produção da fuligem a fim de avaliar modelos de formação/consumo deste poluente. Diagnósticos ópticos foram empregados: a incandescência induzida por laser bidimensional (LII-2D), a espectrometria anti-Stokes coerente de deslocamento vibracional (SV-CARS) e a velocimetria por imagens de partículas (PIV), para caracterizar

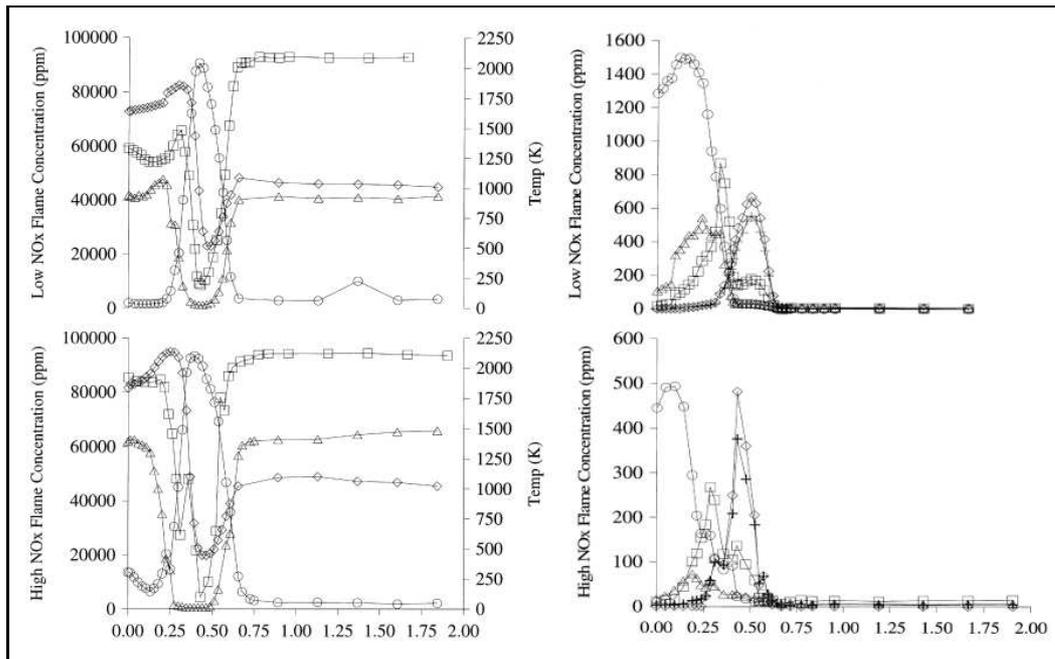


Figura 2.4: Evolução da temperatura e espécies químicas estáveis obtida por Colson *et al.* (1999) como função de distância radial, r/D , para a posição longitudinal $x/D = 0,26$. L. esquerdo: Perfis de CO_2 (\square), $O_2/2$ (\circ), $NOx \times 10^3$ (\triangle) e T (\diamond). L. direito: Perfis de $CO/50$ (\circ), C_2H_2 (\triangle), C_2H_4 (\square), $CH_4/200$ (\diamond) e $C_2H_6/10$ (+).

simultaneamente a fração volumétrica da fuligem, a temperatura e a velocidade do escoamento.

A Figura 2.6 mostra os campos e perfis de fração volumétrica da fuligem obtidos por Köhler *et al.* (2011). Uma grande variação, de até duas ordens de grandeza, pode ser percebida nos valores máximos dos campos instantâneo e médio de fração volumétrica da fuligem (ver Figuras 2.6c e 2.6d). Além disso, foi mostrado que a formação da fuligem parece ser muito diferente daquela que ocorre em chamas laminares.

Nakamura *et al.* (2008) e Nakamura *et al.* (2011) levantaram uma extensa base de dados experimentais da combustão de um “spray” de querosene e oxigênio no interior de um equipamento laboratorial pressurizado. A Figura 2.7 mostra a instalação experimental do sistema queimador/câmara de combustão. O principal objetivo deste estudo foi descrever a influência que exerce a pressão do sistema sobre (i) a estrutura da chama, (ii) a formação da fuligem e (iii) o comportamento do “spray” de querosene injetado a vazão constante. Foram empregadas as técnicas de espectroscopia, para visualizar a envelope da chama, método de pirometria de duas cores, para estimar a temperatura dos gases, anemometria de Fase-Doppler (*Phase Doppler Anemometry, PDA*), para medir os diâmetro e velocidade das gotículas de querosene líquido, incan-

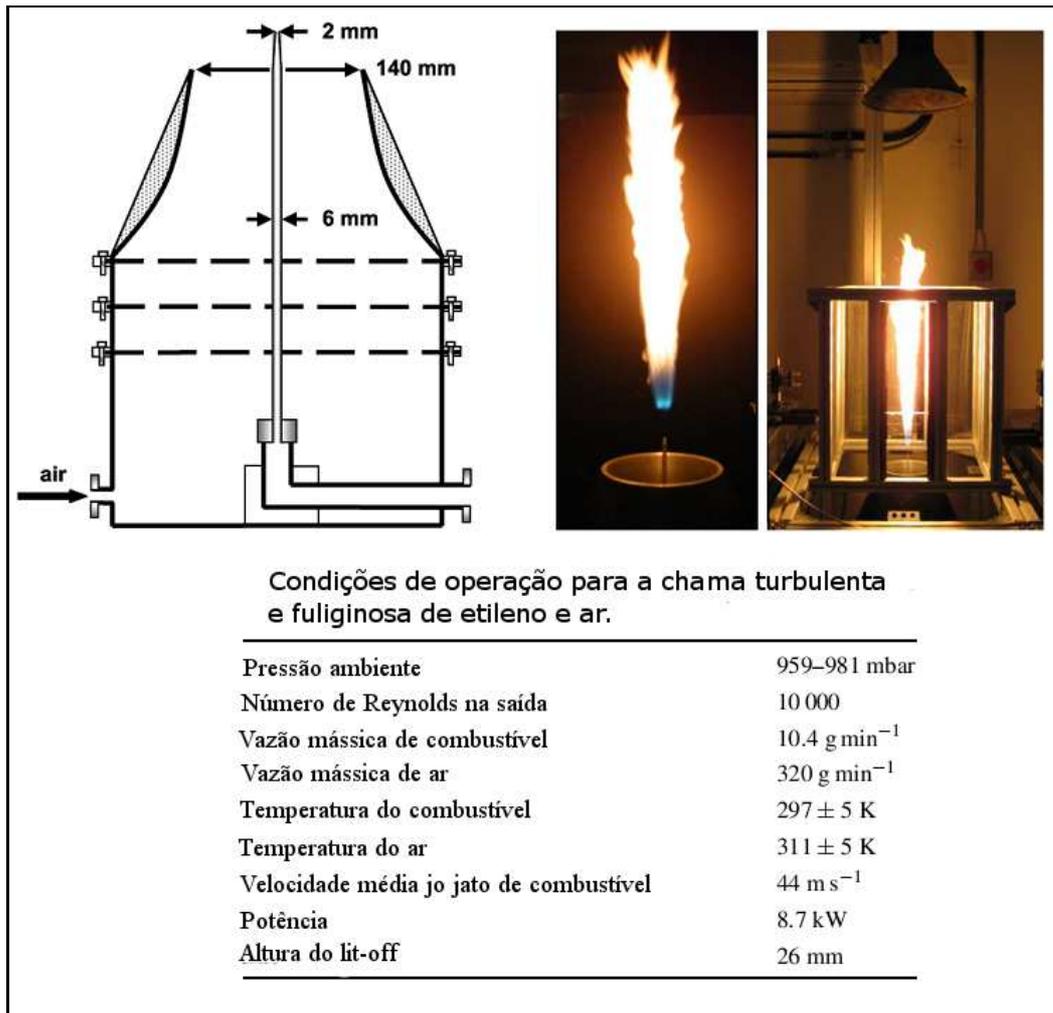


Figura 2.5: Diagrama esquemático, fotografias do funcionamento e dados do queimador de Köhler *et. al.* (2011).

descência induzida por laser (*Laser-induced Incandescence, LII*), para calcular as distribuições de fração volumétrica da fuligem e espalhamento Mie, para a visualização espacial de gotículas de querosene.

Os resultados de visualização do envelope de chama e da distribuição espacial das gotículas de querosene foram obtidos para pressões desde 0,1 até 1,0 MPa tal como mostrados na Figura 2.8. Nesta figura, é possível observar que o comprimento da chama é reduzido a medida que a pressão é incrementada até 0,5 MPa, permanecendo constante acima de 0,6 MPa. Um comportamento similar é observado na visualização de gotículas de querosene. Um decréscimo do comprimento e da largura da distribuição espacial destas ocorre conforme a pressão é incrementada até 0,5 MPa, como consequência do incremento com a pressão das forças do arrasto entre o meio contínuo e as gotículas. Além disso, foi evidenciado, para pressões acima de 0,6 MPa, uma forte dispersão das gotículas de querosene, formando assim quantidades apreciáveis de vapor

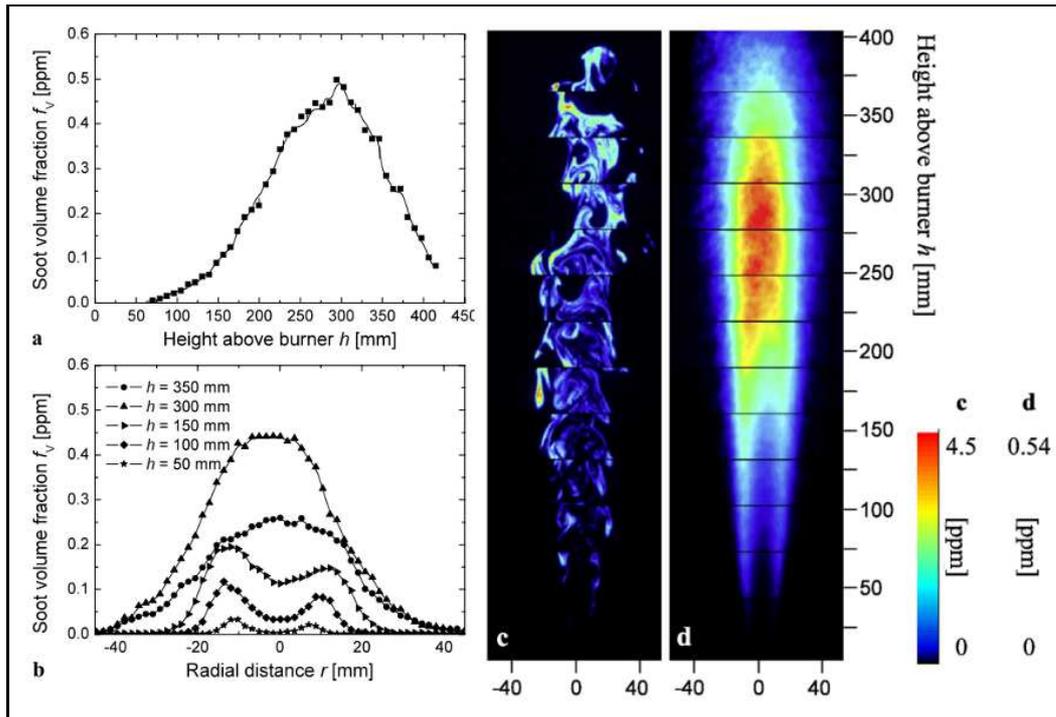


Figura 2.6: Fração volumétrica da fuligem obtidos do queimador de Köhler *et al.*, (2011). (a) perfil longitudinal no eixo de simetria, (b) perfil radial, (c) campo instantâneo e, (d) campo médio.

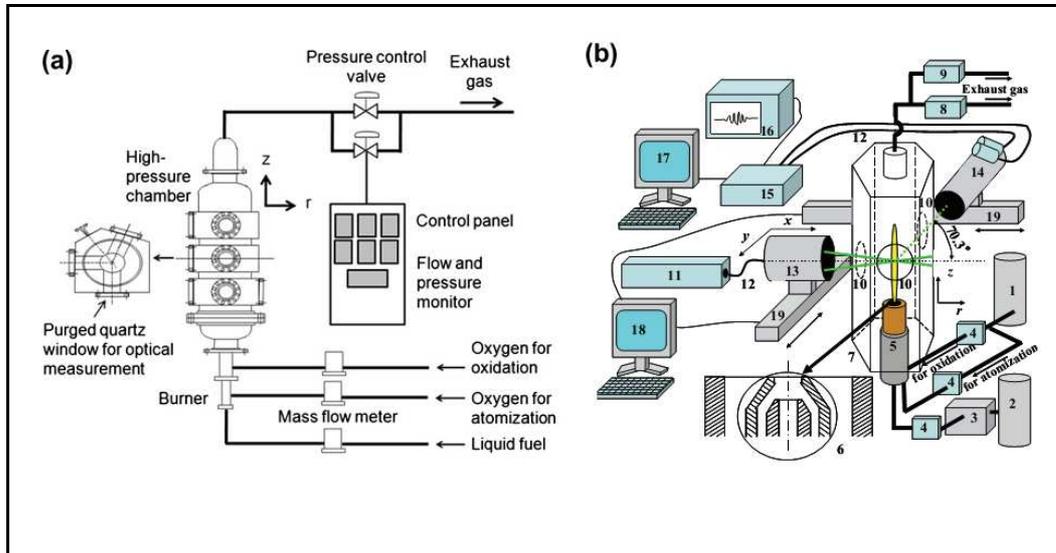


Figura 2.7: Diagrama esquemático (a) do sistema de fornecimento de reagentes e, (b) dos equipamentos utilizados na experimentação: 1.- tanque de oxigênio, 2.- tanque de Nitrogênio, 3.- tanque de combustível líquido, 4.- medidor de vazão, 5.- queimador 6.- atomizador twin-fluid, 7.- câmara de alta pressão, 8.- válvula de alívio, 9.- válvula de controle de pressão, 10.- janela de quartzo, 11.- laser de Argônio, 12.- fibra óptica, 13.- transmissor PDA, 14.- Receptor PDA, 15.- Processador de sinais, 16.- osciloscópio, 17.- PC para PDA, 18. PC para travessia e, 19.- trilho óptico. (Nakamura *et al.*, 2011).

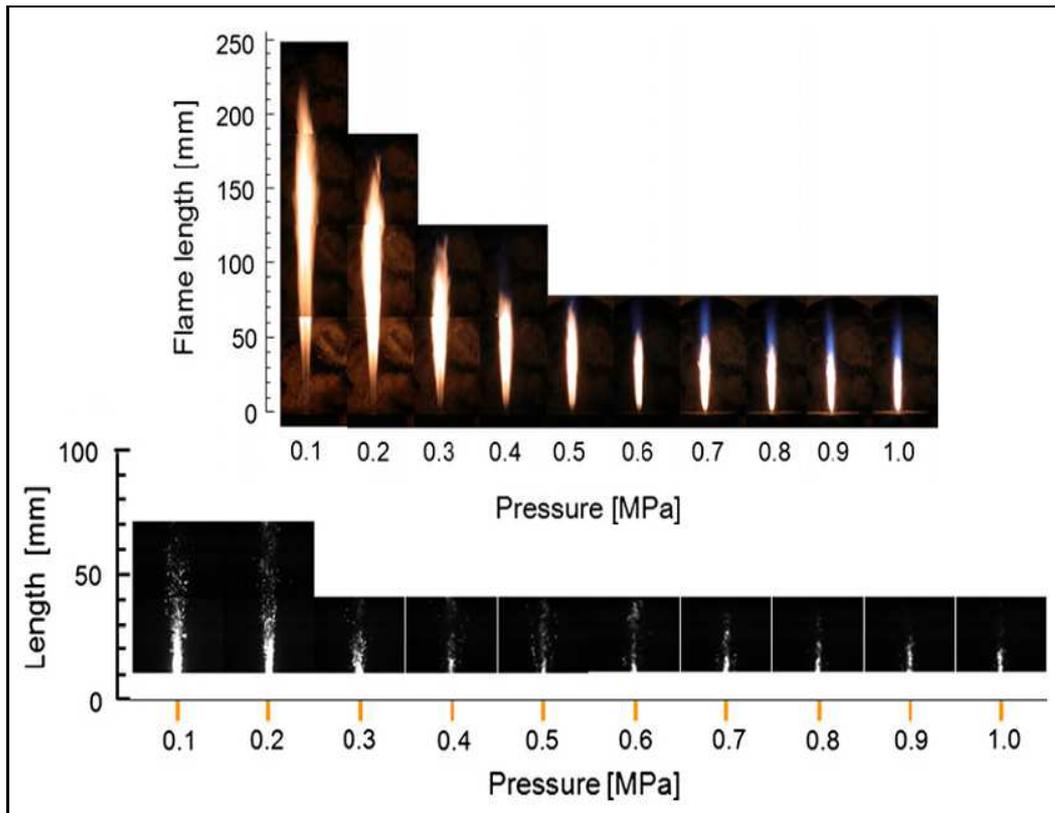


Figura 2.8: Visualização de chamas em “spray” (superior) e de gotículas de querosene (inferior) para faixas pressões entre 0,1 e 1,0 MPa (Nakamura *et al.*, 2011).

de combustível na região próxima ao queimador pois a taxa de vaporização é incrementada com o aumento da pressão.

A Figura 2.9 apresenta para pressões de 0,1 a 1,0 MPa, as distribuições longitudinais (Nakamura *et al.*, 2008; Nakamura *et al.*, 2011) da temperatura de gases, do diâmetro médio Sauter e da velocidade longitudinal das gotículas de querosene. Nesta figura é possível observar o aumento da velocidade longitudinal das gotículas de querosene e a diminuição no seu diâmetro médio de Sauter a medida que a pressão é incrementada. Além disso, foi evidenciado, como função da pressão, um comportamento não monotônico da temperatura ao longo do eixo de simetria que apresenta um mínimo em $z/L = 0,15$ para pressões maiores que 0,5 MPa. Segundo Nakamura *et al.* (2011) este resultado pode ser explicado com base nas distribuições longitudinais da velocidade longitudinal e do diâmetro médio Sauter. Assim, as pequenas gotas de combustível são vaporizadas e se misturam com o oxigênio, queimando na região próxima do injetor. É nesta região que a temperatura é incrementada, pois, existe oxigênio suficiente que é fornecido através da atomização. No entanto, com o incremento de z/L , a temperatura cai devido à carência de

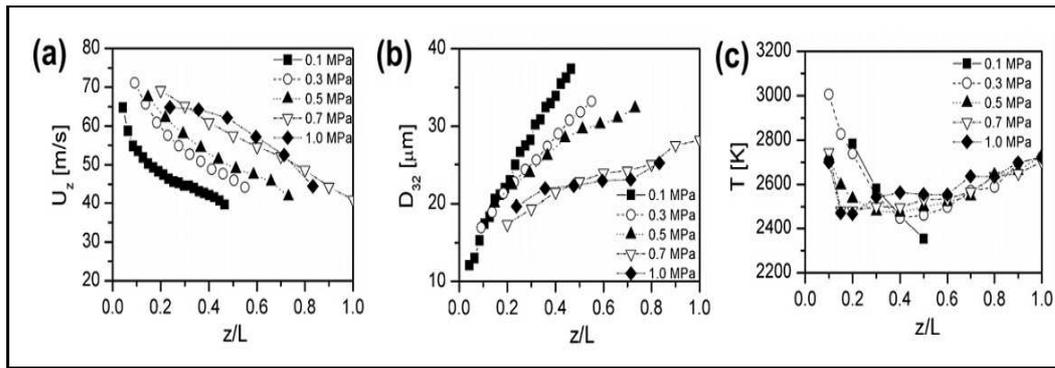


Figura 2.9: Distribuição longitudinal de (a) velocidade longitudinal das gotículas de querosene, (b) diâmetro médio Sauter e (c) temperatura média do gas, para pressões de de 0, 1, 0, 3, 0, 5, 0, 7 e 1, 0 MPa (Nakamura *et al.*, 2011).

oxigênio. A taxa de liberação de energia por reação é menor do a cedida às maiores gotículas para se vaporizar. Assim, quando esta taxa de liberação de energia por reação é igual ao calor latente de vaporização, a temperatura alcança o seu valor mínimo. Na região mais a jusante de, a temperatura é incrementada pois a liberação de energia pela reação torna-se predominante diante da perda de energia por vaporização, já que as gotículas maiores de combustível foram vaporizadas.

Além disso, Nakamura *et al.* (2011) mediram, ao longo da direção radial, a temperatura dos gases, o diâmetro médio Sauter, e a velocidade longitudinal das gotículas de querosene e a distribuição de gotas para 0, 1; 0, 3 e 0, 5 MPa. Finalmente, Nakamura *et al.* (2011) obtiveram para pressões de 0, 1 a 1, 0 MPa, a distribuição longitudinal da intensidade de radiação emitida pela chama em 516,5 nm, assim como as distribuições radiais de intensidade LII para três seções transversais. Estas medidas, que serão comparadas com os resultados da modelagem desenvolvida, representam o processo de transferência de energia radiante e a fuligem que é formada no interior da câmara de combustão.

2.2

Estudos Numéricos de Queimadores Não Pré-Misturados

Spangelo (2004) desenvolveu um estudo teórico, experimental e numérico da otimização de um sistema queimador/forno protótipo de 200 kW, cujo sistema de injeção de combustível e ar é mostrado na Figura 2.10. Para isto, foram utilizados propano/ar e metano/ar como reagentes e alto número de *swirl*, e a potência de operação do sistema abrangia a faixa de 80-240 kW. A otimização deste sistema foi realizada modificando-se parâmetros geométricos, tais como o arranjo dos injetores e o ângulo das palhetas do *swirler*.

Os resultados experimentais evidenciaram que a operação do queimador

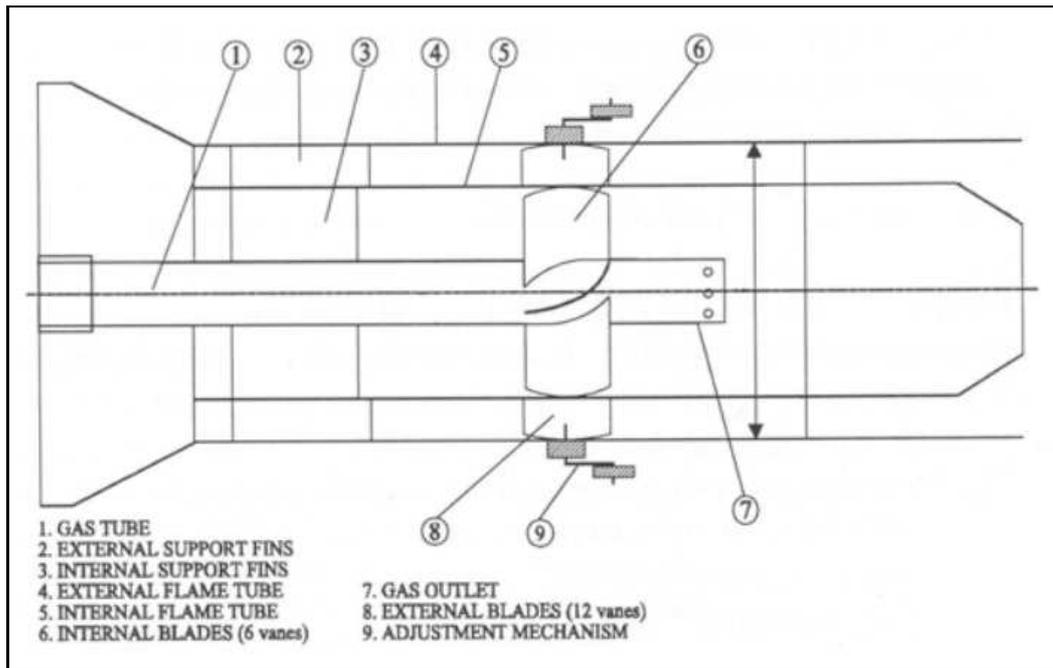


Figura 2.10: Ilustração esquemática do injetor protótipo de 200 kW (Spangelo, 2004).

otimizado (200 kW), operando com propano e ar e com excesso de oxigênio de 3%, forneceu emissões NO_x na faixa de 31 – 45 ppm (em base seca e normalizado a 3% O_2). Empregando-se metano como combustível, a concentração de NO_x após a otimização do queimador, para a potência de 120 kW, foi reduzida para 16 ppm.

O queimador otimizado (200 kW) foi em seguida empregado para dimensionar (*scaling*) queimadores de 370 e 20 kW, os quais foram ensaiados em duas configurações de fornos. A operação do primeiro queimador foi realizada em fornalha vertical, na faixas de operação de 300 a 500 kW. Para o segundo queimador, empregou-se uma câmara de combustão com potência compreendida entre 10 e 20 kW. O queimador de 370 kW apresentou uma ampla faixa de estabilidade, enquanto que a faixa de estabilidade do segundo queimador (20 kW) foi mais restrita.

O queimador de 20 kW foi simulado usando FluentTM, considerando-se uma malha 2-D de 21.000 volumes de controle e três modelos de turbulência, o $k-\varepsilon$ padrão [do inglês *Standard k-ε*], o $k-\varepsilon$ renormalizado [do inglês *Renormalization Group k-ε, RNG*] e o de tensões de Reynolds [do inglês *Reynolds Stress Model, RSM*], e de três modelos de combustão, o de dissipação de turbilhões [do inglês *Eddy Dissipation Model, EDM*], o de elemento de chama baseado em equilíbrio [do inglês *Equilibrium Flamelet*] e o de elemento de chama em estado estacionário [do inglês *Steady State Flamelet*]. A Figura 2.11 mostra uma

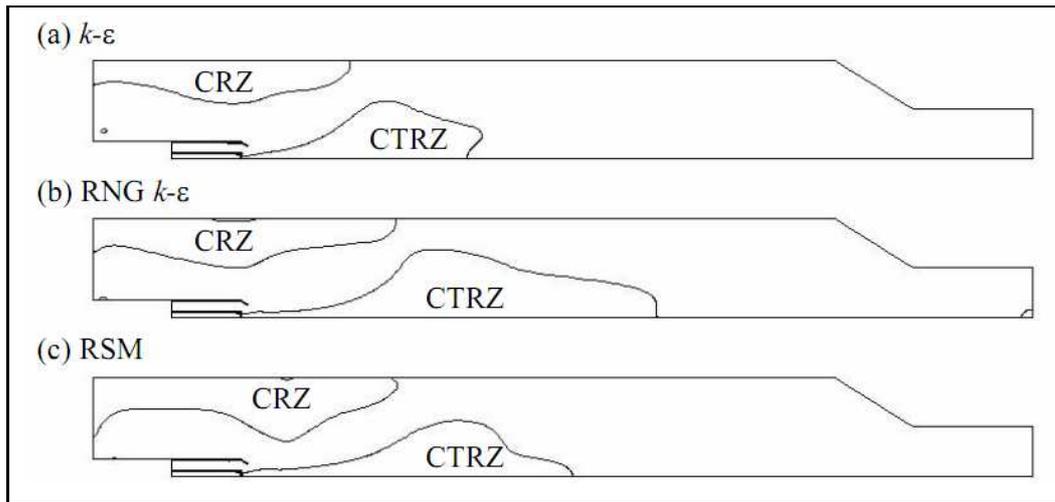


Figura 2.11: Contornos da componente longitudinal de velocidade igual a zero obtidos empregando-se os modelos de turbulência (a) $k-\varepsilon$, (b) RNG $k-\varepsilon$, (c) RSM, (Spangelo, 2004). As siglas CRZ e CTRZ significam, respectivamente, à zona de recirculação no canto [*Corner Recirculation Zone*] e à zona de recirculação toroidal no centro [*Central Toroidal Recirculation Zone*].

comparação dos resultados obtidos com os três modelos de transporte turbulento enquanto que a Figura 2.12 mostra os campos de temperatura obtidos com os três modelos de combustão e utilizando o modelo RSM para descrever a turbulência. Segundo Spangelo (2004), os melhores resultados foram obtidos com o modelos de tensor de Reynolds e de elemento de chama em estado estacionário. Entretanto, esta conclusão não é baseada em comparação com dados experimentais, que permitiriam validar os resultados numéricos obtidos, mas apenas na discussão dos resultados numéricos obtidos pelo autor e nos resultados similares que foram encontrados na literatura. Note-se que o modelo EDM superestima a temperatura do escoamento quando comparado com os modelos PDF. De fato, o modelo EDM, que assume que as reações de cinética química são controladas pela turbulência, leva sempre a uma superestimação dos produtos da combustão, o que acarreta a uma superestimação da temperatura na região do escoamento onde a turbulência é intensa e onde existem reagentes (Warnatz *et. al.*, 1999).

Sarlej *et al.* (2007) otimizaram usando CFD uma câmara de combustão, mostrada na Fig. 2.13. Os objetivos foram o aumento da eficiência e a redução de emissão NO_x . Para isto, foi simulado um conjunto de 27 possíveis configurações geométricas do arranjo dos bicos injetores secundários deste queimador de dois estágios.

Tal como mostrado na Figura 2.13, estes injetores secundários foram arranjados em 9 posições radiais e 3 inclinações tangenciais diferentes. O domínio

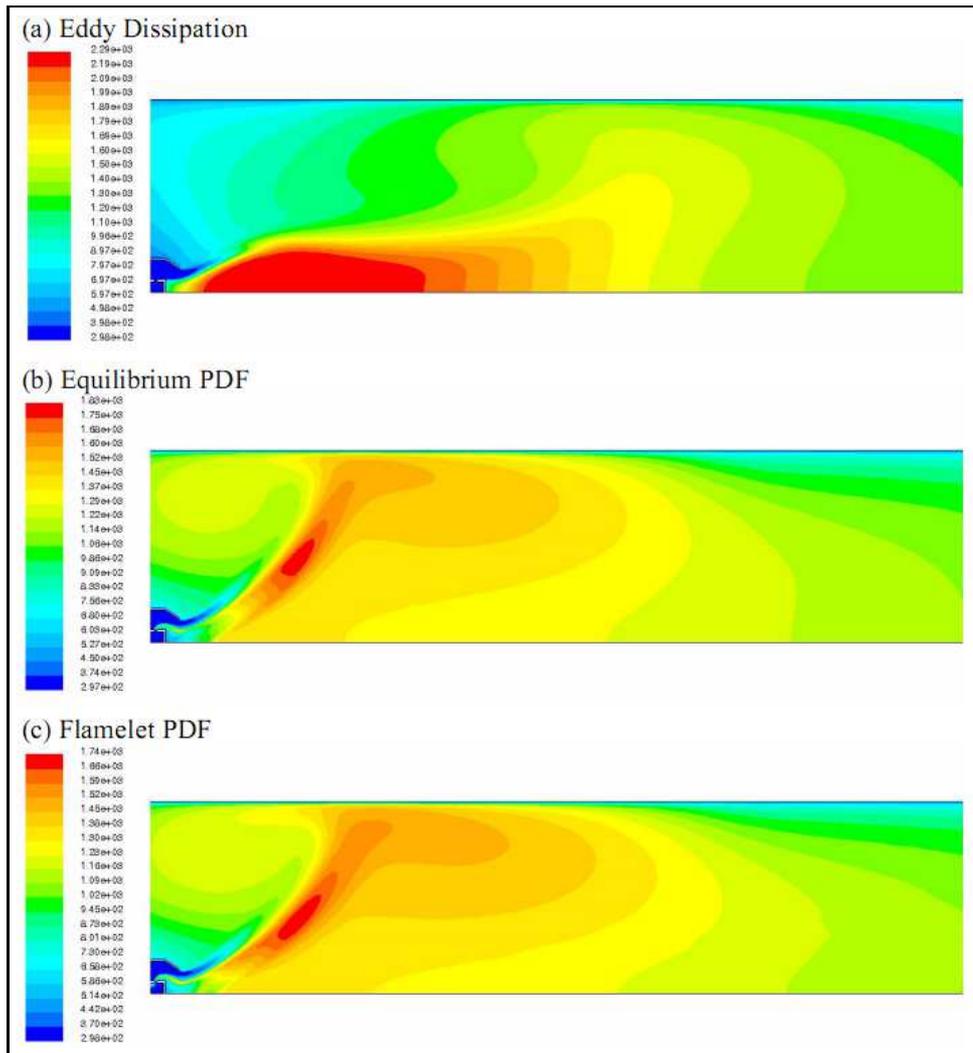


Figura 2.12: Campos de temperatura obtidos com os modelos de combustão (a) Eddy Dissipation, (b) PDF em equilíbrio, (c) PDF em elemento de chama (Spangelo, 2004).

computacional inclui 110.000 volumes de controle, onde foram empregados o modelo de turbulência SST $k-\omega$ [do inglês *Shear Stress Transport $k-\omega$*], o modelo de dissipação de turbilhões [do inglês *Eddy Dissipation Model, EDM*] de Magnussen e Hjertager (1976) para a descrição da combustão turbulenta, o Modelo de Ordenadas Discretas [do inglês *Discrete Ordinate Model, DOM*] para a descrição do transporte radiante e o mecanismo simplificado de dois passos para a descrição da cinética química do metano e ar.

A análise dos resultados das simulações evidenciou uma leve dependência na posição axial dos bicos injetores secundários de combustível sobre a formação de NO_x . Entretanto, uma forte dependência da concentração de NO_x foi observada com respeito ao ângulo de inclinação destes injetores. A Figura 2.14 mostra o campo de temperatura obtido para os casos de baixo e

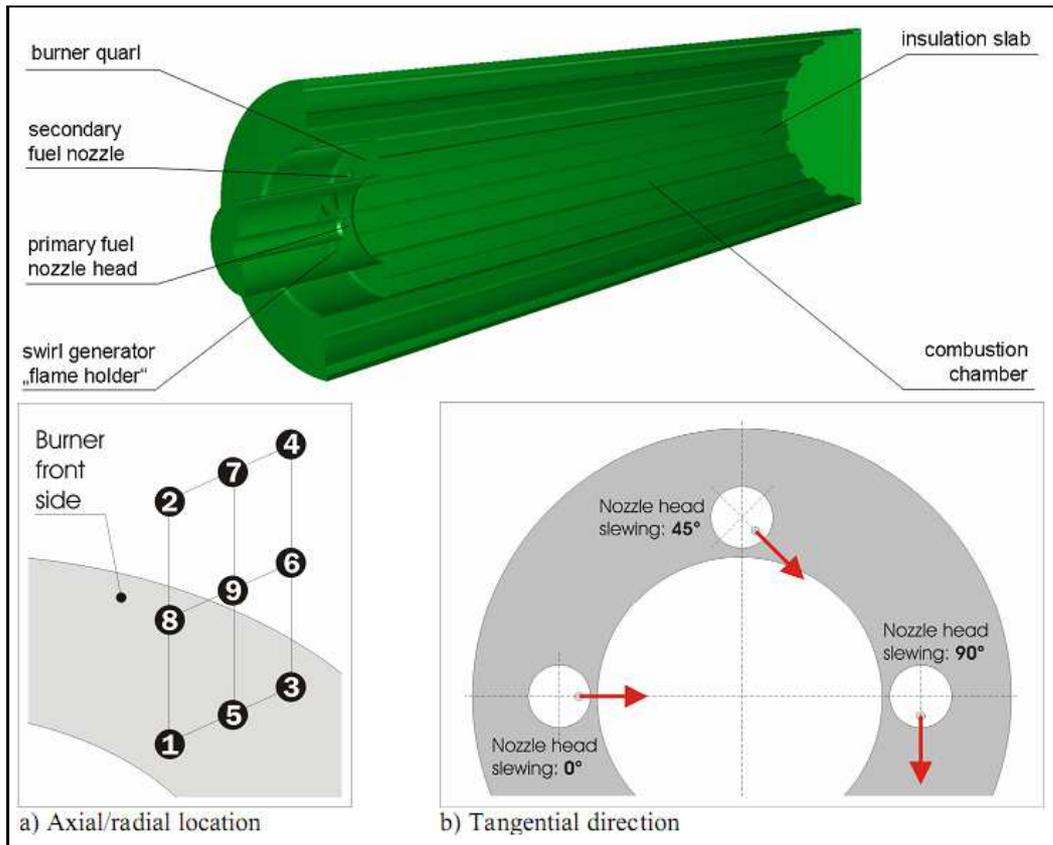


Figura 2.13: Modelo geométrico de uma câmara de combustão com um queimador de dois estágios, e as 27 combinações radial/axial e tangencial dos injetores secundários (Sarlej *et al.*, 2007).

alto NO_x indicando o envelope da chama. Determinou-se que uma inclinação de 45° dos bicos secundários conduz à concentração mínima de NO_x de 12 ppm, enquanto que o valor máximo de 33 ppm é obtido quando estes injetores encontram-se inclinados 90° com relação à direção tangencial às paredes da câmara de combustão. Ambas as configurações de injetores levaram a valores muito semelhantes da potência de saída, indicando que o arranjo dos injetores secundários não influi na eficiência da combustão.

Wen *et al.* (2003) simularam a combustão turbulenta não pré-misturada de querosene pré-vaporizado e ar à pressão ambiente no queimador de Young *et al.* (1994). O objetivo foi estudar o desempenho de dois modelos de formação/oxidação de fuligem, o de Moss-Brookes (Brookes e Moss, 1999), e de Moss-Brookes estendido (Hall, 1997). Os modelos $k-\varepsilon$ padrão e elementos de chama adiabático foram empregados para a descrição das propriedades termoquímicas do escoamento. Além disso, um modelo de difusão foi empregado para a transferência de energia radiante do escoamento, enquanto que expressões semi-empíricas foram utilizadas para descrever os coeficientes globais de absorção da mistura de gases produtos da combustão e da fuligem.

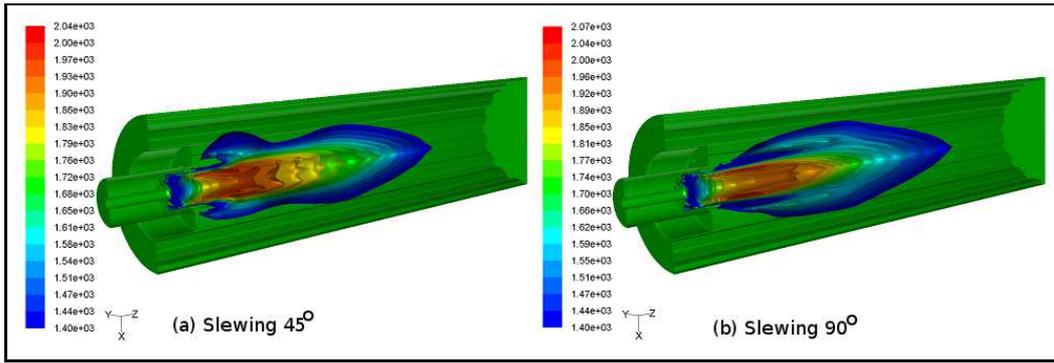


Figura 2.14: Campo de temperatura obtido nos caso do arranjo dos bicos injetores secundários que fornecem valores de NO (a) mínimo e (b) máximo (Sarlej *et al.*, 2007).

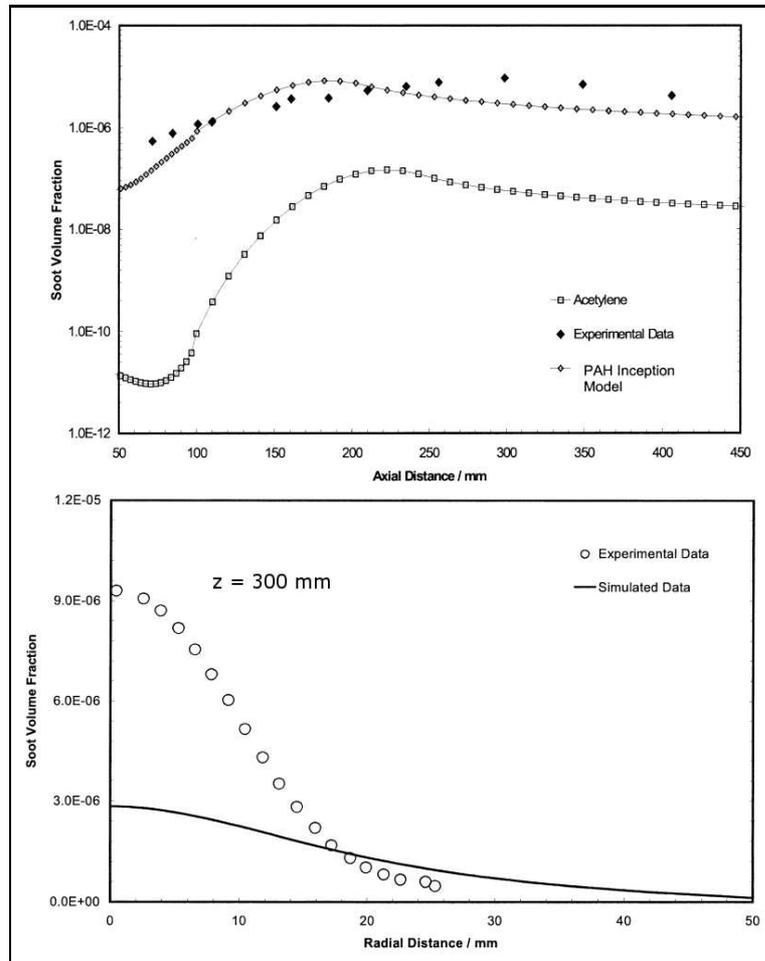


Figura 2.15: Perfis longitudinal e radial da fração volumétrica da fuligem obtidos com modelos de Moss-Brookes e Moss Brookes estendido (Wen *et al.*, 2003).

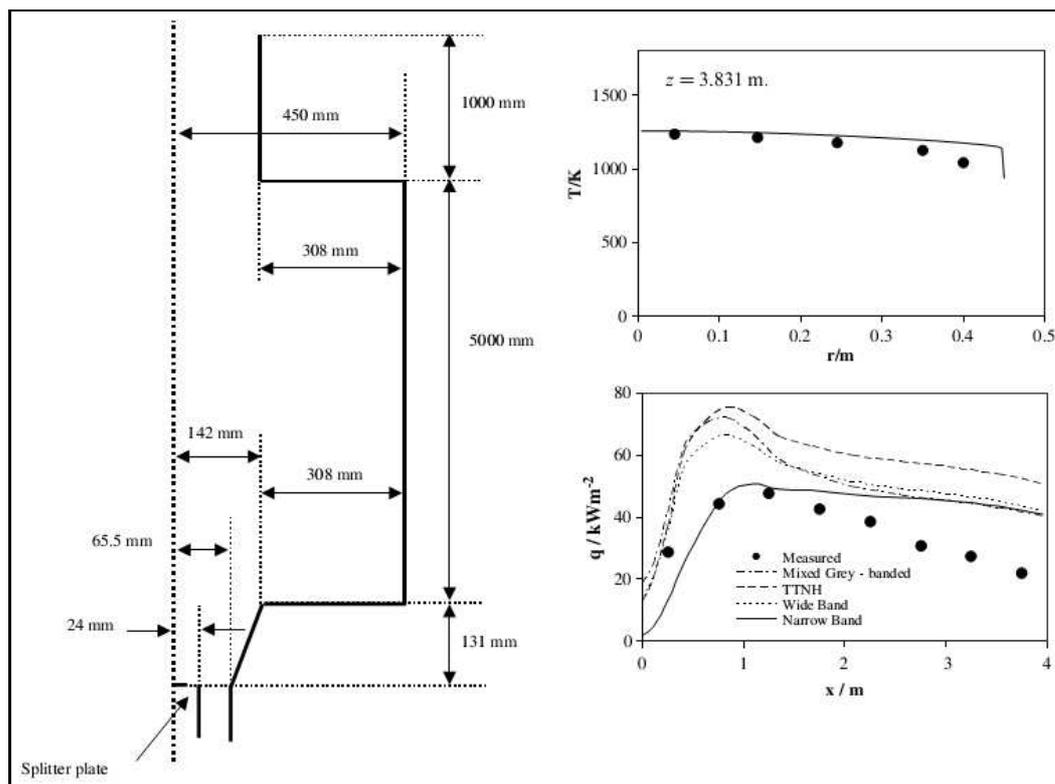


Figura 2.16: Diagrama esquemático do queimador industrial de Wu e Fricker (1976) e resultados de temperatura e fluxo de calor radiante obtidos por Cumber e Fairweather (2005).

Os resultados obtidos da simulação da combustão turbulenta do querosene pré-vaporizado no eixo de simetria, tal como pode ser visto no gráfico superior da Figura 2.15, mostram que o modelo original de Moss-Brookes (Brookes e Moss, 1999) [*Acetylene*] prevê uma produção da fuligem até duas ordens de grandeza menor do que a obtida no experimento. O modelo de Moss-Brookes estendido (Hall, 1997) [*PAH Inception Model*] resulta em uma melhora significativa da previsão da fração volumétrica da fuligem.

Não obstante, o gráfico inferior da Figura 2.15 indica que, apesar do modelo de Moss-Brookes estendido (Hall, 1997) levar a uma melhor previsão da produção da fuligem, esta não é completamente satisfatória, pois existem regiões do escoamento onde a fração volumétrica da fuligem calculada é três vezes menor do que os resultados obtidos da experimentação. Contudo, os autores recomendam o emprego do modelo de Moss-Brookes estendido para a previsão da formação da fuligem na combustão turbulenta de hidrocarbonetos pesados, em particular, daqueles que apresentam compostos aromáticos tais como o querosene, a gasolina e o diesel.

Cumber e Fairweather (2005) realizaram, para queimadores de escala industrial (Wu e Fricker, 1976) e de escala laboratorial (Baillie *et al.* 1998),

um extenso estudo numérico de avaliação da capacidade preditiva dos modelos de propriedades radiantes dos gases produtos da combustão e da fuligem. Os modelos empregados foram: (a) de Banda de Gás Cinza Misturado (Truelove, 1976) [do inglês *Mixed Grey Gas*], (b) Não Homogêneo de Transmitância Total (Grosshandler, 1980) [do inglês *Total Transmittance Non-Homogeneous, TTNH*], (c) Modelo de Banda Larga Exponencial (Edwards e Balakrishnan, 1973) [do inglês *Exponential Wide Band Model*] e, (d) Modelo de Banda Estreita - Radcal, (Grosshandler, 1993) [do inglês *Narrow, Band Model, NBM*]. Nestas simulações os autores empregaram simultaneamente os modelos $k-\varepsilon$ padrão, elementos de chama em equilíbrio [do inglês *Equilibrium Flamelet*] e de radiação de transferência discreta [do inglês *Discrete Transfer Radiation Model, DTRM*]. Foi utilizado, para a descrição da fuligem, o modelo de Fairweather *et al.* (1992) que envolve o transporte da fração mássica da fuligem e do número de densidade de partículas.

No que diz respeito ao queimador industrial de gás natural e ar desenvolvido por Wu e Fricker (1976), a Figura 2.16 mostra que, muito embora os modelos de turbulência, combustão e de radiação reproduzam corretamente o perfil radial de temperatura a $z = 3,831$ m, todos os modelos de propriedades radiantes considerados no trabalho de Cumber e Fairweather (2005), exceto o de banda estreita, superestimam, em mais de 100 %, os resultados experimentais do fluxo de calor radiante. Os autores observaram que o modelo de banda estreita - Radcal é aquele que permite a melhor estimativa do fluxo de calor radiante ao longo da parede longitudinal.

Para o caso da combustão turbulenta de gás natural e ar no queimador laboratorial de Baillie *et al.* (1998), os resultados de fluxo de calor radiante obtidos pelos quatro modelos de propriedades radiantes apresentaram, tal como pode ser observado na Figura 2.17, um bom acordo com aqueles da experimentação. As discrepâncias obtidas não superam 20 %. De forma geral, os autores concluem que os quatros modelos fornecem resultados satisfatórios, apresentando um bom nível de concordância entre si e com os dados experimentais.

Wang (2004) e Wang *et al.* (2005) desenvolveram uma metodologia baseada na dinâmica dos fluidos computacional para estudar a influência que exercem os modelos de propriedades radiantes e de produção da fuligem sobre a previsão dos processos termoquímicos e a transferência de energia radiante e sua interação com a fuligem. O queimador não pré-misturado, de escala laboratorial, construído por Endrud (2000) foi empregado como base para as comparações. Em particular, são determinados a concentração da fuligem e o fluxo de energia radiante resultante da combustão turbulenta de propano

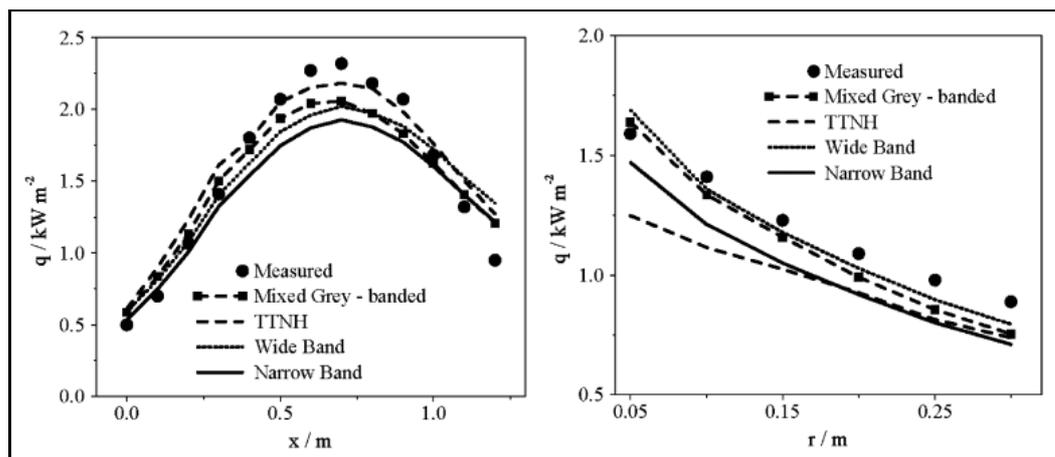


Figura 2.17: Variação longitudinal e radial do fluxo de calor radiante no queimador laboratorial de Baillie *et al.* (1998).

com ar enriquecido com oxigênio (40% O_2). A Figura 2.18 mostra um esquema simplificado do queimador de Endrud (2000).

Os modelos $k-\varepsilon$ padrão e *Eddy-Breakup (EBU)* foram empregados por Wang (2004) e Wang *et al.* (2005) para estudar a interação entre a combustão e a turbulência. O mecanismo GRI-Mech 3.0 (Smith *et al.*, 1999) somado às reações químicas elementares que calculam as taxas de crescimento e de oxidação dos hidrocarbonetos poliaromáticos precursores da fuligem, permite determinar as taxas de reação média das espécies químicas participantes na combustão. Além disso, uma combinação dos modelos de radiação $P-1$ cinza [do inglês *P-1 Gray*] e $P-1$ -FSK [do inglês *P-1 Full-Spectral κ Distribution*], com e sem a inclusão do método dos Momentos (*Moment Method, MM*), para previsão da fuligem, leva a quatro diferentes soluções numéricas, cujos valores são comparados com o dados experimentais de Wang *et al.* (2002).

Simulações iniciais de Wang *et al.* (2005) forneceram quantidades de fuligem subestimadas em até 3 ordens de grandeza (ver caso 1 da Figura 2.19), em comparação com resultados experimentais. Os autores também evidenciaram uma forte sensibilidade da formação da fuligem, quando a radiação da fuligem é ou não incluída. esta sensibilidade pode ser apreciada na Figura 2.19 ao se comparar o caso 3 (com modelo $P-1$ cinza) com o caso 4 (sem modelo de radiação).

Também foi evidenciada uma grande sensibilidade da predição do fluxo de calor por radiação à escolha do modelo de radiação, tal como se pode observar na Figura 2.20. Segundo o tipo de modelo de radiação e/ou a inclusão do modelo de formação da fuligem, o fluxo de calor radiante, q_r , apresenta valores consideravelmente diferentes. As principais conclusões do trabalho de Wang *et al.* (2005) foram:

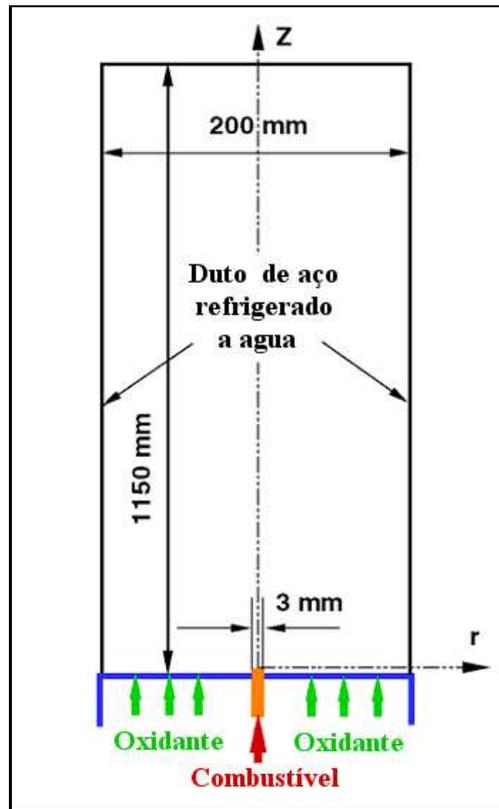


Figura 2.18: Diagrama esquemático do queimador de Endrud (2000).

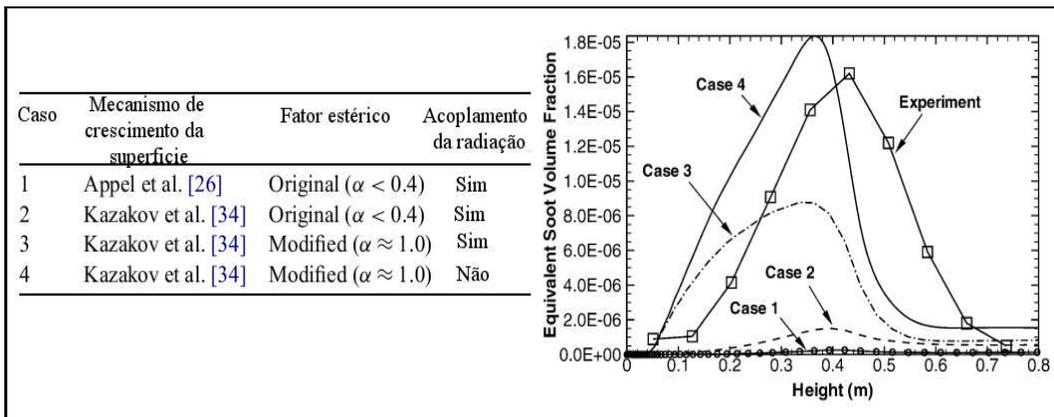


Figura 2.19: Casos analisados por Wang *et al.* (2005) no estudo da sensibilidade da fuligem sobre a radiação usando o método dos momentos, e levando em conta os seguintes parâmetros: mecanismo de crescimento de superfície, fator estérico e acoplamento radiação-fuligem.

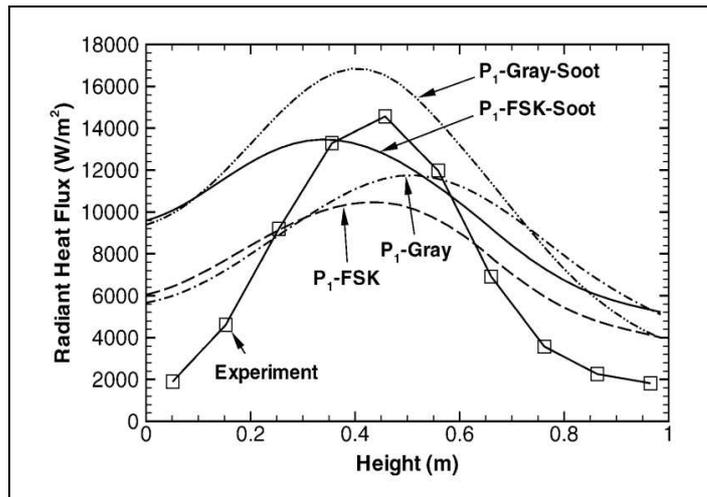


Figura 2.20: Comparação dos resultados de simulação de Wang *et al.* (2005) com os dados experimentais de Wang *et al.* (2002) do fluxo de energia radiante ao longo da parede longitudinal do queimador de Endrud (2000).

- A grande sensibilidade da predição da fuligem ao crescimento da superfície da fuligem quando é modificado o fator estérico (ver casos 2 e 3).
- Os efeitos da radiação não-cinza são muito importantes, e devem de ser considerados de maneira a capturar a correta distribuição das perdas de calor por radiação.
- A presença da fuligem altera a estrutura da chama.
- A radiação da fuligem diminui as temperaturas máximas da chama.

Bidi *et al.* (2008) desenvolveram, para uma configuração de chama de geometria cilíndrica estudada por Barlow and Dreizler (2003), um estudo numérico que incluía os efeitos da radiação sobre os processos da combustão turbulenta não pré-misturada de metano e ar. Para isto, utilizaram-se os modelos $k-\epsilon$ padrão para a descrição da turbulência, e os modelos taxa química finita [do inglês *Finite Rate Chemistry, FRC*] e “Eddy Break Up” (EBU) para determinar as taxas de reação a partir de um mecanismo cinético de cinco passos. O modelo das Ordenadas Discretas (DOM) foi empregado para resolução da equação de transporte radiante [do inglês *Radiative Transfer Equation, RTE*], e o modelo da soma ponderada dos gases cinzas [do inglês *Weighted Sum of Gray Gas Model, WSGGM*] foi usado para considerar os efeitos da radiação cinza.

Resultados numéricos foram obtidos para ambos os casos, sem e com presença do efeito da radiação, tal como mostrado na Figura 2.21. Foi evidenciado que o resultado do segundo caso, quando comparado com o primeiro,

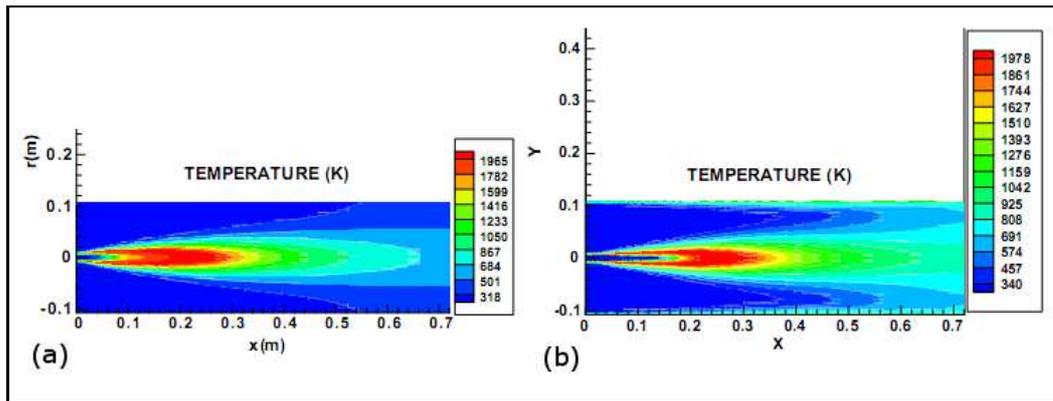


Figura 2.21: Campos de temperatura obtidos mediante a simulação numérica (a) com radiação e (b) sem radiação (Bidi *et al.*, 2008).

conduz a um decréscimo da temperatura máxima de 1.978 para 1.965 K e à uniformização do gradiente de temperatura. Isto é o resultado da emissão líquida da radiação das regiões de alta para as de baixa temperatura.

Na Figura 2.22, são traçados os perfis longitudinais de temperatura e das frações mássicas de N_2 , CO_2 e H_2O obtidas no centro do queimador para o caso da combustão com e sem presença da radiação, e também os resultados experimentais. Desta figura percebe-se que uma melhor concordância nas previsão das propriedades termoquímicas no caso em que a radiação é levada em conta.

Desta forma, Bidi *et al.* (2008) demonstraram que o efeito da radiação dos gases nos produtos da combustão influencia os perfis da temperatura e da concentração das espécies. Tal como pode ser observado na Figura 2.22, a temperatura máxima observada no domínio estudado diminui como resultado da radiação, o que leva como consequência a um deslocamento a montante e a jusante das frações mássicas de CO_2 e H_2O , respectivamente, para os casos com radiação.

Mahmud e Sangha (2010) realizaram um estudo de simulação numérica da combustão não pré-misturada de gás natural e ar em um forno semi-industrial de 3 MW. O objetivo era prever os parâmetros aerotermoquímicos que governam seu funcionamento, com ênfase na correta estimativa das emissões NO_x . Os parâmetros de operação considerados neste estudo são descritos na Figura 2.23. Esta figura também mostra o esquema geométrico do forno, onde gás natural (81,3 % de metano, 4,3 % de outros hidrocarbonetos, e 14,4 % de nitrogênio) é introduzido através do injetor central, enquanto que o ar é fornecido através do duto anular do queimador (Michelfelder e Lowes, 1974).

No que diz respeito à simulação numérica, foram empregados (i) o mode-

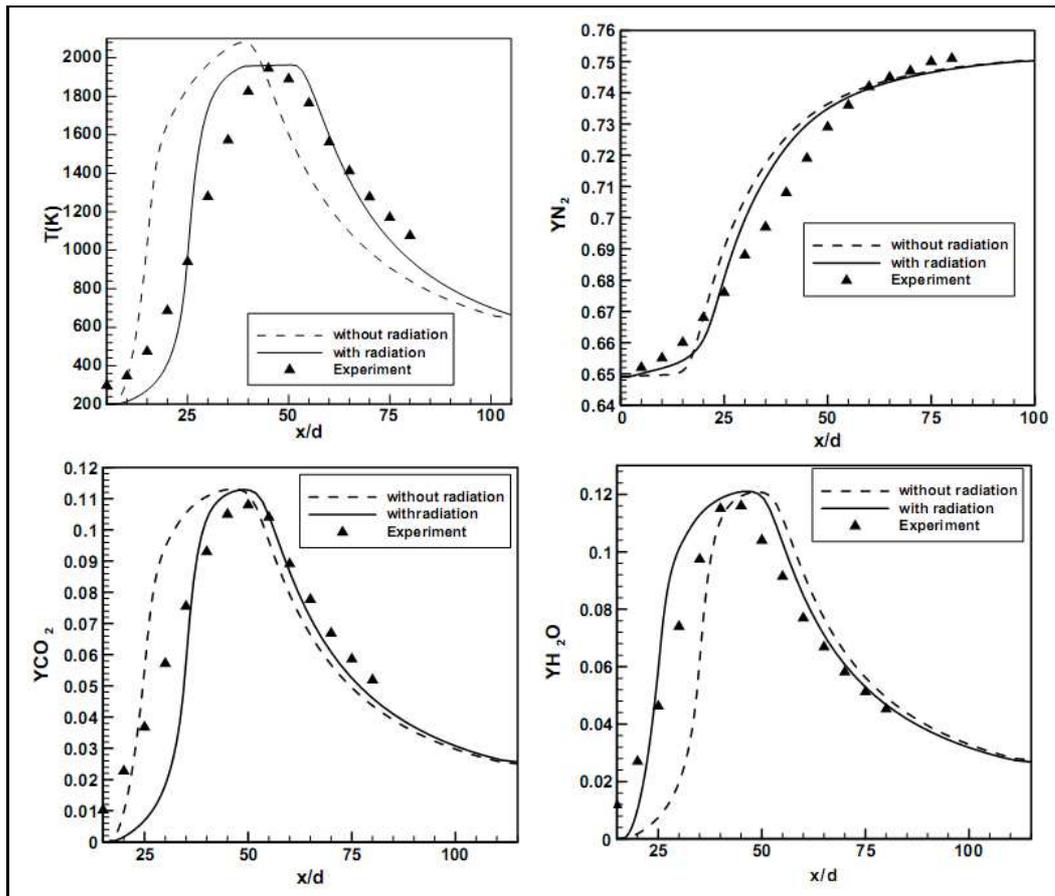


Figura 2.22: Perfis longitudinais da temperatura e frações mássicas das espécies majoritárias no centro do queimador (Bidi *et al.*, 2008).

los $k-\varepsilon$ padrão e o modelo de Tensor de Reynolds para turbulência (RSM), (ii) o modelo RMR Flamelet [do inglês *Radiation Mixedness-Reactedness Flamelet*] desenvolvido por Bradley *et al.* (1990), para calcular a taxa de conversão dos reagentes em produtos da combustão, (iii) o modelo de Transferência Discretas (DRTM) para o cálculo da troca de calor por radiação do fluido e suas imediações.

Resultados obtidos evidenciaram um bom acordo com os dados experimentais de Michelfelder e Lowes (1974), tanto para o modelos $k-\varepsilon$ padrão, como o modelo de Tensores de Reynolds. Soluções análogas para os parâmetros termoquímicos foram obtidos quando o modelo RMR Flamelet é utilizado. Um exemplo destas previsões de temperatura é mostrado na Figura 2.24. Estes resultados termoquímicos também guardam uma boa concordância com aqueles obtidos através da experimentação. A intensidade calculada da radiação nas paredes do forno também demonstrou uma excelente concordância com a obtida através da experimentação. Porém, a concentração calculada de NO_x foi superestimada em mais de 100% o valor experimental.

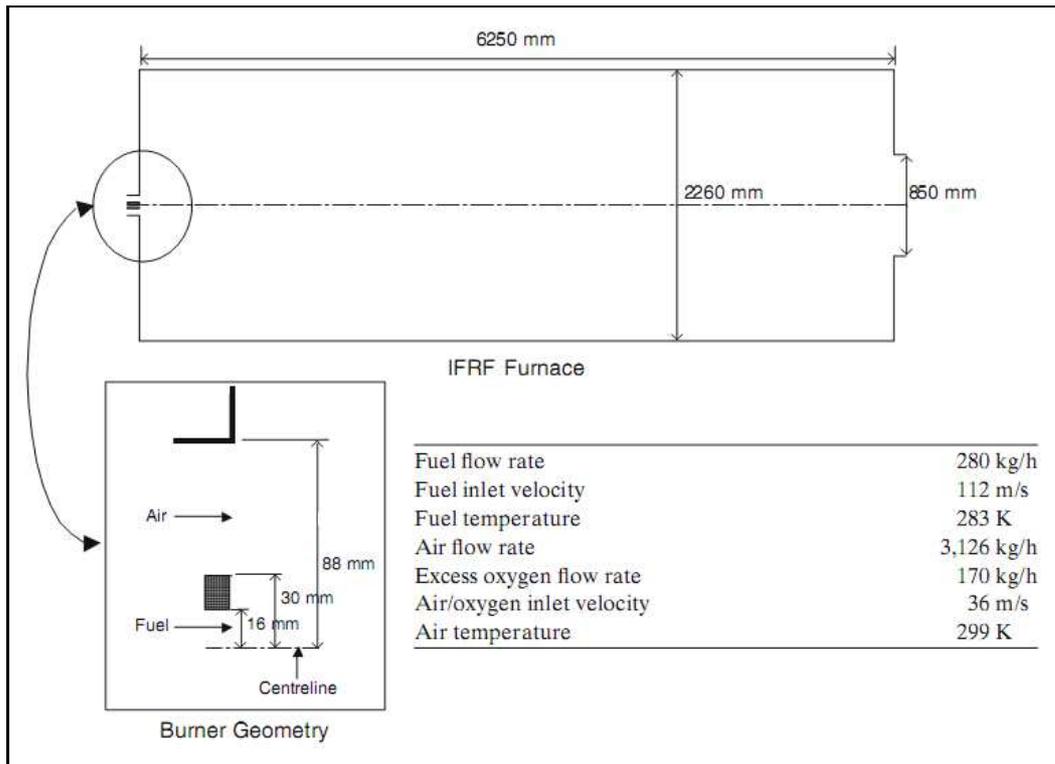


Figura 2.23: Vista esquemática do forno IFRF (Mahmud e Sangha, 2010).

Nieckele *et. al.* (2011) desenvolveram um trabalho numérico referente ao estudo do processo de combustão turbulenta em um forno industrial de alumínio fundido, tal como mostrado na Figura 2.25. Em particular, foram utilizados dois combustíveis (o gás natural e o óleo combustível) para comparar propriedades tais como temperatura, o fluxo de calor radiante, frações mássicas de reagentes e produtos de combustão, inclusive a fuligem e NO_x . Os modelos $k-\epsilon$ padrão e Eddy Dissipation (*Eddy Dissipation Model, EDM*) foram utilizados para descrever a combustão turbulenta.

A transferência de calor por radiação e sua interação com a fuligem foram simulados empregando-se o modelo de transferência discreta [do inglês *Discrete Transfer Radiative Model, DTRM*] para a resolução de equação de transporte radiante [do inglês *Radiative Transfer Equation, RTE*], e os modelos soma ponderada dos gases cinzas [do inglês *Weighted Sum of Gray Gas Model, WSGGM*] de Sazhin (1994) para a descrição das propriedades radiantes globais de gases produtos de combustão e fuligem. A taxa de formação/oxidação da fuligem é dada pelo modelo Magnussen e Hjertager (1976), enquanto que a interação de gotículas de óleo combustível com o meio contínuo é estimada empregando a abordagem lagrangiana/euleriana, também chamado de modelos de fase discreta [do inglês *Discrete Phase Models, DPM*].

Os resultados numéricos evidenciaram, para ambos os combustíveis em-

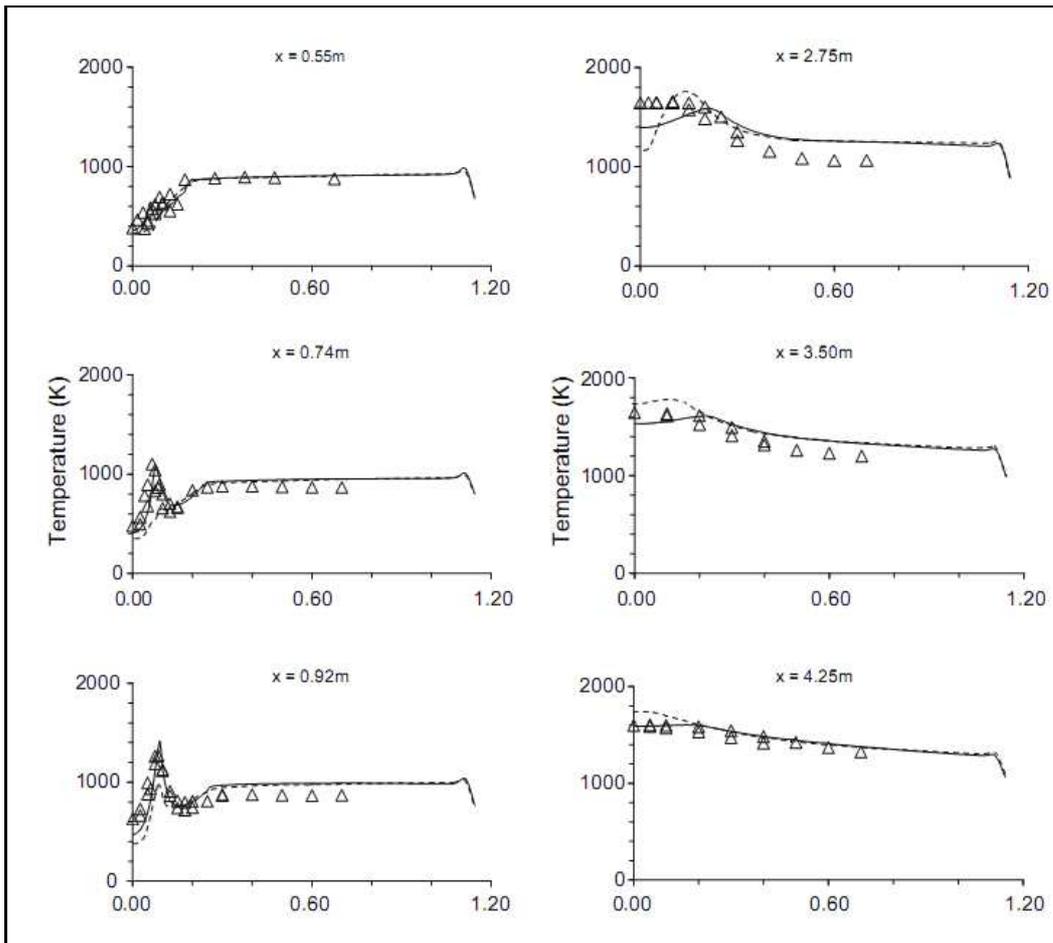


Figura 2.24: Comparação entre os perfis radiais de temperatura preditos por Mahmud e Sangha (2010) e medidos por Michelfelder e Lowes (1974). As linhas tracejadas correspondem ao modelo $k-\varepsilon$ e as linhas contínuas ao modelo tensor de Reynolds (STR).

pregados, uma forte predominância da radiação térmica sobre a transferência de energia total, o que pode ser verificado nas Figuras 2.25a e 2.25b. Além disso, observou-se que a envelope de chama obtido com o óleo combustível é deslocado para uma região mais a jusante do que é o caso com gás natural. Isto é devido ao tempo necessário ao óleo combustível para se evaporar. Finalmente o estudo conclui que o emprego do gás natural levaria a um maior tempo de serviço dos materiais refratários e a uma menor formação de poluentes NO_x e fuligem.

2.3

Estudos de Queimadores Desenvolvidos pela International Flame Research Foundation

Fleck *et. al.* (2003) desenvolveram um estudo experimental e numérico das trajetórias dos jatos de combustível e oxidante e do processo de mistura

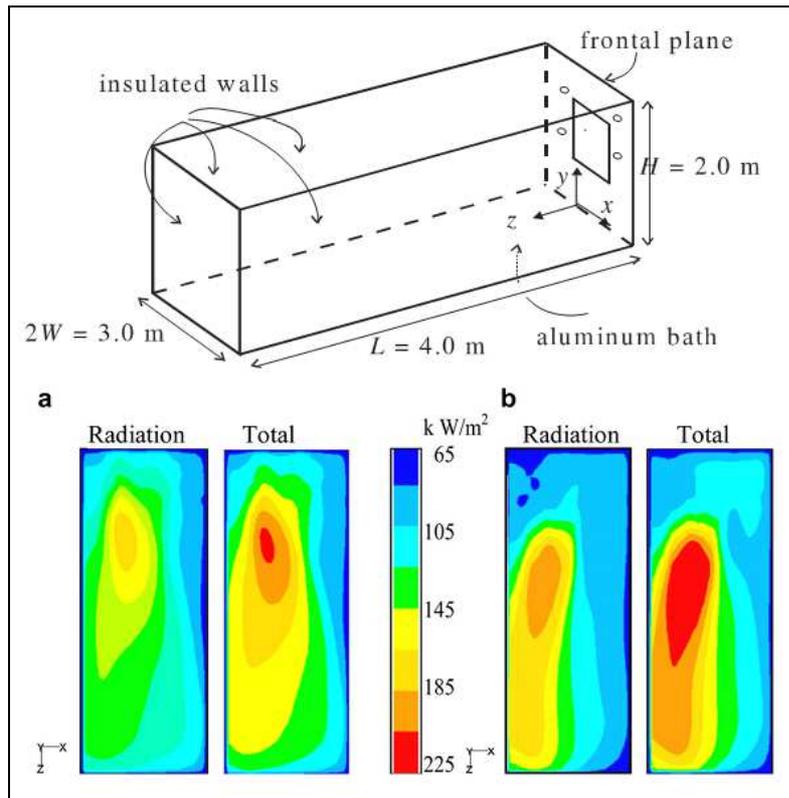


Figura 2.25: Configuração geral do queimador para forno de alumínio fundido e resultados numéricos do fluxo de calor por radiação e total, obtidos com (a) gás natural e (b) óleo combustível (Nieckele *et. al.*, 2011).

que acontece em um queimador industrial multi-jato CGRI (*Canadian Gas Research Institute*), o qual consiste de oito jatos de metano e sete de oxidante, e que foi instalado no forno CAGCT (*Centre for Advanced Gas Combustion Technology*), tal como mostrado na Figura 2.26. É possível observar que no queimador CGRI, montado na parte superior e esquerda do forno CAGCT, sete das portas de combustível (metano) encontram-se distribuídas em torno de uma central, que opera de maneira contínua em regime de chama piloto pré-misturada.

Os resultados experimentais das concentrações médias de oxigênio, O_2 , dióxido de carbono, CO_2 , monóxido de carbono, CO , metano, CH_4 , óxidos de nitrogênio, NO_x , e hidrocarbonetos não queimados, UHC , foram obtidos através de analisadores de gases em dois planos transversais localizados a $x = 215$ e 350 mm a jusante do queimador. O software FluentTM foi empregado para a simulação da combustão turbulenta na região do forno próxima ao queimador. Assim, um total de 300.000 volumes de controle não estruturados (hexa/tetra) foi utilizado para a discretização do domínio computacional. As equações de transporte de massa, quantidade de movimento, energia e das espécie químicas, foram resolvidas com os modelos $k-\varepsilon$ padrão e FRC (*Finite*

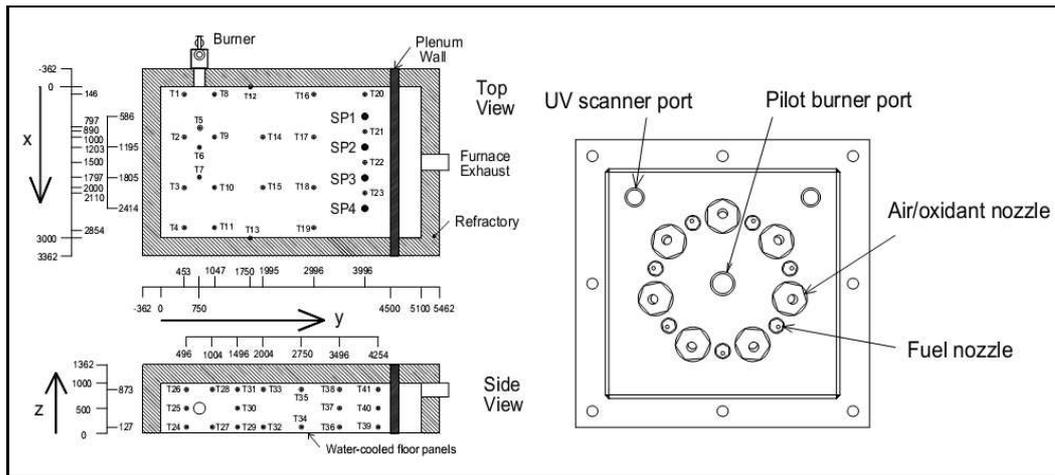


Figura 2.26: Diagrama esquemático do forno CAGCT e do queimador CGRI (Poirier *et. al.*, 2006).

Rate Chemistry) composta de 2 reações globais de metano/ar, permitiram estimar as propriedades termoquímicas do escoamento turbulento reativo. A radiação não foi levada em conta.

Os resultados numéricos das frações molares de O_2 , CO_2 , CO e CH_4 , quando são comparados com aqueles obtidos através da experimentação, apresentam uma concordância que, em termos qualitativos, é aceitável. A título de ilustração, a Figura 2.27 mostra os mapas das espécies químicas a $x = 215$ mm que foram obtidos mediante a aplicação de ambas abordagens. Nesta Figura, percebe-se que, apesar de ambas abordagens apresentarem resultados de O_2 e CO_2 qualitativamente semelhantes, a simulação prevê concentrações de CH_4 que se encontram difundidas nas periferias do queimador e cujo máximo é situado na região de chama piloto. Por outro lado, os resultados experimentais apresentam máximos de CH_4 localizadas nas projeções das portas periféricas de combustível. Além disso, note-se que a concentração de CO medida e a calculada apresentam estruturas que são completamente discordantes.

Weihong e Wlodzimierz (2006) realizaram um extenso estudo experimental e de simulação em CFD do processo de combustão turbulenta em fornos com tecnologia HiTAC [do inglês *High-Temperature Air Combustion*]. O objetivo era desenvolver e validar o desempenho de modelos de combustão quando aplicados a este tipo de tecnologia, em particular, no que concerne à previsão da termoquímica e emissão do NO_x . Assim, duas configurações de equipamentos de combustão que queimam propano foram considerados para a simulação, (i) uma de escala laboratorial que emprega, em condição HiTAC, um jato de combustível e um jato de ar em cross-flow, tal como é mostrado na Figura 2.28, (ii) um forno de teste HiTAC em escala industrial que possui dois sis-

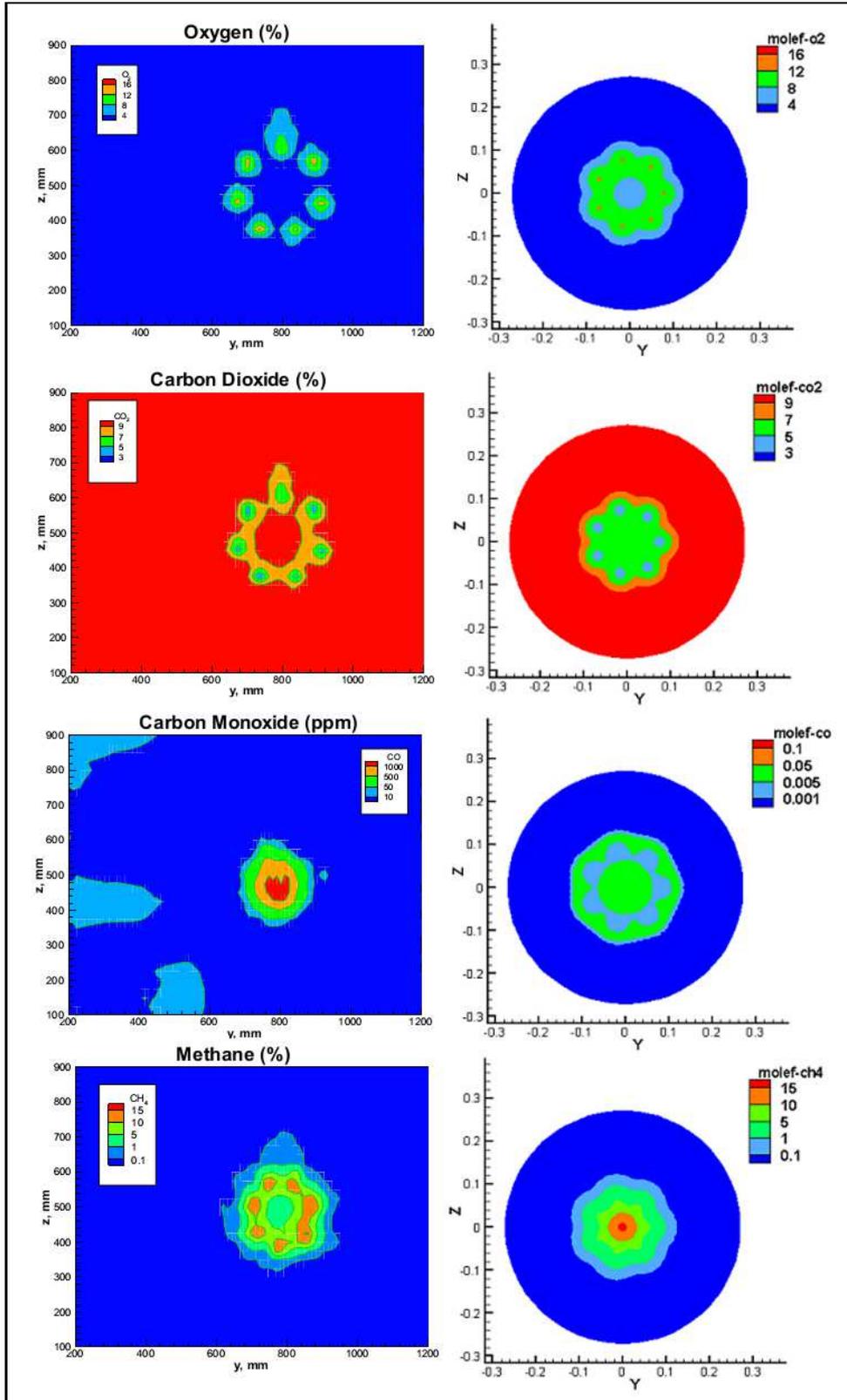


Figura 2.27: Comparação entre os resultados experimentais (esquerda) e numéricos (direita) do processo da combustão turbulenta no plano transversal localizado a $x = 215$ mm a jusante do queimador CGRI (Fleck *et. al.*, 2003).

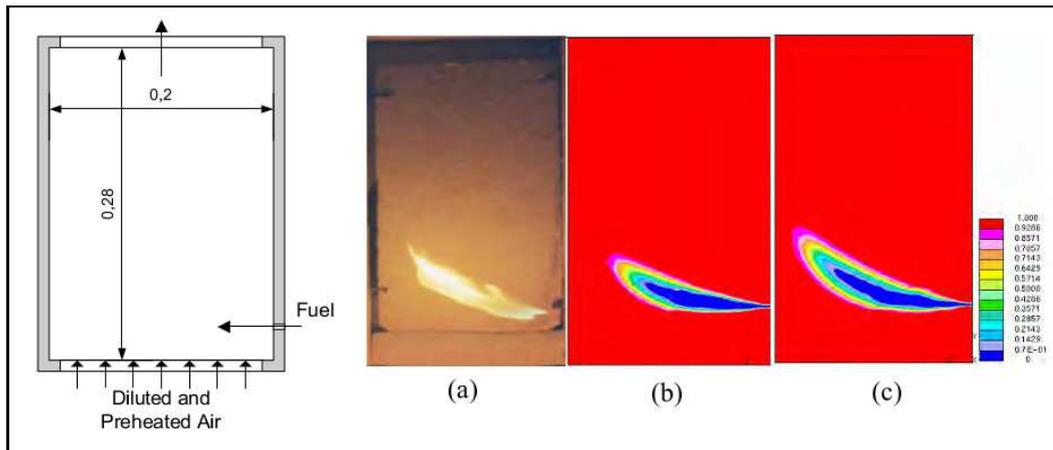


Figura 2.28: Lado esquerdo: Diagrama esquemático da câmara de combustão. Lado direito: (a) fotografia da chama, e distribuição da fração de mistura de oxidação obtida por (b) Modelo Elemento de Chama e, (c) Modelo Eddy Break-Up (Weihong e Wlodzimierz, 2006).

temas HCR [do inglês *High Cycle Regenerative Systems*], mostrado na Figura 2.29.

Os modelos empregados para a simulação da combustão turbulenta foram o $k-\epsilon$ padrão, para a descrição da turbulência, Elementos de Chama em Equilíbrio [do inglês *Equilibrium Flamelet*] e “Eddy Break-Up/Finite Rate Chemistry” (EBU/FRC) para a descrição da combustão. A Radiação é levada em conta através do modelo de Transferência Discreta [do inglês *Discrete Transfer Radiation Model, DTRM*]. Os resultados numéricos para o queimador laboratorial indicam que o modelo EBU/FRC é aquele que melhor aproxima os experimentos, o que pode ser verificado na Figura 2.28. Além disso, foi demonstrado que a redução da concentração de oxigênio no oxidante leva a chamas de maior dimensão, enquanto que a fração de energia radiante é mantida constante.

Para o caso do forno de teste HiTAC, os resultados numéricos levaram a uma boa predição das concentrações das espécies químicas majoritárias e de emissões NO_x , tal e como se pode observar na Figura 2.29. Também foi verificado que os parâmetros de operação tais como oxigênio, temperaturas dos reagentes, vazão mássica do propano e riqueza, exercem uma forte influência na termoquímica da combustão e na formação de NO_x .

2.4 Considerações Finais

Neste capítulo foi apresentada uma pesquisa bibliográfica do desenvolvimento, nos últimos 15 anos, de estudos experimentais e numéricos da com-

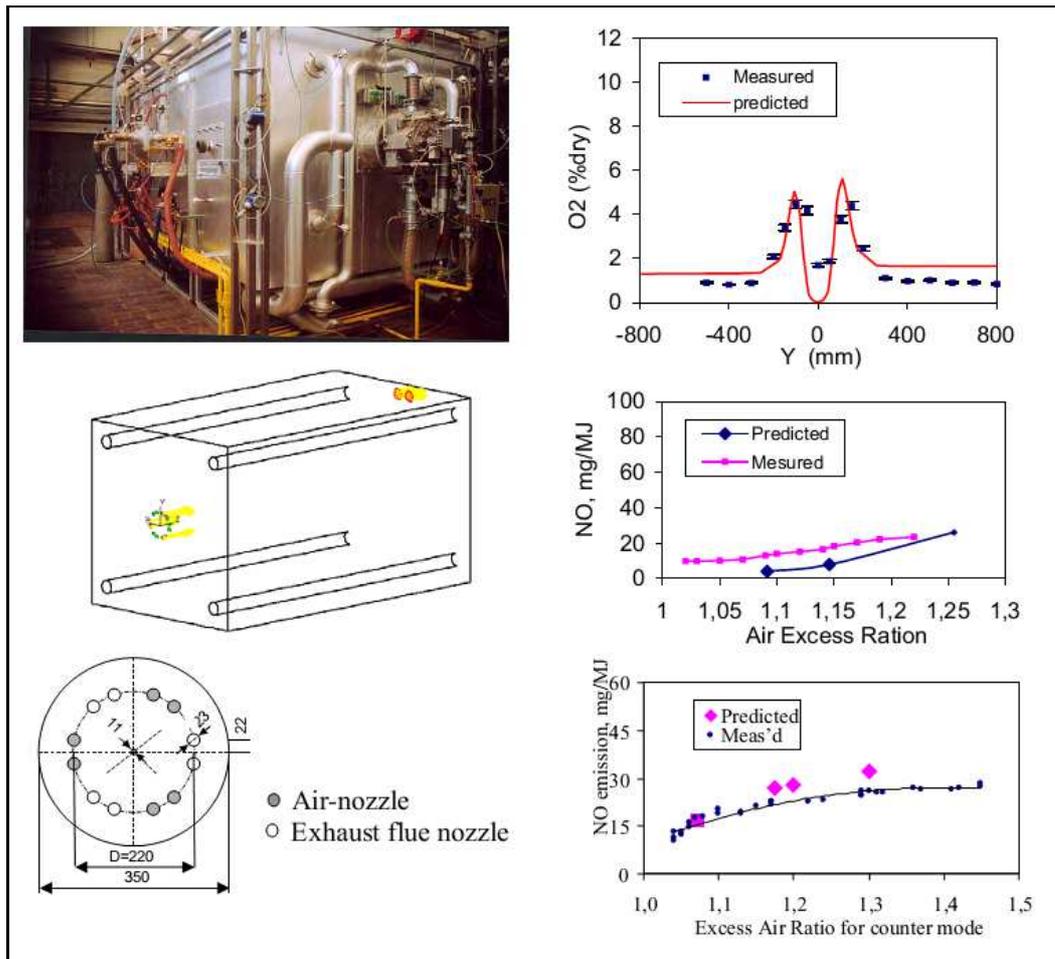


Figura 2.29: Forno de Teste HiTAC (a) Lado esquerdo.- Fotografia do equipamento e diagrama esquemático do domínio computacional, (b) Lado direito.- Resultados calculados e medidos de concentração de oxigênio (a $x = 0$ e $z = 0,6$) e de formação de NO_x na saída do queimador nas configurações de HCR (Weihong e Wlodzimierz, 2006).

bustão turbulenta não pré-misturada em queimadores de porte laboratorial e industrial. O foco foi colocado nos trabalhos experimentais que abordam estudo da combustão, da transferência de energia por radiação e da formação da fuligem. Poucos trabalhos experimentais foram encontrados nos quais as medidas detalhadas de radiação e da fuligem são realizadas. De fato, a aplicação simulatânea destas técnicas experimentais simultâneas envolve elevado grau de sofisticação.

Na literatura um número reduzido de estudos numéricos foram encontrados envolvendo a combustão turbulenta em queimadores nos quais efeitos de radiação e de formação da fuligem são levados em consideração, em particular, no que diz respeito à análise de modelos de propriedades radiantes. Esquemas de cinética química e modelos de combustão que representem o processo termoquímico de forma adequada, ainda está em fase de desenvolvimento.

Cabe ressaltar que o desenvolvimento de mecanismos abrangentes de cinética química de hidrocarbonetos e de modelos de combustão constituem um dos principais desafios no estudo da combustão turbulenta.

A partir da pesquisa bibliográfica, foram escolhidos para o estudo da radiação e sua interação com a fuligem presentes em procesos de combustão, os trabalhos experimentais e numéricos de Wang *et al.* (2002), Wang (2004) e Wang *et al.* (2005), da combustão do propano gasoso, e os trabalhos experimentais de Nakamura *et al.* (2008) e Nakamura *et al.* (2011) da queima do querosene. Esta escolha deve-se à qualidade e quantidade de dados experimentais apresentados tanto da transferência de energia por radiação térmica como da produção da fuligem em equipamentos de configuração geométrica simples e de pequenas dimensões. Isto torna viável a simulação da combustão turbulenta, através de CFD, com custo de processamento computacional moderado.