

5

DESCRIÇÃO DAS MODELAGENS E APRESENTAÇÃO DOS RESULTADOS

Neste capítulo, são apresentadas as modelagens para a simulação do processo de combustão do biogás. As composições do biogás e do ar estão descritas na Tabela 4.2.

Simulações	
Modelagem 01	Combustão em 01 etapa para uma fornalha adiabática no modelo de Taxas Finitas. (tempo de simulação – 8 horas).
Modelagem 02	Combustão em 01 etapa para uma fornalha não adiabática, com fluxo constante nas paredes, no modelo de Taxas Finitas. (tempo de simulação – 8 horas).
Modelagem 03	Combustão em 02 etapas para uma fornalha adiabática no modelo de Taxas Finitas. (tempo de simulação – 8 horas).
Modelagem 04	Combustão em 02 etapas para uma fornalha não adiabática, com fluxo constante nas paredes, no modelo de Taxas Finitas. (tempo de simulação – 8 horas).
Modelagem 05	Combustão em 02 etapas para uma fornalha não adiabática, com fluxo constante nas paredes, no modelo de Taxas Finitas. Propriedades variáveis. (tempo de simulação – 10 horas).
Modelagem 06	Combustão para uma fornalha adiabática no modelo de Fração de Mistura. (tempo de simulação – 6 horas).
Modelagem 07	Combustão para uma fornalha não adiabática, com fluxo constante nas paredes, no modelo de Fração de Mistura. (tempo de simulação – 6 horas).

Tabela 5.1 – Relação das simulações realizadas.

A Tabela 5.1 apresenta, de forma sintetizada, as simulações realizadas, enquanto que Tabela 5.2 apresenta as espécies envolvidas no processo.

Processo	Espécies
(1 Etapa)	CH ₄ , C ₂ H ₆ , C ₃ H ₈ , C ₄ H ₁₀ , C ₅ H ₁₂ , H ₂ S, O ₂ , CO ₂ , H ₂ O, SO ₂ e N ₂
(2 Etapas)	CH ₄ , C ₂ H ₆ , C ₃ H ₈ , C ₄ H ₁₀ , C ₅ H ₁₂ , H ₂ S, O ₂ , CO ₂ , H ₂ O, SO ₂ , CO e N ₂

Tabela 5.2 – Espécies químicas envolvidas no processo de combustão simulado.

Este capítulo inclui resultados de simulações utilizando o modelo de Taxas Finitas Generalizadas (Arrhenius e Magnussen). Com este modelo, simulou-se, primeiramente, as reações de oxidação dos hidrocarbonetos utilizando o mecanismo de reação global em uma única etapa (Vide Tabela 5.3). Simulou-se em seguida, as reações dos hidrocarbonetos em duas etapas (Vide Tabela 5.4),

o que possibilitou analisar, também, a formação do monóxido de carbono (CO) no processo de combustão do biogás. Simulou-se ainda, utilizando-se o modelo de taxas finitas, para as reações em duas etapas variando a viscosidade e a condutividade térmica, consideradas anteriormente constantes, com o objetivo de verificar a influência destes parâmetros nos resultados.

Este capítulo também engloba resultados de simulações referentes ao modelo de Fração de Mistura que utiliza a formulação PDF (Função Densidade Probabilidade). Estes resultados são comparados àqueles obtidos com o modelo de Taxas Finitas Generalizadas.

5.1 Modelagens utilizando Taxas Finitas Generalizadas

No modelo, são resolvidas N-1 equações de transporte para as espécies envolvidas (vide Tabela 5.2) no processo de combustão. N corresponde ao número total de espécies.

Nestas simulações foram mantidas as condições de entrada descritas no capítulo 4.

5.1.1 Combustão em 1 Etapa

Utilizou-se nas modelagens 01 e 02 a formulação por Taxas Finitas Generalizadas (Arrhenius e Magnussem) em um mecanismo de reações globais em uma única etapa. As reações estão apresentadas na Tabela 5.3.

Reações Químicas	
A	$CH_4 + 2O_2 \longrightarrow CO_2 + 2H_2O$
B	$C_2H_6 + 3,5O_2 \longrightarrow 2CO_2 + 3H_2O$
C	$C_3H_8 + 5O_2 \longrightarrow 3CO_2 + 4H_2O$
D	$C_4H_{10} + 6,5O_2 \longrightarrow 4CO_2 + 5H_2O$
E	$C_5H_{12} + 8O_2 \longrightarrow 5CO_2 + 6H_2O$
F	$H_2S + 1,5O_2 \longrightarrow SO_2 + H_2O$

Tabela 5.3 – Reações globais para o processo de combustão em 1 etapa.

Representar a combustão das espécies envolvidas em uma única etapa é uma aproximação bem simplificada do que realmente acontece. Especialmente

com relação aos hidrocarbonetos, que envolvem várias reações em seus processos de dissociação.

5.1.1.2

Modelagem 01 – Combustão em 1 Etapa – Fornalha Adiabática

A modelagem 01 refere-se a um processo de combustão, em uma única etapa, em uma fornalha adiabática.

Percebe-se uma região de recirculação no interior da fornalha, como mostra a Figura 5.1. Esta região está delimitada entre a parede da fornalha e a região de escoamento próxima à linha de simetria.

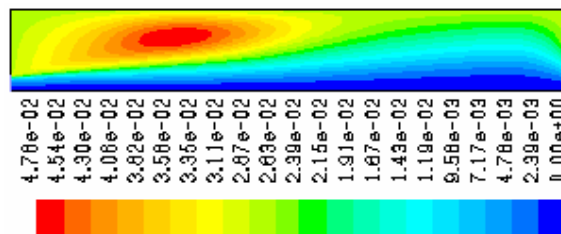


Figura 5.1 – Função de Corrente, em kg/s, para o processo de combustão em uma etapa, no interior da fornalha cilíndrica adiabática (modelagem 01).

A região de recirculação pode ser percebida também na distribuição de algumas espécies que posteriormente serão apresentadas.

As Figuras 5.2 e 5.3 apresentam a distribuição de temperatura, para a modelagem 01 (Vide Tabela 5.1), no interior da fornalha cilíndrica.

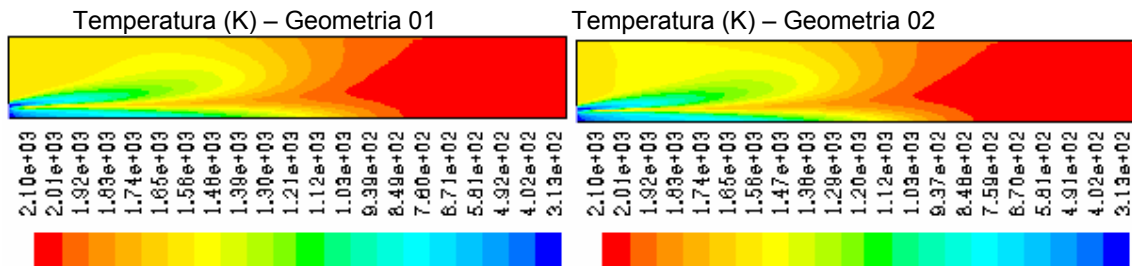


Figura 5.2 – Distribuição das temperaturas (K), para o processo de combustão em uma etapa no interior da fornalha cilíndrica adiabática (modelagem 01).

A simulação envolveu, inicialmente, uma geometria que não levava em conta a espessura do tubo interno de injeção do biogás (geometria 01). Para verificar a influência deste parâmetro e decidir qual geometria seria utilizada, utilizou-se também a geometria descrita no capítulo 04 (geometria 02). Vide Figura 4.2.

A Figura 5.3 apresenta perfis de temperatura para $r = 0\text{m}$ (ao longo do eixo de simetria), $r = 0,037\text{m}$ e $r = 0,128\text{m}$.

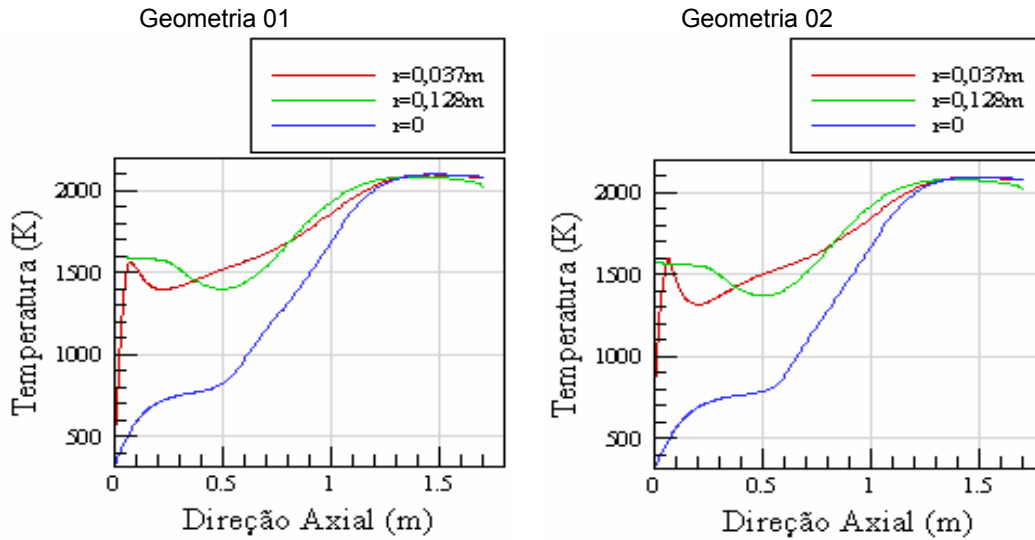


Figura 5.3 – Distribuição de temperaturas (K), referente à modelagem 01, para $r = 0\text{m}$ (eixo de simetria), $r = 0,037\text{m}$ e $r = 0,128\text{m}$.

Analisando as Figuras 5.2 e 5.3, e comparando as curvas para $r = 0\text{m}$ é possível perceber que, para a geometria 02 (gráfico à direita na Figura 5.3), o processo de combustão ocorre mais afastado do queimador, e que há uma inclinação levemente mais acentuada da curva na região onde ocorre o aumento brusco da temperatura. Estas observações podem ser explicadas pelo fato de que o combustível e o ar se misturam em uma região mais afastada do queimador na geometria 02 do que na geometria 01.

A distribuição das concentrações do NO formado no processo de combustão, para a modelagem 01, é apresentada nas Figuras 5.4 e 5.5.

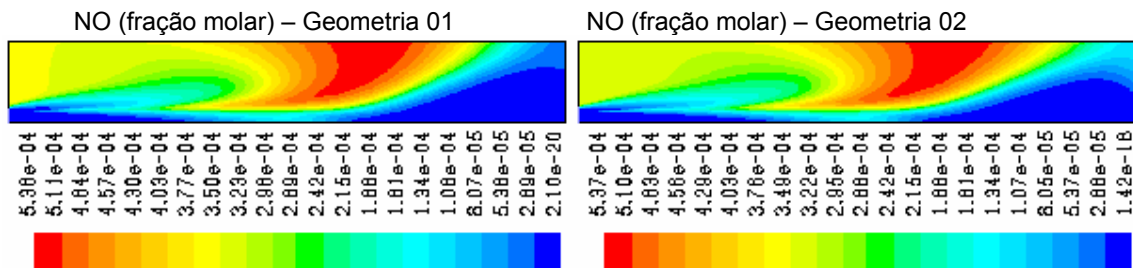


Figura 5.4 – Concentração do NO (em fração molar), para o processo de combustão em uma etapa no interior da fornalha cilíndrica adiabática (modelagem 01).

Realizar a simulação envolvendo uma fornalha adiabática permite a análise da dependência da temperatura por parte do NO.

Os gráficos para a concentração do NO também revelam diferenças. A simulação para a geometria 02 atinge maiores concentrações, no interior da fornalha, na região próxima à saída.

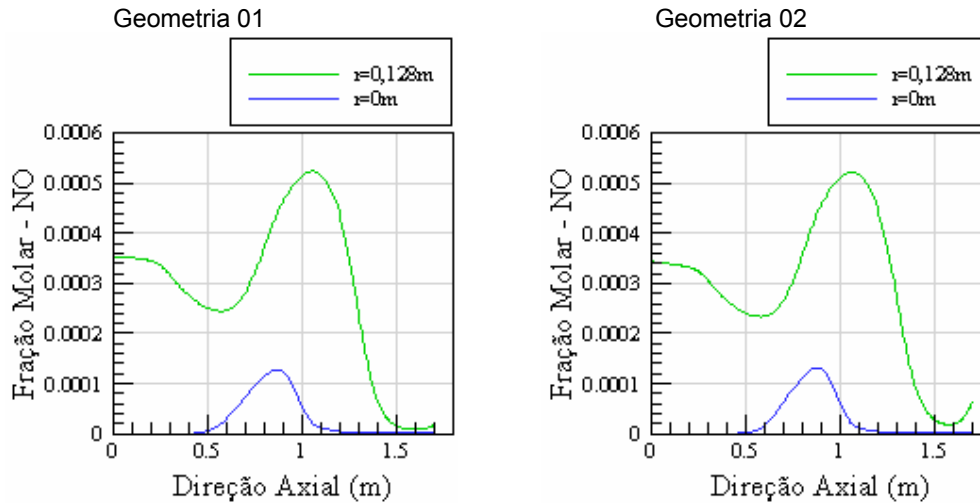


Figura 5.5 – Concentração (em fração molar) do NO, para a modelagem 01, em $r=0m$ (eixo de simetria) e em $r=0,128m$.

De acordo com os resultados descritos, diferenças foram encontradas nos resultados para as duas geometrias. Como a geometria 02 se aproxima mais da realidade, somente esta foi utilizada nas outras modelagens estudadas.

5.1.1.2 Modelagem 02 – Combustão em 1 Etapa – Fornalha não Adiabática

A modelagem 02 refere-se a uma fornalha não adiabática com fluxo de calor constante, igual a 26,64KW, como apresentado no capítulo 4.

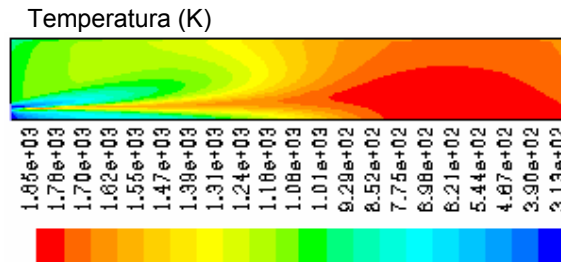


Figura 5.6 – Distribuição das temperaturas (K), para o processo em uma etapa no interior da fornalha cilíndrica não adiabática (modelagem 02).

As Figuras 5.6 e 5.7 apresentam níveis mais baixos de temperatura quando comparadas às Figuras 5.2 e 5.3, referentes à modelagem 01 (processo em uma etapa para uma fornalha adiabática). A modelagem 02 atinge 1850K,

cerca de 120K a menos do que a modelagem 01, que diz respeito ao processo adiabático.

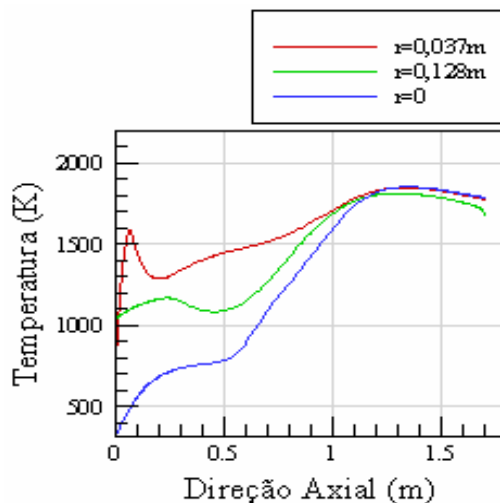


Figura 5.7 – Distribuição de temperaturas (K), referente à modelagem 02, para $r = 0m$ (simetria), $r = 0,037m$ e para $r = 0,128m$.

A máxima concentração de NO (Figuras 5.8 e 5.9) dá-se, próximo à metade do comprimento da fornalha, e atinge cerca de 416ppmv. Na saída do combustor, sua concentração já está bem mais diluída e tem seus valores em torno de 10 e 20ppmv.

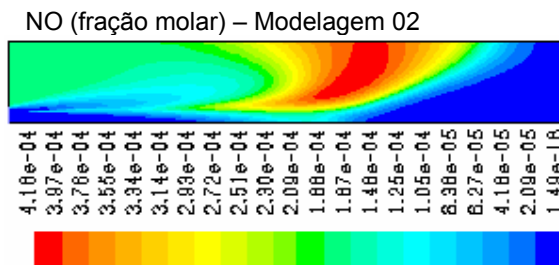


Figura 5.8 – Concentração do NO (em fração molar), para o processo em uma etapa no interior da fornalha cilíndrica não adiabática (modelagem 02).

Na modelagem 02 (processo não adiabático em uma etapa) percebeu-se uma diminuição um pouco superior a 100ppmv na concentração de NO (valores máximos) com relação à modelagem 01 (processo adiabático em uma etapa). Este fato revela a influência da temperatura na formação dessa espécie no processo de combustão do biogás.

As emissões do NO serão analisadas, juntamente com outros poluentes, posteriormente ainda neste capítulo.

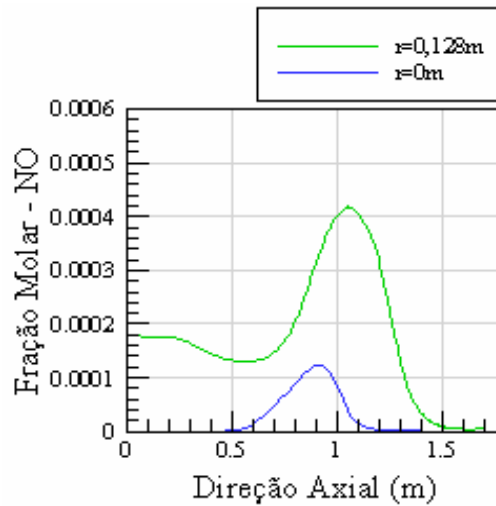


Figura 5.9 – Concentração, fração molar, do NO, referente à modelagem 02, para $r = 0$ (simetria) e para $r = 0,128m$.

No interior da fornalha existe uma região de recirculação (Vide Figura 5.1) percebida também em outros gráficos. A concentração de oxigênio é maior, justamente, nesta região, e isto indica que a recirculação contribui no processo de oxidação das espécies existentes no combustível. As espécies, produtos das reações químicas, com exceção da água, indicam como região de pico, em suas concentrações, regiões próximas à recirculação (Vide Figura 5.11).

Os gráficos de distribuição das concentrações de SO_2 , O_2 , CO_2 e H_2O no interior da fornalha cilíndrica, para a modelagem 02, podem ser encontrados na Figura 5.10.

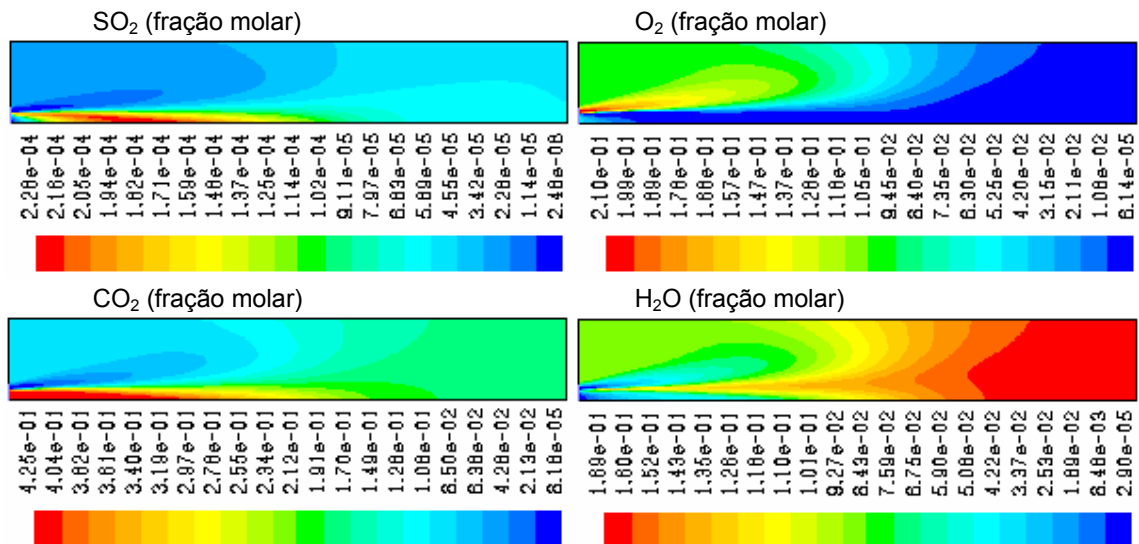


Figura 5.10 – Concentrações, em fração molar, de SO_2 , O_2 , CO_2 e H_2O , referentes à modelagem 02, no interior da fornalha cilíndrica.

O dióxido de enxofre atinge 228ppmv próximo ao queimador, depois percebe-se uma diluição registrando na saída da fornalha valores próximos 60ppmv. Emissões nestas concentrações necessitam de medidas de controle que proporcionem seu abatimento a níveis aceitáveis.

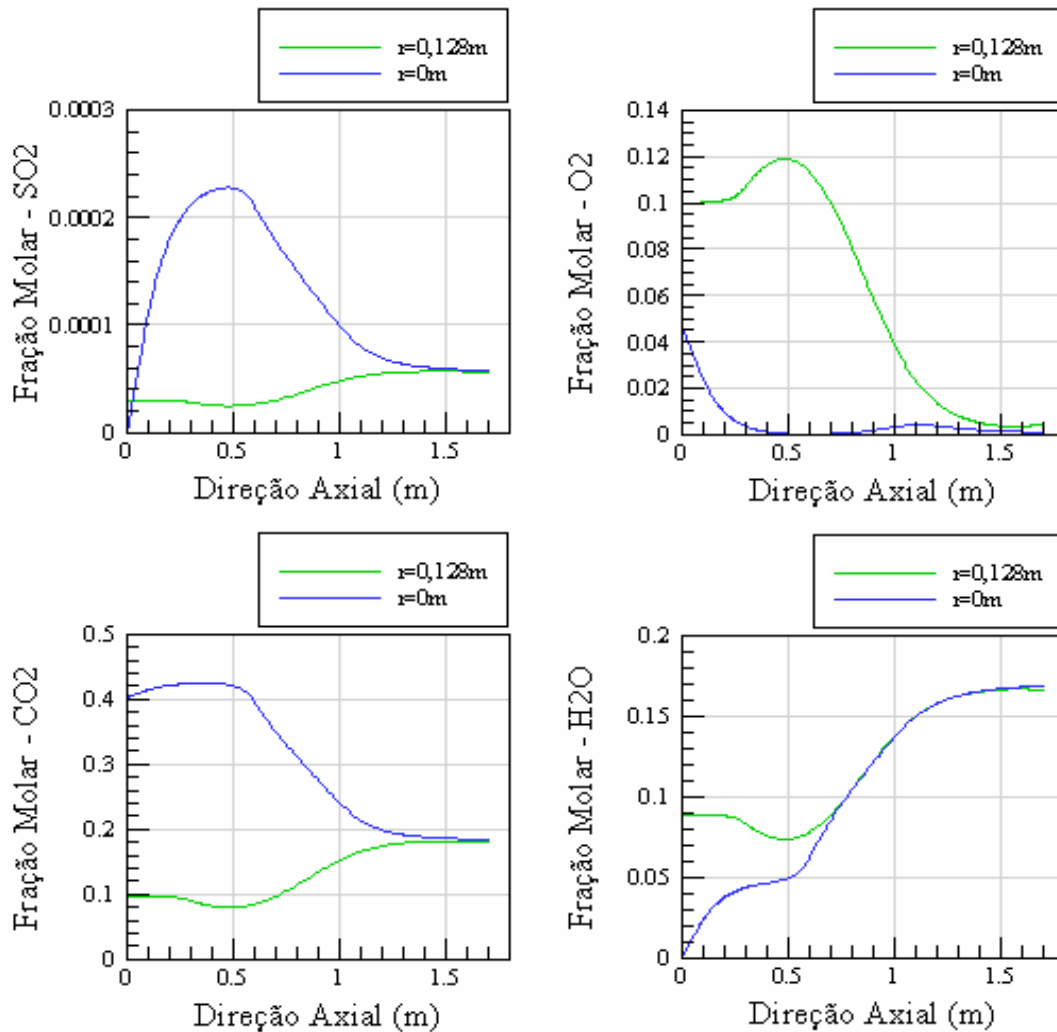


Figura 5.11 – Concentrações, em fração molar, de SO₂, O₂, CO₂ e H₂O, referentes à modelagem 02.

Os perfis das concentrações, em relação à direção axial, das espécies descritas na Figura 5.10, são apresentados na Figura 5.11.

O gás carbônico também tem o seu pico, em torno de 40%, próximo ao queimador, estando bem mais diluído na saída, com menos da metade desse valor (em torno de 18%). O inverso acontece, com relação ao vapor d'água, que atinge seu pico, próximo a 17%, justamente na saída da fornalha.

O metano é consumido numa região mais afastada do queimador (Vide Figura 5.13), quando comparado aos VOCs (Vide Figura 5.14), isto porque este hidrocarboneto tem uma composição mais estável do que os demais, e está em maior quantidade no combustível (biogás). Contudo, ele deveria ser totalmente consumido, pois a mistura se aproxima da estequiometria. Na saída suas emissões atingem cerca de 0,08%.

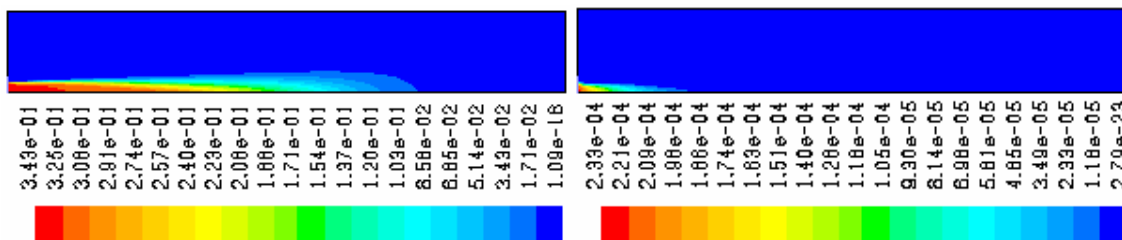


Figura 5.12 – Concentrações, em fração molar, de CH₄ e do H₂S, referentes à modelagem 02, no interior da fornalha cilíndrica.

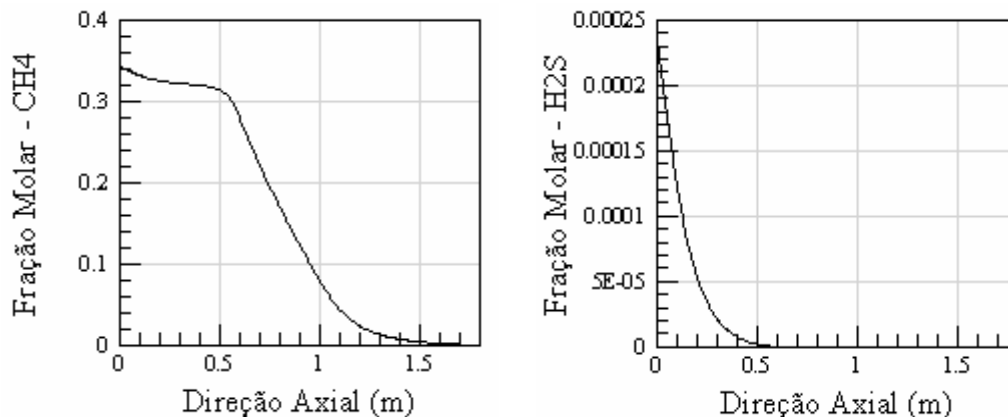


Figura 5.13 – Concentrações, em fração molar, de CH₄ e do H₂S, referentes à modelagem 02, ao longo do eixo de simetria.

O gás sulfídrico, ao contrário do metano, é totalmente consumido ainda próximo ao queimador.

Os hidrocarbonetos (VOCs), a exemplo do gás sulfídrico, são consumidos próximos ao queimador, em $x < 0,5m$. Suas concentrações ao longo do eixo de simetria mostram um decaimento brusco bem próximo à região de entrada dos gases na fornalha (Vide Figura 5.14). Isto acontece pois estas espécies estão em baixas concentrações no combustível e devido ao fato de que a região de recirculação é próxima à entrada da fornalha.

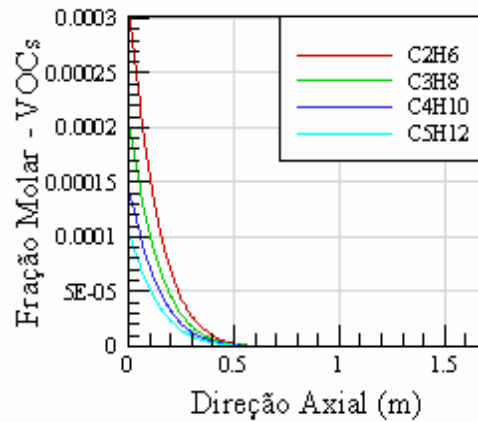


Figura 5.14 – Concentrações, em fração molar, de C₂H₆, C₃H₈, C₄H₁₀ e C₅H₁₂, referentes à modelagem 02, ao longo do eixo de simetria.

É possível inferir, portanto, que a recirculação, que ocorre próximo ao queimador, é fator importante para a oxidação dessas espécies ainda próximo à região de entrada.

5.1.2 Combustão em 2 Etapas

As modelagens 03 e 04 referem-se ao processo de oxidação dos hidrocarbonetos em duas etapas, por meio da formação do CO, e posterior formação do CO₂. A modelagem em duas etapas se aproxima mais da condição real e ainda possibilita obter informações a respeito da concentração do CO no processo de combustão do biogás estudado. Estas modelagens utilizaram a formulação de Taxas Finitas Generalizadas. As reações para estas modelagens podem ser encontradas na Tabela 5.4.

	Reações Químicas
G	$CH_4 + 1,5O_2 \longrightarrow CO + 2H_2O$
H	$C_2H_6 + 2,5O_2 \longrightarrow 2CO + 3H_2O$
I	$C_3H_8 + 3,5O_2 \longrightarrow 3CO + 4H_2O$
J	$C_4H_{10} + 4,5O_2 \longrightarrow 4CO + 5H_2O$
K	$C_5H_{12} + 5,5O_2 \longrightarrow 5CO + 6H_2O$
L	$CO + 0,5O_2 \longrightarrow CO_2$
F	$H_2S + 1,5O_2 \longrightarrow SO_2 + H_2O$

Tabela 5.4 – Reações globais para o processo de combustão em 2 etapas.

5.1.2.1

Modelagem 03 - Combustão em 2 Etapas – Fornalha Adiabática

A modelagem 03 refere-se ao processo de combustão em duas etapas numa fornalha adiabática. São apresentados os perfis de temperatura e de concentração de NO, para ser possível à comparação com o processo em uma única etapa (modelagem 01).

As Figuras 5.15 e 5.16 apresentam a distribuição de temperatura, para a modelagem 03, no interior da fornalha cilíndrica adiabática.

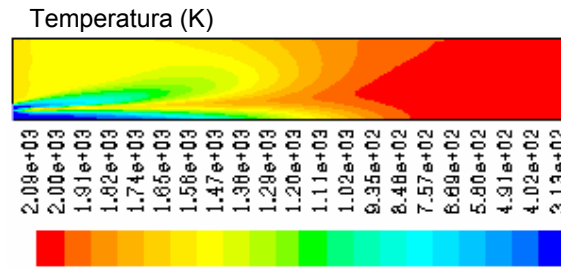


Figura 5.15 – Distribuição das temperaturas, para a modelagem 03, no interior da fornalha cilíndrica.

Comparando-se os dois processos adiabáticos, percebe-se uma diferença nos seus valores máximos de temperatura. A modelagem 03, em duas etapas, atinge 10K a menos que a modelagem 01, em uma única etapa. Isto devido à influência do processo de formação do CO.

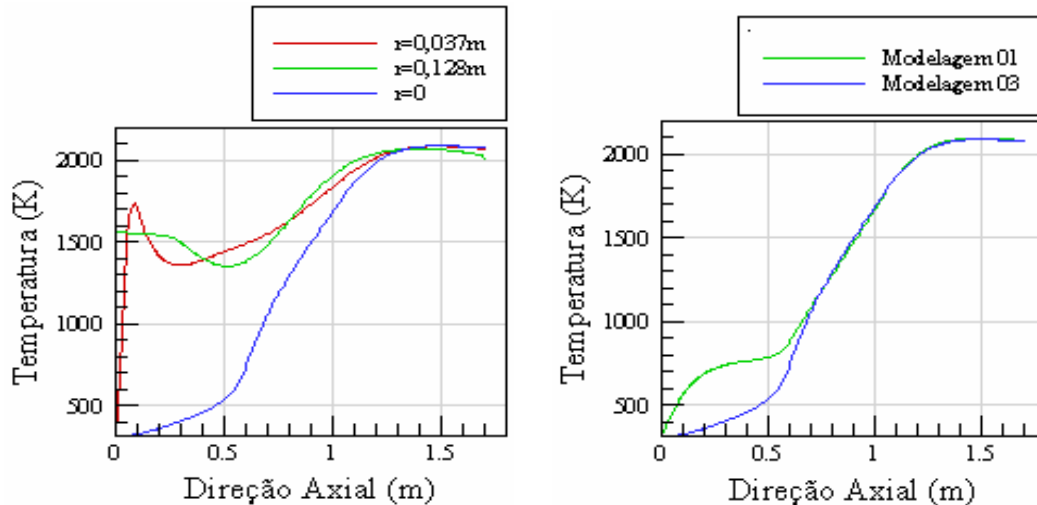


Figura 5.16 – Distribuição de temperaturas, referente à modelagem 03, para $r = 0$ (simetria), $r = 0,037m$ e para $r = 0,128m$, (gráfico à esquerda). Gráfico comparativo das temperaturas ao longo do eixo de simetria entre os processos adiabáticos em uma etapa (modelagem 01) e em duas etapas (modelagem 03), gráfico à direita.

As temperaturas no processo, em duas etapas, são inferiores em relação ao processo em uma única etapa na região próxima ao queimador (Vide Figura 5.16), devido ao consumo das espécies combustíveis nas reações de formação do CO.

Nas Figuras 5.17 e 5.18 são apresentados gráficos, para a modelagem 03, da distribuição das concentrações de NO e CO formados no processo de combustão.

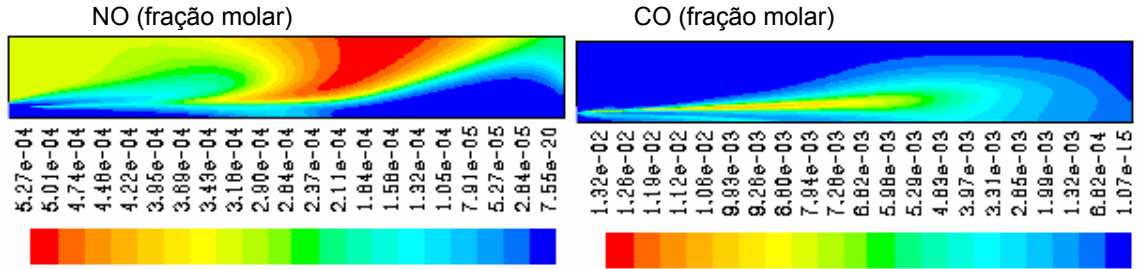


Figura 5.17 – Concentração do NO e CO (em fração molar), para a modelagem 03, no interior da fornalha cilíndrica.

A concentração máxima de NO, em torno de 527ppmv, para a modelagem 03 também é inferior ao registrado na modelagem 01, em torno de 538ppmv. Esta pequena diferença é compatível com a diferença encontrada entre as máximas temperaturas, daí ser possível perceber a dependência da formação do NO com relação à temperatura.

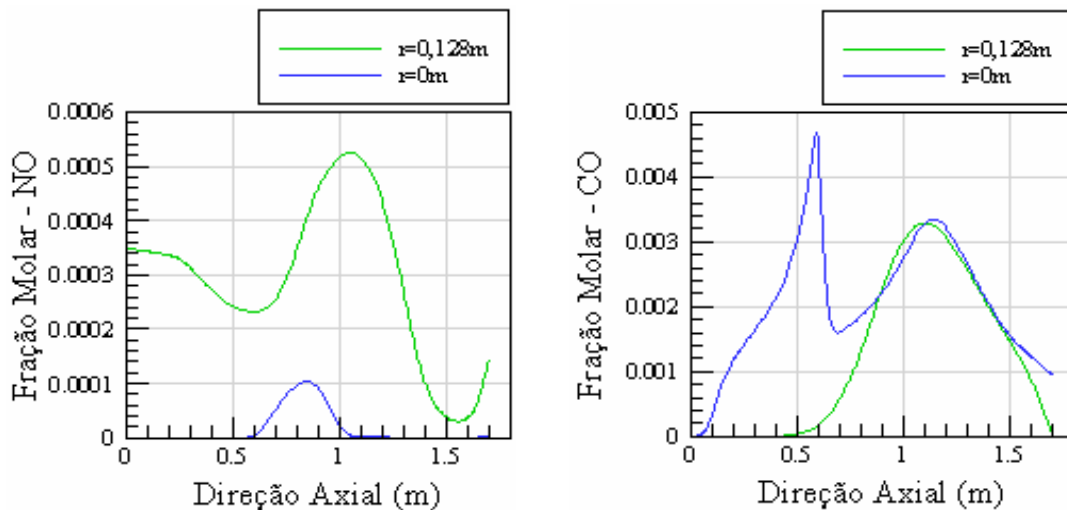


Figura 5.18 – Concentrações (em fração molar) do NO e do CO, referentes à modelagem 03, para $r = 0$ (simetria) e para $r = 0,128m$.

A concentração máxima do CO, para este caso adiabático, de acordo com a Figura 5.17, é de 1,32%. O pico de sua concentração ao longo do eixo de

simetria, apresentado na Figura 5.18, atinge 0,46%, este valor, contudo, está bem mais diluído na saída (em torno de 0,1% na simetria e mais próximo de zero para $r=0,128m$).

Os valores das emissões, conseqüentes do processo de combustão do biogás, serão apresentados e comentados posteriormente.

5.1.2.2 Modelagem 04 - Combustão em 2 Etapas – Fornalha não Adiabática

A modelagem 04 refere-se ao processo de combustão do biogás, em duas etapas, numa fornalha não adiabática, com fluxo de calor constante, igual a 26,64KW. As Figuras 5.19 e 5.20 apresentam a distribuição de temperatura, referentes a esta modelagem.

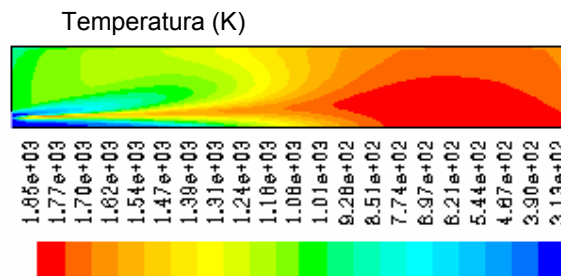


Figura 5.19 – Distribuição das temperaturas (K), para o processo de combustão em duas etapas no interior da fornalha cilíndrica não adiabática (Modelagem 04).

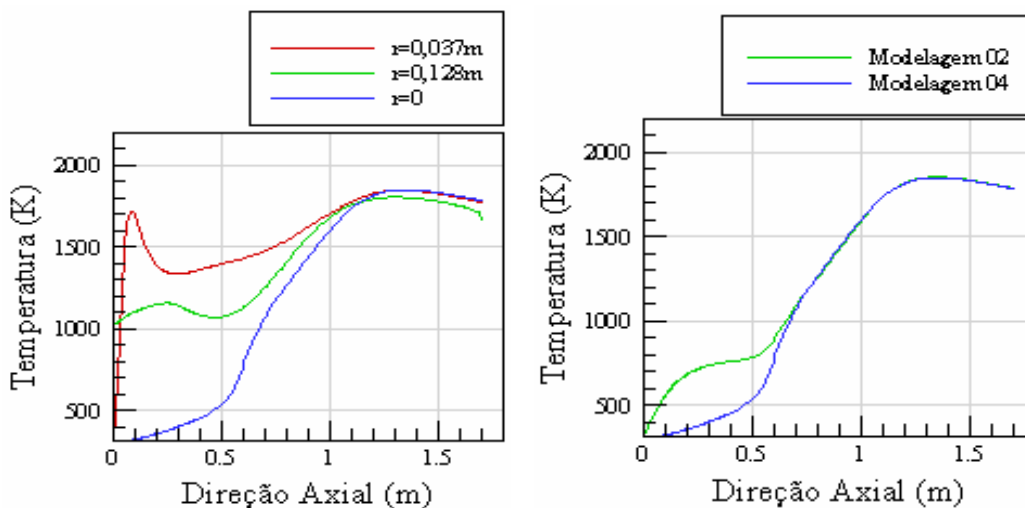


Figura 5.20 – Distribuição de temperaturas, referente à modelagem 04, para $r= 0$ (simetria), $r= 0,037m$ e para $r= 0,128m$, (gráfico à esquerda). Gráfico comparativo das temperaturas ao longo do eixo de simetria entre os processos não adiabáticos em uma etapa (modelagem 02) e em duas etapas (modelagem 04), à direita.

Os níveis de temperatura, para a modelagem 04, em duas etapas, são inferiores ao caso não adiabático, em uma etapa, apresentado na modelagem 02. A diferença ocorre na região próxima ao queimador (Vide Figura 5.20) as máximas temperaturas, no entanto, são as mesmas. Em consequência disso, os níveis das concentrações de NO, encontrados no processo em duas etapas têm valores inferiores, porém, muito próximos aos encontrados na modelagem 02, em uma etapa.

As Figuras 5.21 e 5.22 referem-se aos gráficos de distribuição das concentrações de NO e CO, para a modelagem 04 (Vide Tabela 5.1), no interior da fornalha cilíndrica.

Os níveis de monóxido de carbono encontrados no processo não adiabático, em duas etapas (modelagem 04), são bastante próximos aos encontrados no processo adiabático (modelagem 03), não se percebendo, portanto, uma influência da temperatura em relação à formação do CO.

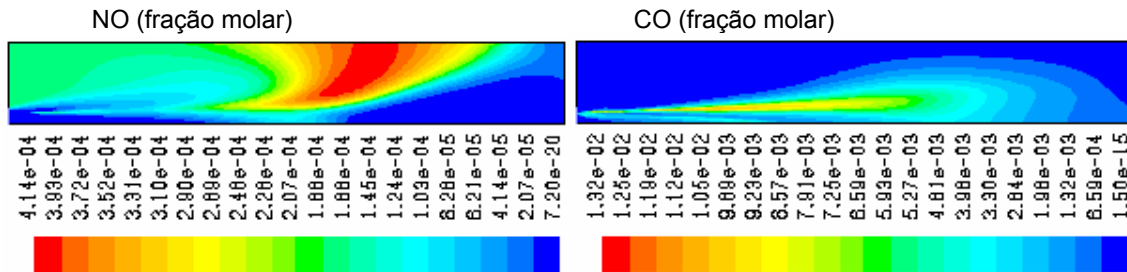


Figura 5.21 – Concentração do NO e CO (em fração molar), para a modelagem 04, no interior da fornalha cilíndrica.

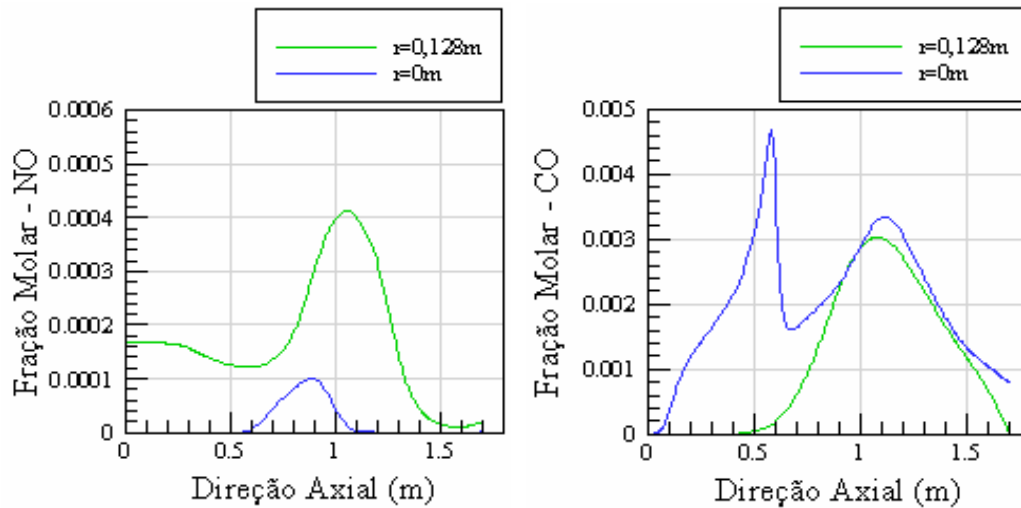


Figura 5.22 – Concentrações (em fração molar) do NO e do CO, referentes à modelagem 04, para $r = 0$ (simetria) e para $r = 0,128m$.

Todas as modelagens apresentadas, até agora, mostram um pico da concentração de NO, aproximadamente, no meio da fornalha (com relação ao seu comprimento). Porém, na saída da mesma, apresenta uma quantidade bem inferior ao máximo atingido. Isto ocorre, como já foi dito, devido à sua diluição em relação às outras espécies. A recirculação, na medida que é fator contribuinte no processo de diluição, contribui também na obtenção de valores inferiores da concentração de NO na saída da fornalha cilíndrica. O mesmo pode-se dizer, que ocorre em relação aos níveis de CO no interior da câmara de combustão.

A Figura 5.23 reúne, para a modelagem 04, os gráficos de distribuição das concentrações de SO₂, O₂, CO₂ e H₂O no interior da fornalha cilíndrica. Nesta figura pode-se mais uma vez identificar a região de recirculação e inferir a sua contribuição no processo de oxidação estudado.

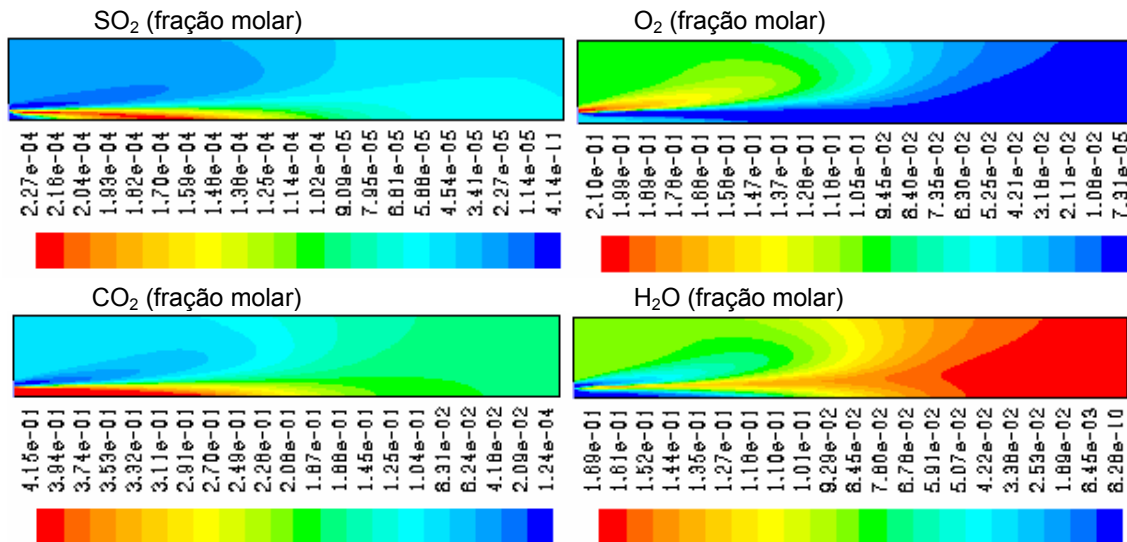


Figura 5.23 – Concentrações, em fração molar, de SO₂, O₂, CO₂ e H₂O, referentes à modelagem 04, no interior da fornalha cilíndrica.

Um ponto interessante de se observar é o fato de que na saída da fornalha esperava-se que, para uma relação de estequiometria, a concentração de oxigênio fosse zero ou muito próxima de zero. Os valores encontrados atingem valores próximos a 0,6%. Estes valores podem ser identificados mais claramente na Figuras 5.53 e 5.54.

Os perfis das concentrações de SO₂, O₂, CO₂ e H₂O, em r=0 e r= 0,128m, para a modelagem 04 (processo não adiabático em duas etapas), apresentados na Figura 5.24, são semelhantes aos resultados referentes à modelagem 02 para uma única etapa.

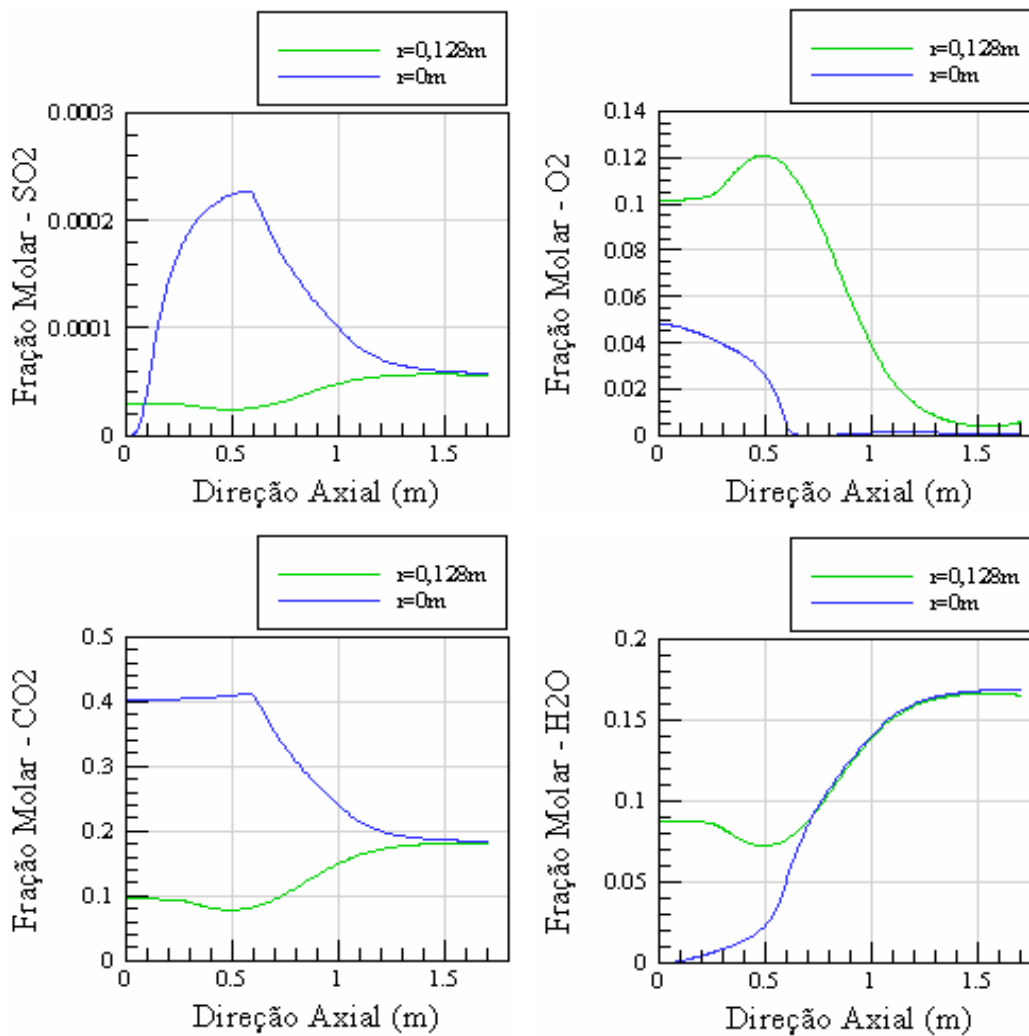


Figura 5.24 – Concentrações, em fração molar, de SO₂, O₂, CO₂ e H₂O, referentes à modelagem 04, ao longo do eixo de simetria.

O metano, como foi dito anteriormente, é consumido em um espaço superior às demais espécies que compõe o combustível devido à sua composição estável, mas principalmente por ser o combustível em maior quantidade no biogás.

O gás sulfídrico (H₂S) é totalmente consumido ainda próximo ao queimador. Um pouco depois da posição $x= 0,5\text{m}$ na direção axial (Vide Figuras 5.24 e 5.26) o gás sulfídrico está totalmente consumido e o dióxido de enxofre atinge o seu pico de 227ppmv.

As Figuras 5.25 e 5.26 apresentam, respectivamente, a distribuição das concentrações de metano e do gás sulfídrico no interior da fornalha cilíndrica e os perfis de suas concentrações ao longo do eixo de simetria e para $r= 0,128\text{m}$.

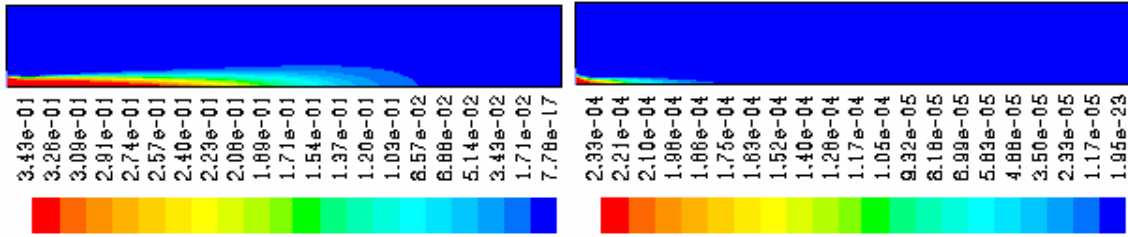


Figura 5.25 – Concentrações, em fração molar, de CH₄, e H₂S, referentes à modelagem 04, no interior da fornalha cilíndrica.

Em relação ao metano, a exemplo do oxigênio, se esperava, na saída, concentrações iguais ou muito próximas de zero devido à proximidade com a estequiometria. Contudo foram encontrados níveis superiores que motivam novos estudos para melhor modelarem esse processo de combustão.

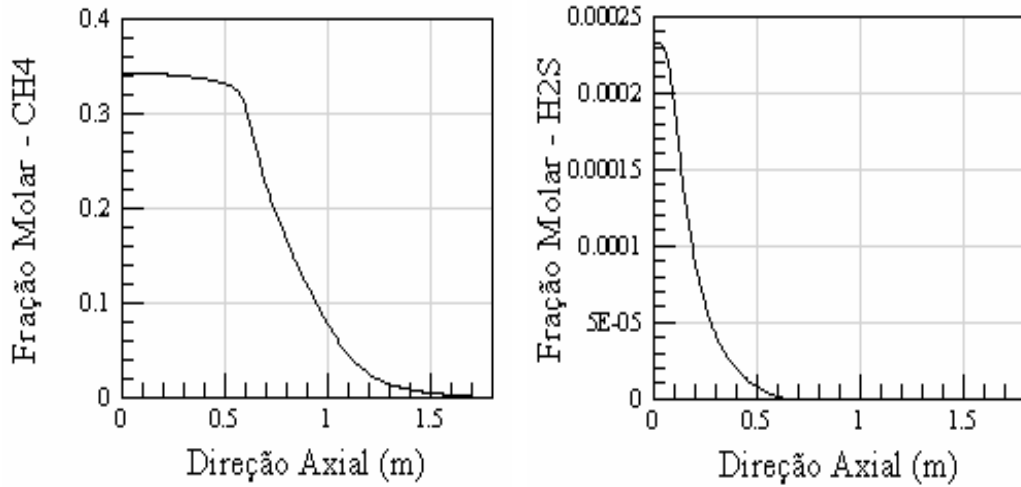


Figura 5.26 – Concentrações, em fração molar, de CH₄ e H₂S, referentes à modelagem 04, para r= 0m (simetria).

Os hidrocarbonetos também são consumidos próximos ao queimador. Com exceção do metano, suas concentrações são bastante baixas dentro da composição do combustível. Os perfis de suas concentrações, ao longo do eixo de simetria, são apresentados nos gráficos contidos na Figura 5.27.

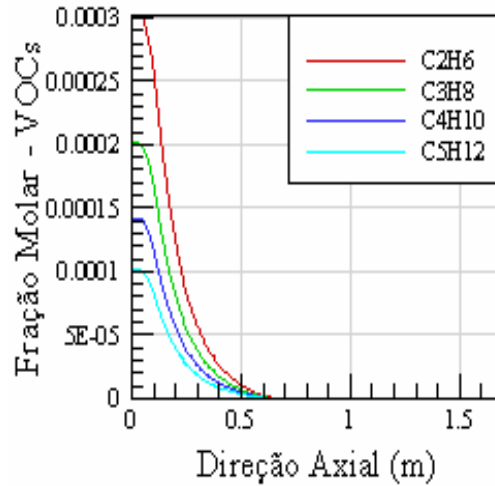


Figura 5.27 – Concentrações, em fração molar, de C₂H₆, C₃H₈, C₄H₁₀ e C₅H₁₂, referentes à modelagem 04, para r= 0m (simetria).

Um estudo interessante de ser feito seria o de modelar individualmente os processos de formação de NO. Os resultados obtidos nestas simulações permitiriam identificar quais destes processos têm maior influência, durante a combustão do biogás estudado.

Com esse objetivo, a partir da modelagem 04, foram realizadas simulações habilitando, individualmente, cada processo de formação do NO. Os resultados destas simulações são apresentados nas Figuras 5.28 e 5.29.

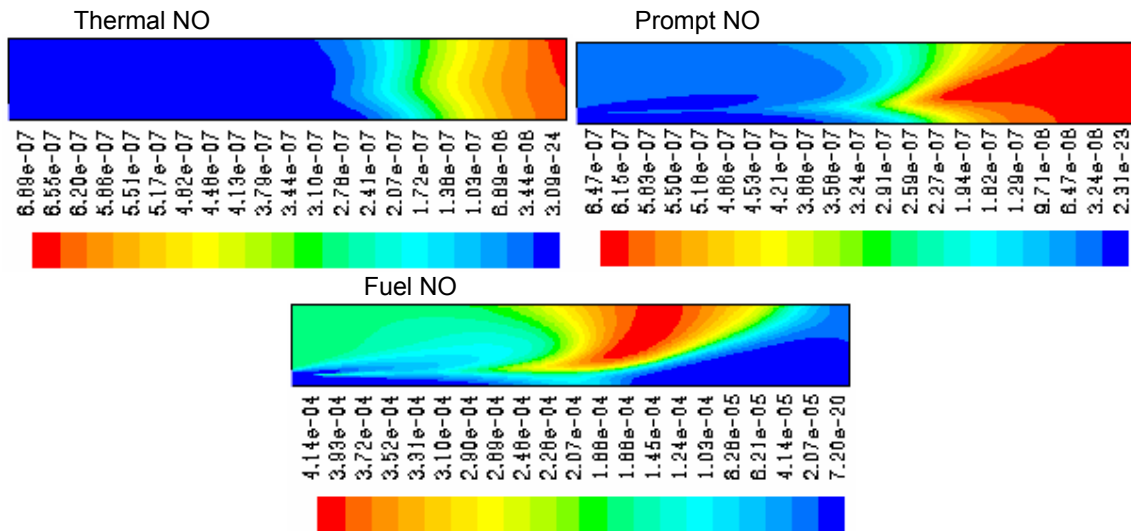


Figura 5.28 – Concentrações, em fração molar, de NO, para os diferentes mecanismos de formação do NO, no interior da fornalha.

Comparando os perfis, ao longo do eixo de simetria (Vide Figura 5.29), das concentrações de NO, para os três processos isoladamente, nota-se que o seu valor máximo ocorre no interior da fornalha e é obtido pelo fuel NO.

Quando observa-se o gráfico da modelagem 04 (Vide Figura 5.21), que reúne os três processos em uma mesma simulação, é possível intuir como mecanismo de formação de NO determinante no processo de combustão do biogás, o fuel NO.

Devido ao fato de que no primeiro gráfico (à esquerda) não é possível avaliar as curvas referentes aos mecanismos thermal e prompt, é apresentado também o gráfico em detalhe, no qual é possível identificar as curvas correspondentes a esses mecanismos.

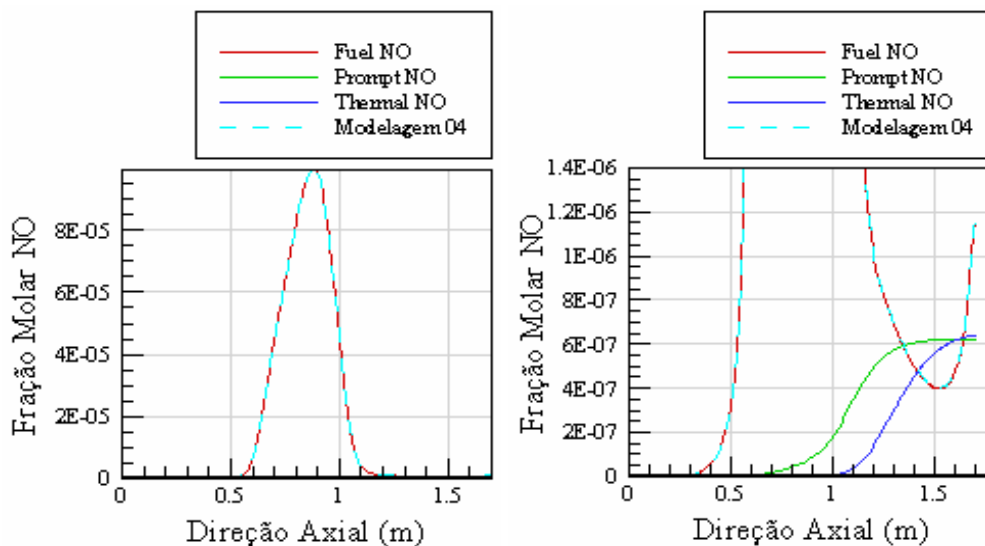


Figura 5.29 – Gráfico comparativo dos mecanismos de formação de NO. Gráfico à direita é o detalhe do gráfico à esquerda.

5.1.2.3

Modelagem 05 - Combustão em 2 Etapas – Fornalha não Adiabática – Propriedades Variáveis

Assumir, como constante, as propriedades no interior da fornalha, é uma aproximação bastante simplificada do problema. No processo de combustão, como foi apresentado, existe uma grande variação de temperatura e concentração das espécies envolvidas, conseqüentemente, uma variação das suas propriedades.

Para uma análise mais completa do modelo estudado, na modelagem 05, foram atribuídas também condições variáveis, à viscosidade e à condutividade

térmica, antes consideradas constantes. Ambas são calculadas com base na teoria cinética dos gases (Vide seção 4.3). Isto possibilitou a comparação de seus resultados com os obtidos anteriormente, para propriedades constantes (modelagem 04).

Para a modelagem 05, a fornalha é não adiabática, com o mesmo fluxo constante atribuído às modelagens 02 e 04, igual a $26,64\text{kW/m}^2$.

As Figuras 5.30 e 5.31 apresentam a distribuição de temperatura, para a simulação do processo de combustão do biogás, variando as suas propriedades em uma fornalha não adiabática (modelagem 05).

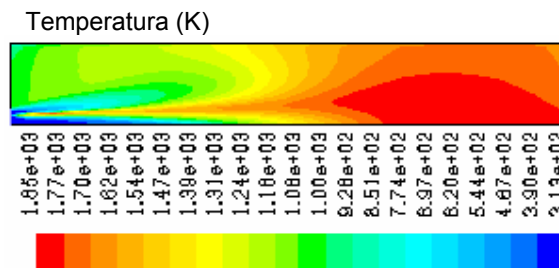


Figura 5.30 – Distribuição das temperaturas (K), para a modelagem 05, no interior da fornalha cilíndrica.

Os gráficos, referentes à distribuição de temperaturas das modelagens 04 e 05, são concordantes, do ponto de vista qualitativo e quantitativo. Atingem o mesmo valor máximo de 1850K na mesma região de pico.

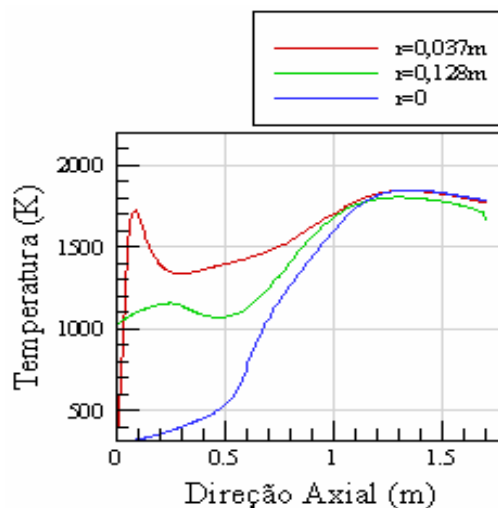


Figura 5.31 – Distribuição de temperaturas (K), referente à modelagem 05, para $r = 0$ (simetria), $r = 0,037$ e para $r = 0,128\text{m}$.

Os perfis de NO e CO, referentes à modelagem 05, também são concordantes com os obtidos pela modelagem 04. Vide Figuras 5.32 e 5.33.

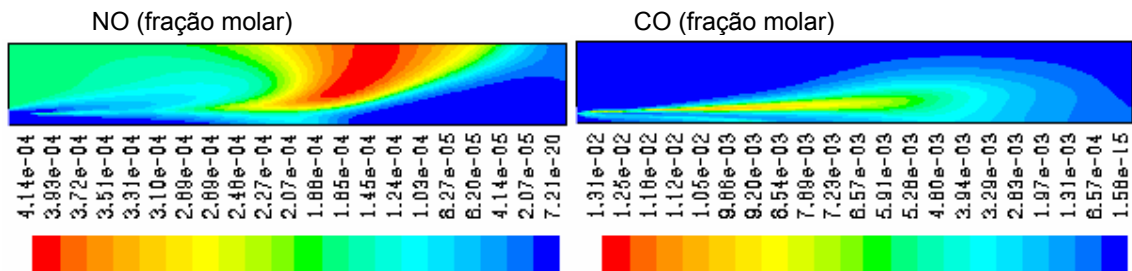


Figura 5.32 – Concentração do NO e CO (em fração molar), para a modelagem 05, no interior da fornalha cilíndrica.

Os detalhes, quanto às emissões dessas espécies, também para a modelagem 05, serão apresentados posteriormente.

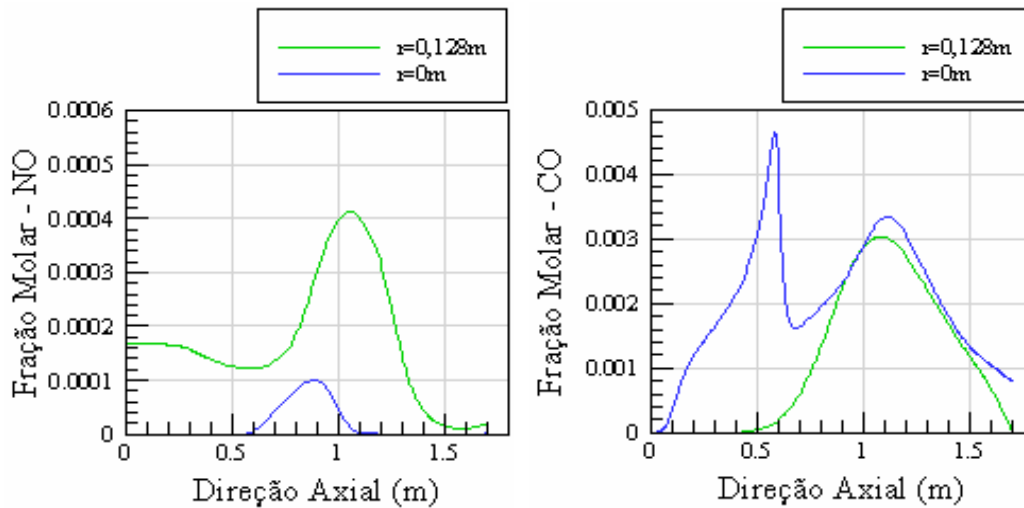


Figura 5.33 – Concentrações (em fração molar) do NO e do CO, referentes à modelagem 05, para $r = 0$ (simetria) e para $r = 0,128m$.

As Figuras 5.34 e 5.35 reúnem, para a modelagem 05, os gráficos de distribuição das concentrações de SO_2 , O_2 , CO_2 e H_2O .

No caso do dióxido de enxofre, oxigênio, gás carbônico e do vapor d’água, os resultados, referentes à modelagem 05 (combustão em duas etapas com propriedades variáveis), são muito próximos dos resultados encontrados na modelagem 04 (propriedades constantes).

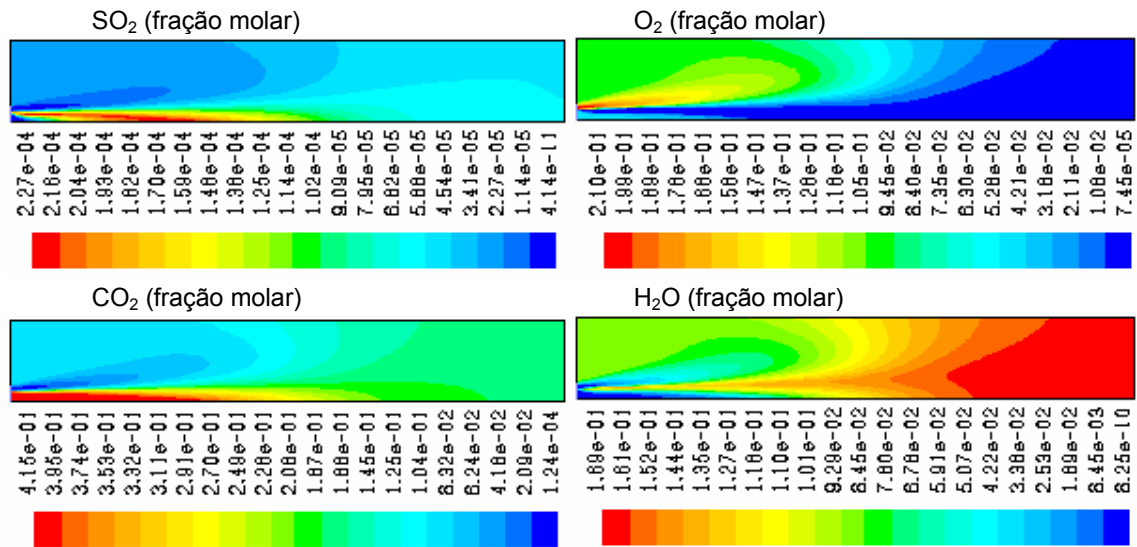


Figura 5.34 – Concentrações, em fração molar, de SO₂, O₂, CO₂ e H₂O, referentes à modelagem 05, no interior da fornalha cilíndrica.

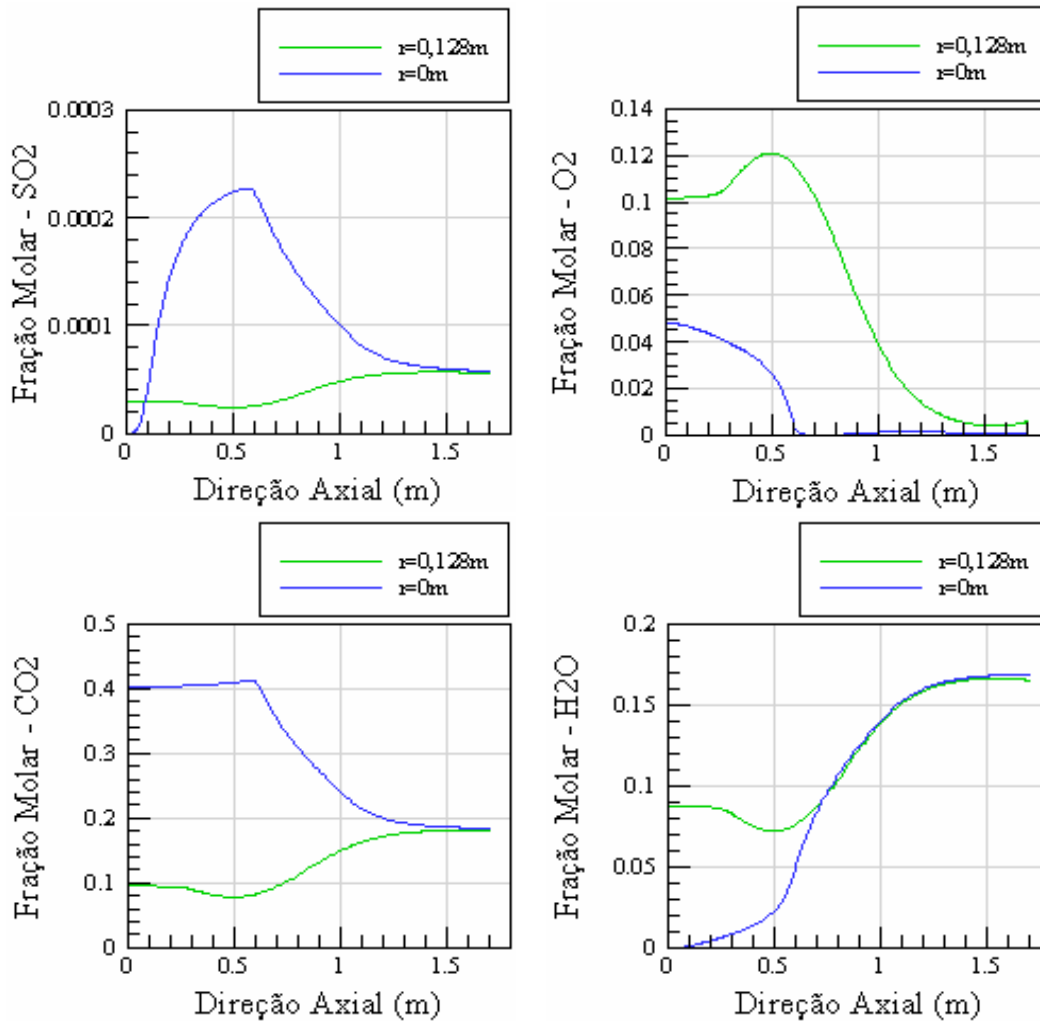


Figura 5.35 – Concentrações, em fração molar, de SO₂, O₂, CO₂ e H₂O, referentes à modelagem 05, ao longo do eixo de simetria.

Nos resultados obtidos na modelagem 05, da mesma forma que na modelagem 04, o metano não é consumido em níveis satisfatórios, atingindo, na saída da fornalha, concentrações próximas a 0,1%. Mais detalhes, a respeito das emissões do metano, serão apresentados na última seção deste capítulo.

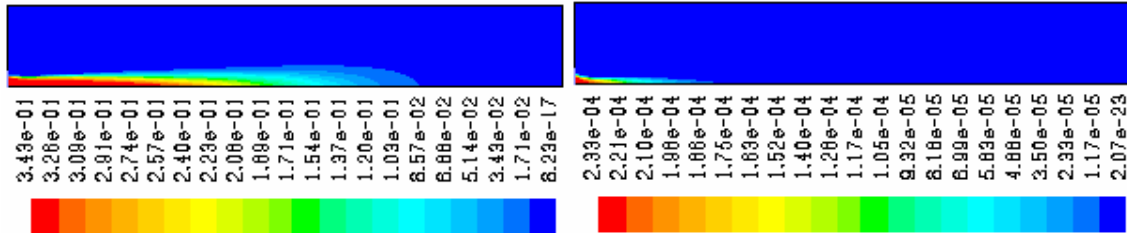


Figura 5.36 – Concentrações, em fração molar, de CH₄ e H₂S, referentes à modelagem 05, ao longo do eixo de simetria.

O gás sulfídrico, a exemplo do que foi visto nos resultados das modelagens anteriores, é consumido totalmente ainda próximo ao queimador. Vide Figuras 5.36 e 5.37.

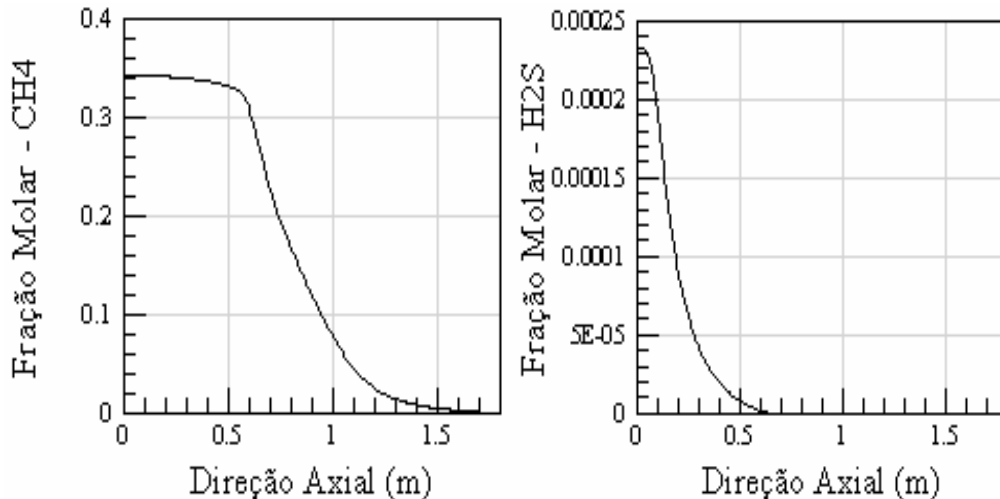


Figura 5.37 – Concentrações, em fração molar, de CH₄ e H₂S, referentes à modelagem 05, ao longo do eixo de simetria.

Os hidrocarbonetos, assim como para as modelagens anteriores, são consumidos próximos ao queimador. Suas concentrações ao longo do eixo de simetria $r = 0$ e em $r = 0,128$, são apresentadas nos gráficos contidos na Figura 5.38.

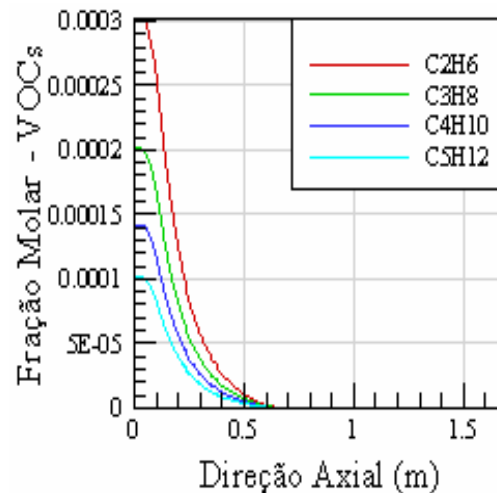


Figura 5.38 – Concentrações, em fração molar, de C₂H₆, C₃H₈, C₄H₁₀ e C₅H₁₂, referentes à modelagem 05, para $r=0$ (simetria).

A concordância entre todos os resultados das modelagens 04 e 05 é significativa. Esse fato, neste caso, permite utilizar a modelagem mais simplificada (modelagem 04) que comporta um menor tempo computacional (cerca de 1500 iterações) sem danos aos resultados do problema estudado.

5.2

Modelagens utilizando Fração de Mistura (Formulação PDF)

Utilizou-se o modelo de fração de mistura com o objetivo de compará-lo ao modelo de taxas finitas. Como a formulação PDF requer um menor esforço computacional, seria possível, a depender de seus resultados, indicar esta formulação como a mais apropriada para a análise do processo estudado.

Serão comparados, somente, os resultados para a combustão em duas etapas, por ser a situação mais próxima da realidade.

5.2.1

Modelagem 06 – Formulação PDF – Forno Adiabático

A modelagem 06 refere-se ao processo de combustão no modelo de fração de mistura em uma fôrna adiabática. São apresentados os perfis de temperatura e de concentração de NO para possibilitar a sua comparação com o processo adiabático que envolve o modelo de taxas finitas em duas etapas (modelagem 03).

As Figuras 5.39 e 5.40 apresentam a distribuição de temperatura, para a modelagem 06, no interior da fôrna cilíndrica adiabática.

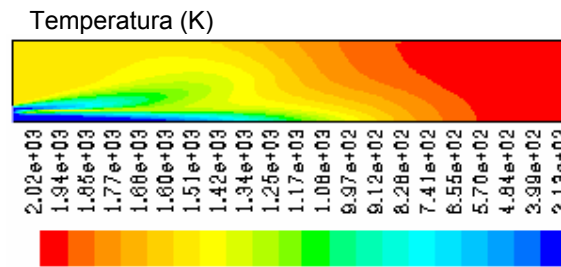


Figura 5.39 – Distribuição das temperaturas, para a modelagem 06, no interior da fornalha cilíndrica.

A temperatura máxima atingida na formulação PDF é 2020K, valor 50K inferior ao encontrado na formulação de taxas finitas, e, qualitativamente, a distribuição de temperaturas, difere da modelagem 03 (Vide Figura 5.15).

A Figura 5.40 apresenta perfis de temperatura para $r=0m$ (ao longo do eixo de simetria), $r=0,037m$ e para $r=0,128m$.

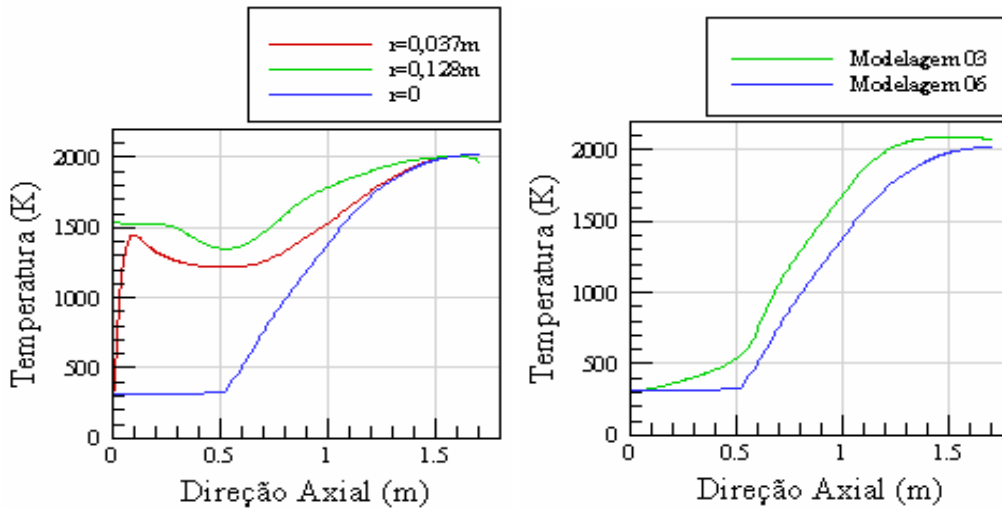


Figura 5.40 – Distribuição de temperaturas, referente à modelagem 06, para $r=0$ (simetria), $r=0,037m$ e para $r=0,128m$ (gráfico à esquerda). Gráfico comparativo dos perfis de temperatura entre os modelos de taxas finitas (modelagem 03) e o modelo de fração de mistura (modelagem 06) para uma fornalha adiabática.

O gráfico, à direita, na Figura 5.40, compara as curvas, ao longo do eixo de simetria, de distribuição de temperatura, das modelagens 03 (taxas finitas) e 06 (formulação PDF). A curva para a formulação PDF até a posição $x=0,5m$, assume uma condição constante, o que não acontece na curva referente à formulação de taxas finitas. A partir desta posição as curvas apresentam a mesma tendência.

Nas Figuras 5.41 e 5.42 são apresentados gráficos, para a modelagem 06, da distribuição das concentrações de NO e CO formados no processo de combustão.

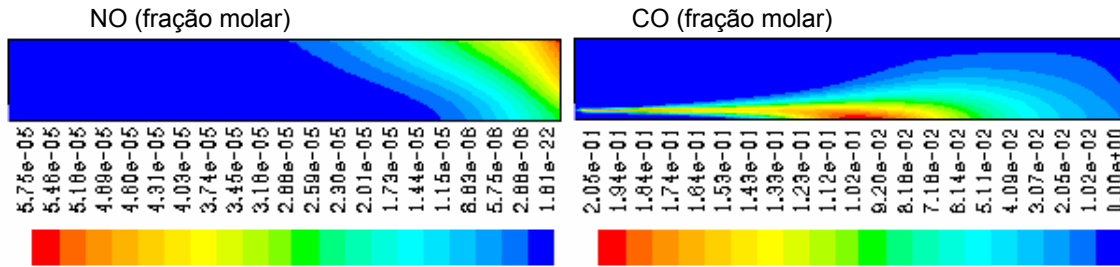


Figura 5.41 – Concentração do NO e CO (em fração molar), para a modelagem 06, no interior da fornalha cilíndrica.

Uma dificuldade foi encontrada nas modelagens 06 e 07. Não foi possível, através do pacote Fluent, habilitar o processo de formação do “fuel NO”. Por essa razão, para ser possível uma análise comparativa, foi realizada uma simulação habilitando-se somente, os processos thermal e prompt NO. (Vide Figura 5.43).

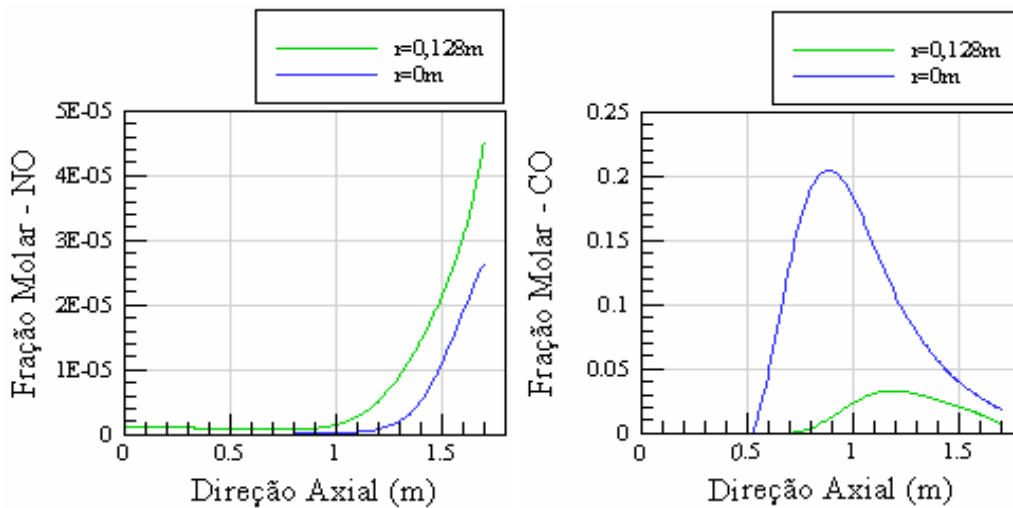


Figura 5.42 – Concentrações (em fração molar) do NO e do CO, referentes à modelagem 06, para $r = 0$ (simetria) e para $r = 0,128m$.

Os gráficos habilitando apenas os mecanismos thermal e prompt NO, no modelo de taxas finitas (Vide Figura 5.43), foram simulados com intuito de compará-los aos resultados obtidos no modelo de fração de mistura (modelagens 06 e 07).

De acordo com as Figuras 5.41 e 5.43, as concentrações do NO, em um processo adiabático, são maiores na região mais próxima da saída da fornalha. Sendo que os resultados para o modelo de fração de mistura apresentam valores inferiores, em relação aos encontrados no modelo de taxas finitas. A concentração máxima de NO para o modelo de fração de mistura está em cerca

de 57,5ppmv, enquanto que para o modelo de taxas finitas os resultados apontam para uma quantidade bem acima, cerca de 145ppmv.

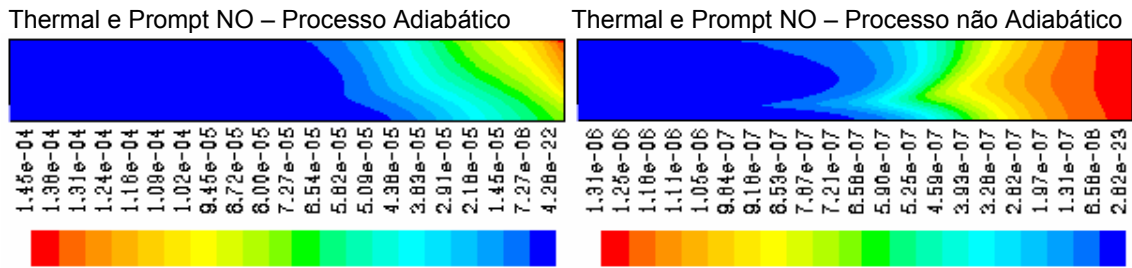


Figura 5.43 – Concentrações (em fração molar) do NO, referentes aos mecanismos thermal NO e prompt NO, utilizando o modelo de taxas finitas, no interior de uma fornalha adiabática (à esquerda), e não adiabática (à direita).

5.2.2

Modelagem 07 – Formulação PDF – Fornalha não Adiabática

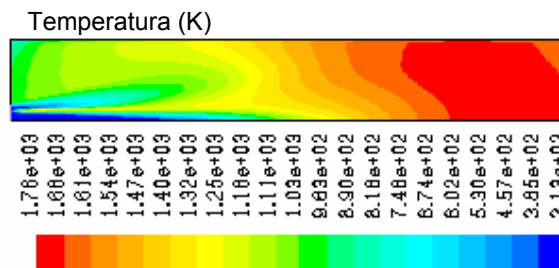


Figura 5.44 – Distribuição das temperaturas (K), para a modelagem 07, no interior da fornalha cilíndrica.

A modelagem 07, refere-se a simulação do processo de combustão, a partir do modelo de fração de mistura, para uma fornalha não adiabática com fluxo de calor constante nas paredes, igual a 26,64KW.

Nas Figuras 5.44 e 5.45, é possível observar que a temperatura máxima atingida pela modelagem 07 é 1760K, cerca de 90K menor que na modelagem 04 (modelo de taxas finitas). Da mesma forma que, para uma fornalha adiabática, o valor máximo para o modelo de fração de mistura foi inferior ao obtido por meio do modelo de taxas finitas. E o campo de temperaturas no interior da fornalha difere para ambos os casos.

No gráfico comparativo entre as modelagens 04 (modelo de taxas finitas) e 07 (modelo de fração de mistura), contido na Figura 5.45, observa-se que a distribuição de temperatura próxima ao queimador, até a posição $x = 0,5m$, como foi observado também no caso adiabático (modelagem 06), apresenta um valor constante no modelo de fração de mistura, o que não acontece para o modelo de taxas finitas.

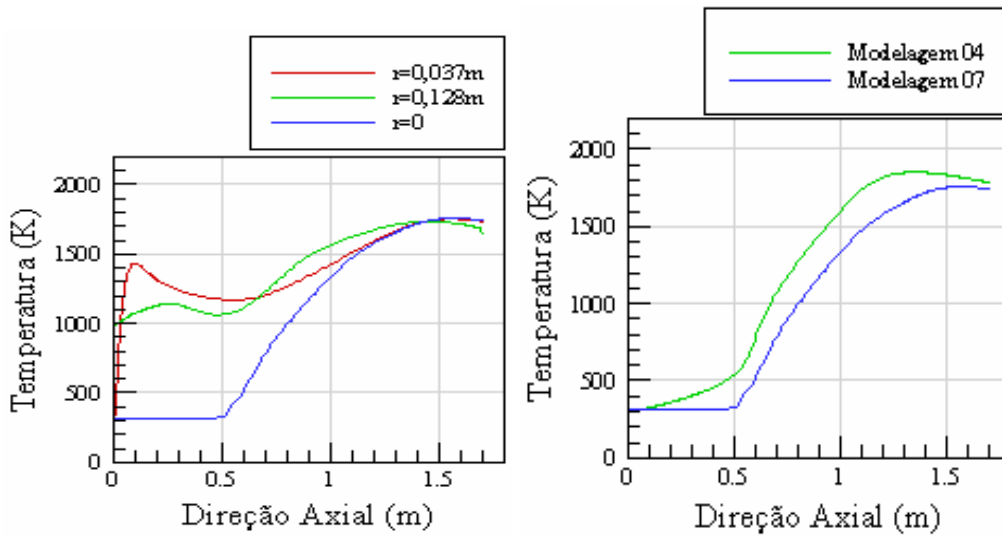


Figura 5.45 – Distribuição de temperaturas (K), referente à modelagem 07, para $r = 0$ (simetria), $r = 0,037m$ e para $r = 0,128m$ (gráfico à esquerda). Gráfico comparativo dos perfis de temperatura, ao longo do eixo de simetria, referentes às modelagens 04 (modelo de taxas finitas em duas etapas) e 07 (modelo de fração de mistura).

De acordo com essas observações, percebe-se que o processo de combustão no modelo de fração de mistura inicia a partir da posição $x = 0,5m$. Isto é percebido igualmente nos perfis de concentração dos hidrocarbonetos (Vide Figura 5.52).

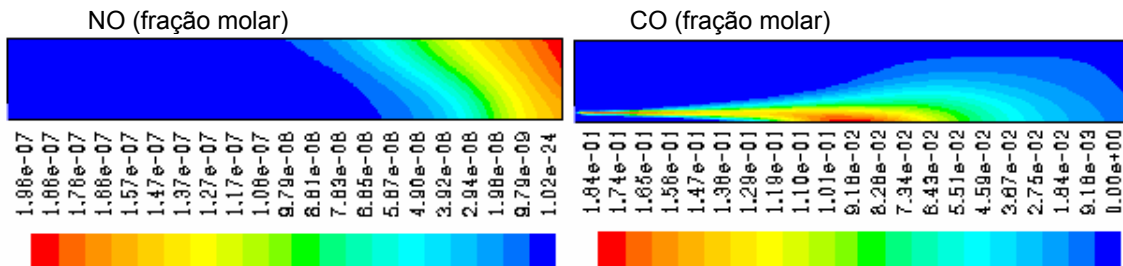


Figura 5.46 – Concentração do NO e CO (em fração molar), para a modelagem 07, no interior da fornalha cilíndrica.

Avaliando somente simulações envolvendo os mecanismos thermal NO e prompt NO, percebe-se uma menor formação de NO para o modelo de fração de mistura (Vide Figura 5.46) em relação aos resultados encontrados para o modelo de taxas finitas (Vide Figura 5.43).

O modelo de fração de mistura registrou uma formação de CO muito elevada (cerca de 20%) no interior da fornalha, fato que não ocorreu no modelo de taxas finitas (cerca de 1,5%). Em ambas as modelagens, o monóxido de carbono está bem mais diluído na saída da fornalha: cerca de 1.5% para o

modelo de fração de mistura e 0,1% considerando-se o modelo de taxas finitas. Vide Figura 5.63.

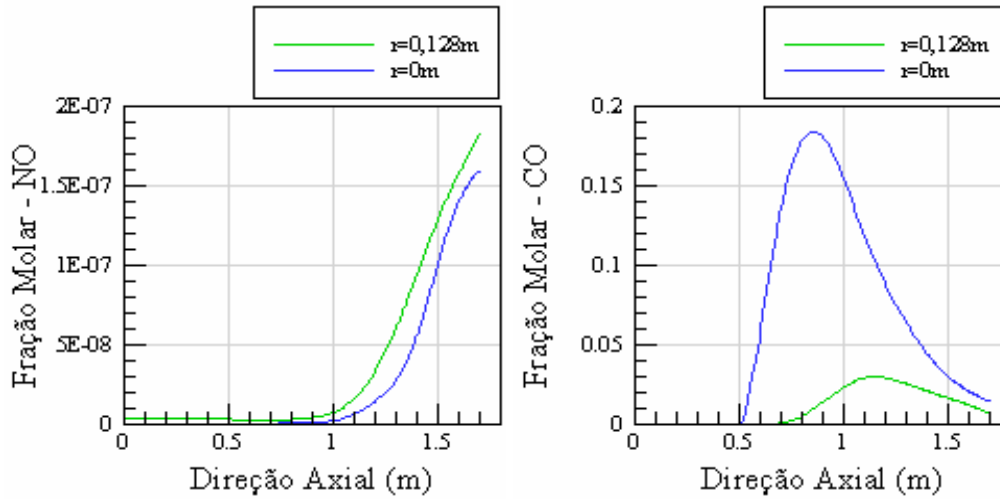


Figura 5.47 – Concentrações (em fração molar) do NO e do CO, referentes à modelagem 07, para $r = 0$ (simetria) e para $r = 0,128m$.

A Figura 5.48 reúne, para a modelagem 07, os gráficos de distribuição das concentrações de SO_2 , O_2 , CO_2 e H_2O no interior da fornalha cilíndrica.

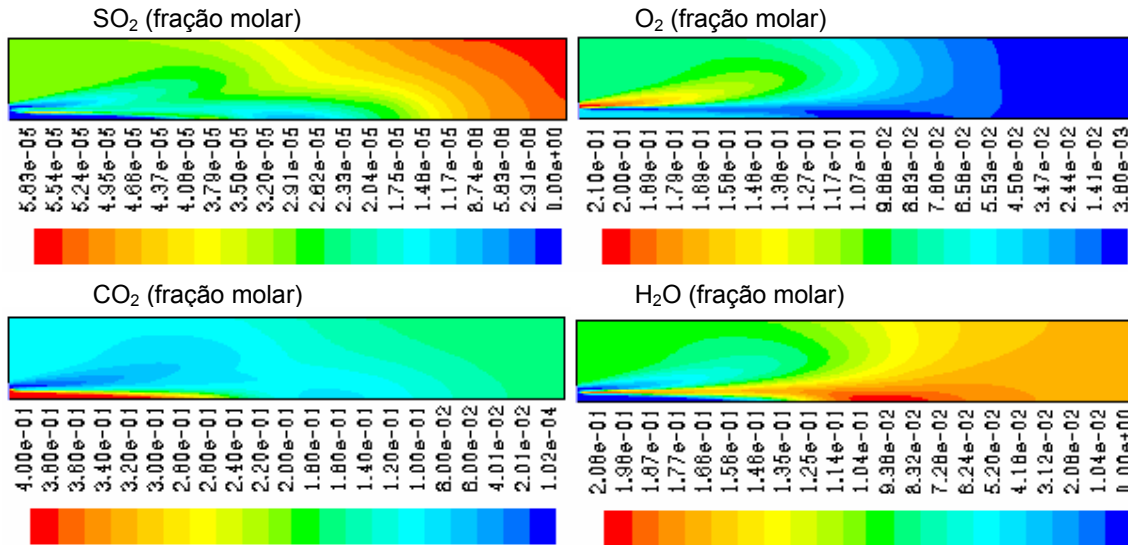


Figura 5.48 – Concentrações, em fração molar, de SO_2 , O_2 , CO_2 e H_2O , referentes à modelagem 07, no interior da fornalha cilíndrica.

A concentração máxima de dióxido de enxofre acontece próximo à saída da fornalha, considerando-se a formulação PDF. Já para a formulação em taxas finitas acontece próximo ao queimador.

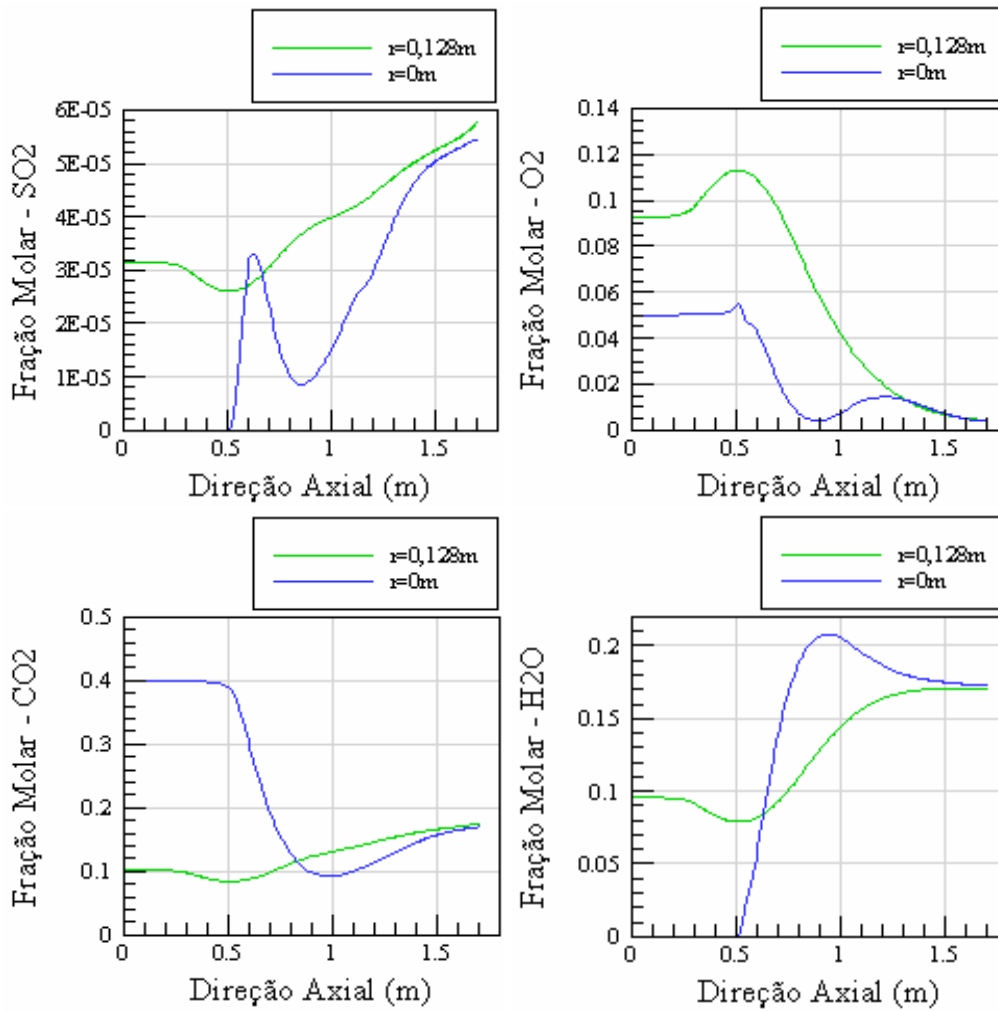


Figura 5.49 – Concentrações, em fração molar, de SO₂, O₂, CO₂ e H₂O, referentes à modelagem 07, ao longo do eixo de simetria.

Essa diferença está ligada diretamente ao consumo do gás sulfídrico, que para o modelo de taxas finitas ocorre ainda próximo ao queimador e para o modelo de fração de mistura ocorre próximo à saída da fornalha. Este último, contudo, apresenta emissões de gás sulfídrico o que não era esperado pois, além da mistura se aproximar da estequiometria, este gás está em pequena quantidade no combustível.

As Figuras 5.50 e 5.51 referem-se à distribuição das concentrações de metano e do gás sulfídrico.

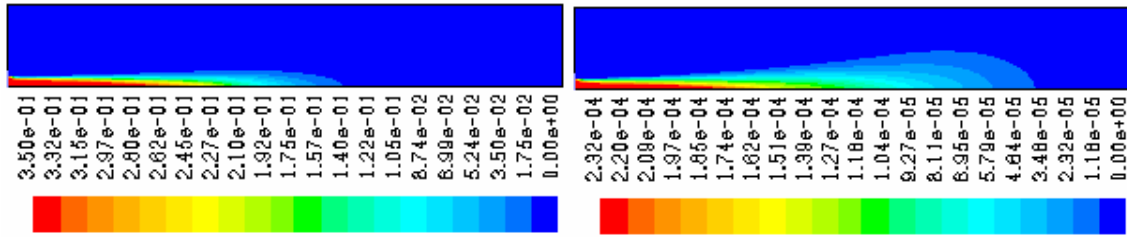


Figura 5.50 – Concentrações, em fração molar, de CH₄ e H₂S, referentes à modelagem 07, no interior da fornalha cilíndrica.

Observa-se, também para o modelo de fração de mistura (modelagem 07), que os perfis de metano e gás sulfídrico, ao longo do eixo de simetria, diferem dos mesmos perfis para o modelo de taxas finitas (modelagem 04). Na modelagem 07 essas espécies são consumidas a partir da posição $x = 0,5\text{m}$, enquanto que na modelagem 04 o gás sulfídrico, por exemplo, nesta mesma posição já está praticamente consumido.

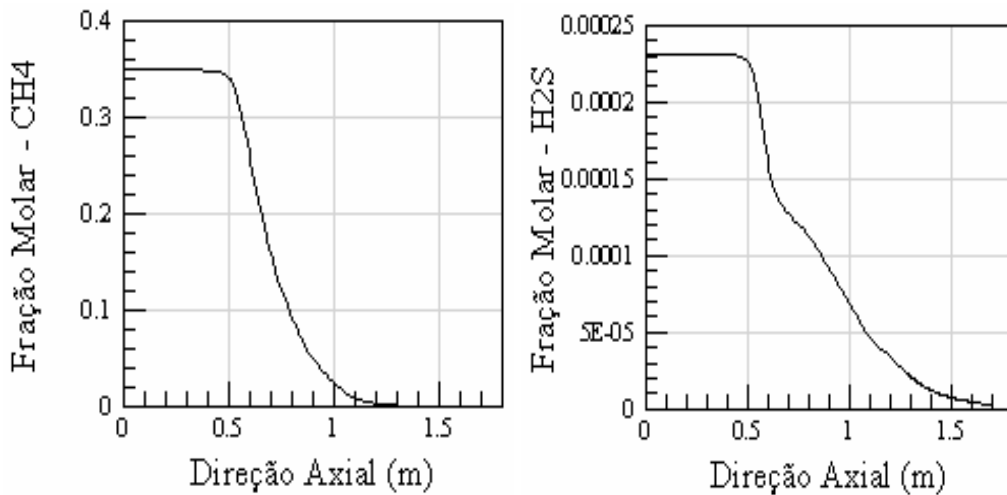


Figura 5.51 – Concentrações, em fração molar, de CH₄ e H₂S, referentes à modelagem 07, ao longo do eixo de simetria ($r = 0\text{m}$) da fornalha cilíndrica.

Os hidrocarbonetos, assim como o metano e o gás sulfídrico, são consumidos somente a partir da posição $x = 0,5\text{m}$. Os perfis de suas concentrações, ao longo do eixo de simetria, são apresentados na Figura 5.52.

Para o modelo de taxas finitas (modelagem 04) o consumo dessas espécies ocorre bem próximo ao queimador. Isto, mais uma vez, mostra, que a combustão, no modelo de fração de mistura, acontece mais afastado do queimador.

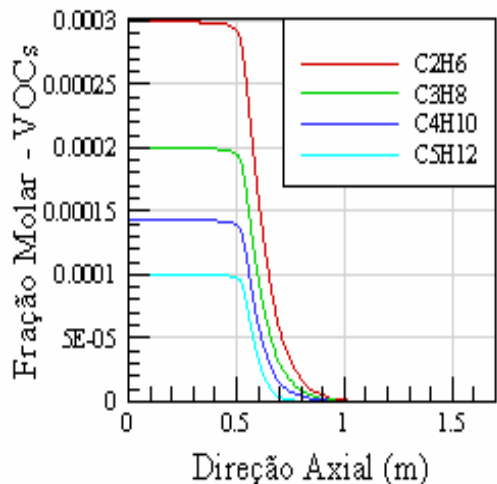


Figura 5.52 – Concentrações, em fração molar, de C₂H₆, C₃H₈, C₄H₁₀ e C₅H₁₂, referentes à modelagem 07, para r= 0m (simetria).

5.3 Estudo de Emissões das Espécies Químicas

Esta seção tem o objetivo de investigar com mais detalhes o que ocorre na saída da fornalha. Para tanto serão apresentados gráficos das concentrações de algumas espécies envolvidas no processo de combustão do biogás.

Serão mostrados gráficos comparativos das simulações que envolveram um processo não adiabático. Para o modelo de taxas finitas as modelagens 02 (uma etapa), 04 (duas etapas) e 05 (duas etapas com propriedades variáveis), e para o modelo de fração de mistura a modelagem 07.

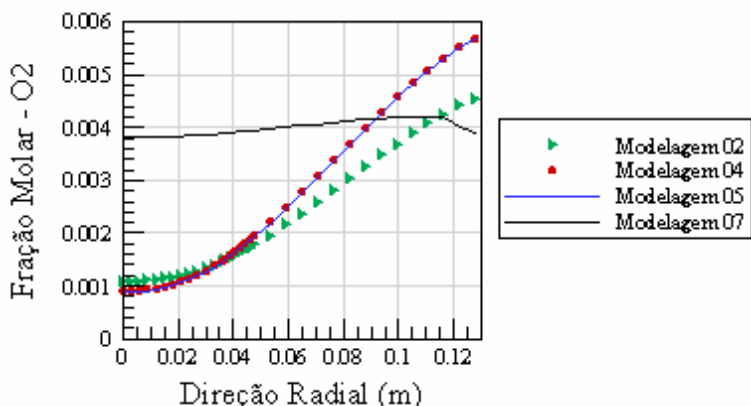


Figura 5.53 – Perfil das concentrações de O₂, em fração molar, na saída da fornalha para as modelagens 02, 04, 05 e 07. Vide Tabela 5.1, p. 81.

Decidiu-se apresentar as concentrações do oxigênio na saída da fornalha (Figuras 5.53 e 5.54) devido ao fato de se esperar concentrações muito próximas a zero, visto que a composição estudada se aproxima da estequiometria.

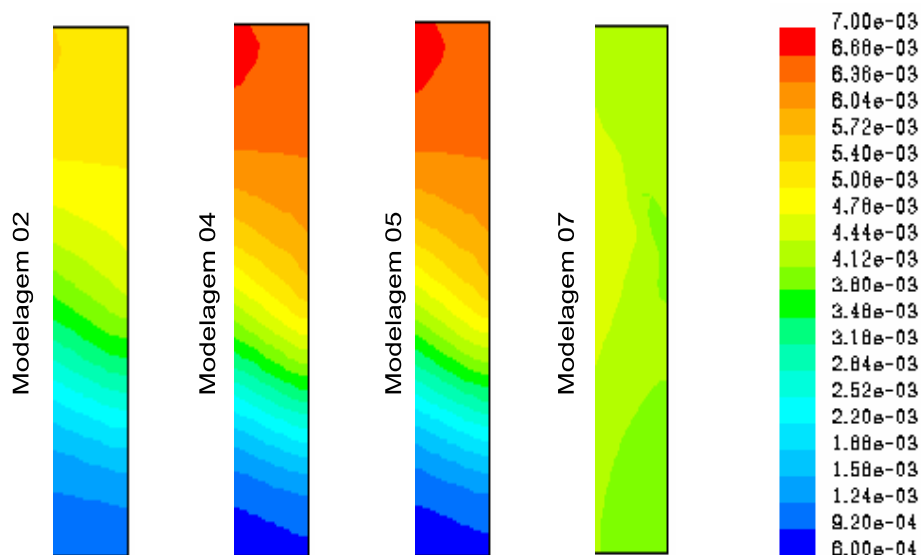


Figura 5.54 – Concentrações, em fração molar, de O_2 na saída da fornalha para as modelagens 02, 04, 05 e 07. Vide Tabela 5.1, p. 81.

Os resultados, contudo, descrevem níveis altos de oxigênio próximo à saída da fornalha. Os valores mais elevados são descritos pelo modelo de taxas finitas em duas etapas (modelagens 04 e 05), cerca de 0,6%. O modelo de fração de mistura apresenta emissões com pouca variação em torno de 0,4%.

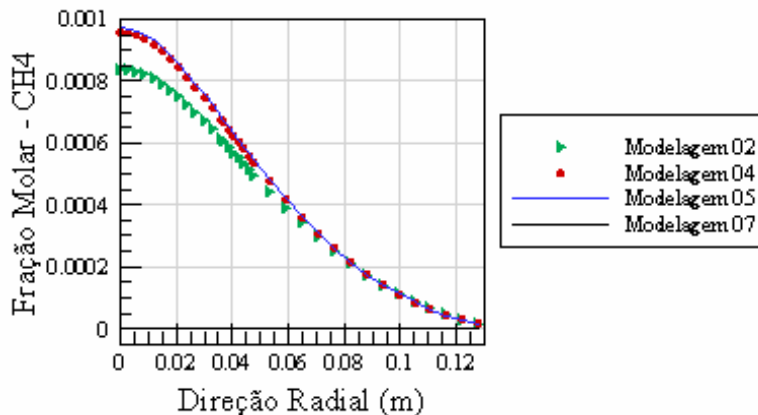


Figura 5.55 – Perfil das concentrações, em fração molar, de CH_4 , na saída da fornalha para as modelagens 02, 04, 05 e 07. Vide Tabela 5.1, p. 81.

É possível considerar que não haja o consumo total do oxigênio e do metano, seja devido à quantidade de espécies envolvidas no processo e o

espaço da fornalha, seja curto em seu comprimento, impossibilitando emissões menores destes gases.

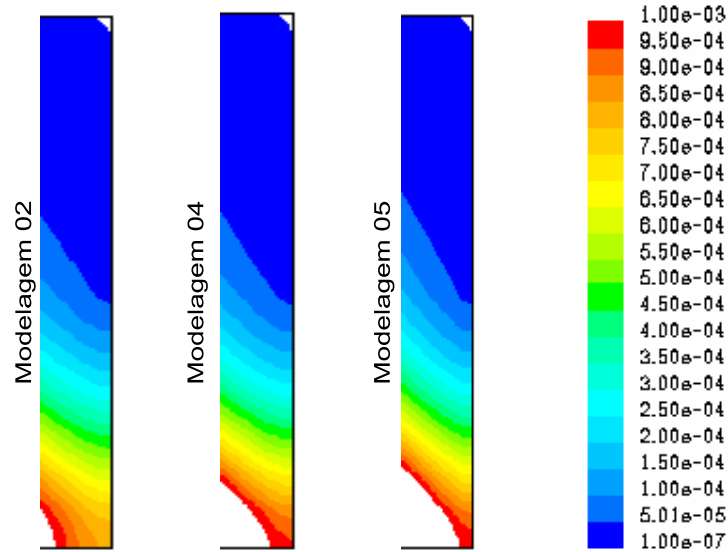


Figura 5.56 – Concentrações, em fração molar, de CH₄, na saída da fornalha para as modelagens 02, 04, 05 e 07. Vide Tabela 5.1, p. 81.

O modelo de fração de mistura (modelagem 07) não apresenta emissões de metano, mas as modelagens referentes ao modelo de taxas finitas apresentam pouca diferença entre si, em uma e duas etapas, que atingem respectivamente 0,08% e 0,1% na saída da fornalha.

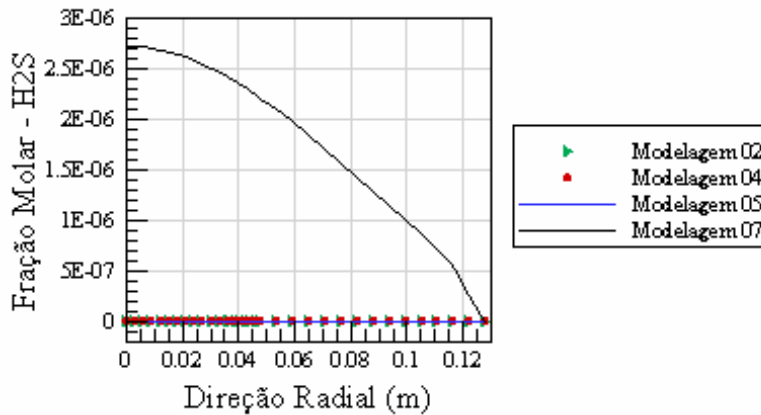


Figura 5.57 – Perfis das concentrações, em fração molar, de H₂S, na saída da fornalha para as modelagens 02, 04, 05 e 07. Vide Tabela 5.1, p. 81.

O gás sulfídrico está presente no combustível em pouca quantidade 232ppmv, mas, apesar disto, o modelo de fração de mistura (modelagem 07) apresenta na saída da fornalha emissões que passam de 2,5ppmv, enquanto

que as modelagens para o modelo de taxas finitas registra valores máximos em torno de 0,6ppbv.

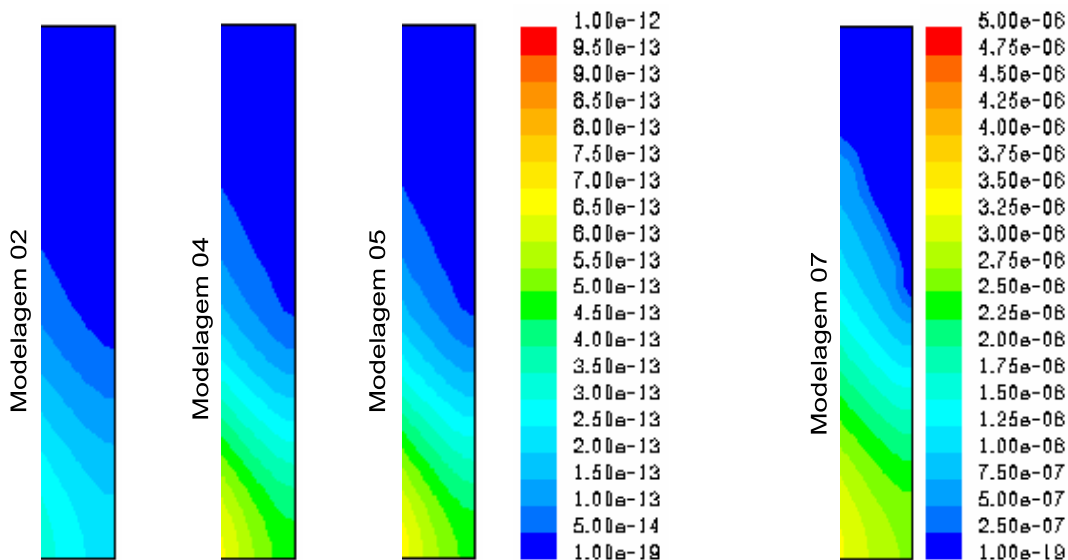


Figura 5.58 – Concentrações, em fração molar, de H₂S, na saída da fornalha para as modelagens 02, 04, 05 e 07. Vide Tabela 5.1, p. 81.

O dióxido de enxofre aparece com emissões próximas a 60ppmv para todas as modelagens. Emissões nestes níveis (maiores que 30ppmv, limite de emissões para o dióxido de enxofre, segundo EPA) devem passar por um tratamento antes do seu lançamento à atmosfera.

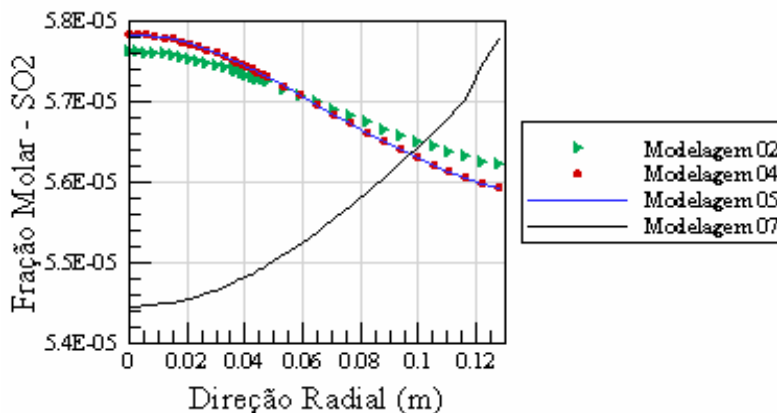


Figura 5.59 – Perfis das concentrações, em fração molar, de SO₂, na saída da fornalha para as modelagens 02, 04, 05 e 07. Vide Tabela 5.1, p. 81.

No modelo de taxas finitas (modelagens 02, 03 e 04), o dióxido de enxofre atinge um pico próximo de 230ppmv, estando, na saída, bem mais diluído. No modelo de fração de mistura o pico ocorre próximo à saída com concentrações

próximas de 60ppmv. Essa diferença, no pico de formação, se dá porque o gás sulfídrico não é totalmente consumido no processo de combustão simulado na modelagem 07.

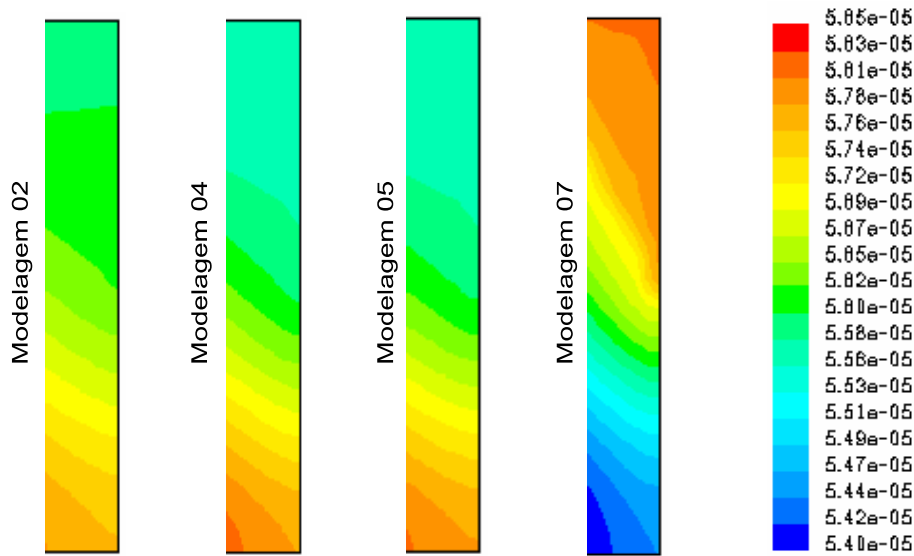


Figura 5.60 – Concentrações, em fração molar, de SO₂, na saída da fornalha para as modelagens 02, 04, 05 e 07. Vide Tabela 5.1, p. 81.

O gás carbônico, gás de efeito estufa, é emitido em concentrações mais elevadas, apesar de próximas, nas modelagens 02, 04 e 05 (taxas finitas), em torno de 18%, quando comparadas às emissões na modelagem 07 (fração de mistura), em torno de 17%.

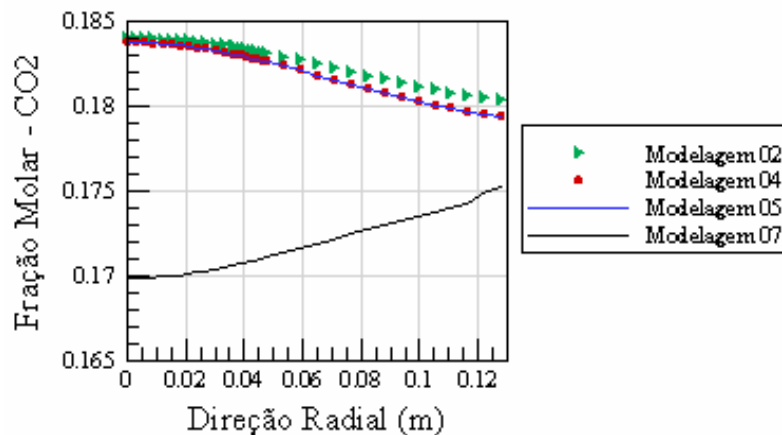


Figura 5.61 – Perfis das concentrações, em fração molar, de CO₂, na saída da fornalha para as modelagens 02, 04, 05 e 07. Vide Tabela 5.1, p. 81.

A diferença, de aproximadamente 1%, nas concentrações de gás carbônico entre os modelos de taxas finitas e fração de mistura, também é

encontrada para as emissões de CO, sendo que para o monóxido de carbono as emissões menores são dos resultados para o modelo de taxas finitas com valores próximos a 0,1%, enquanto que no modelo de fração de mistura suas concentrações atingem 1,5%.

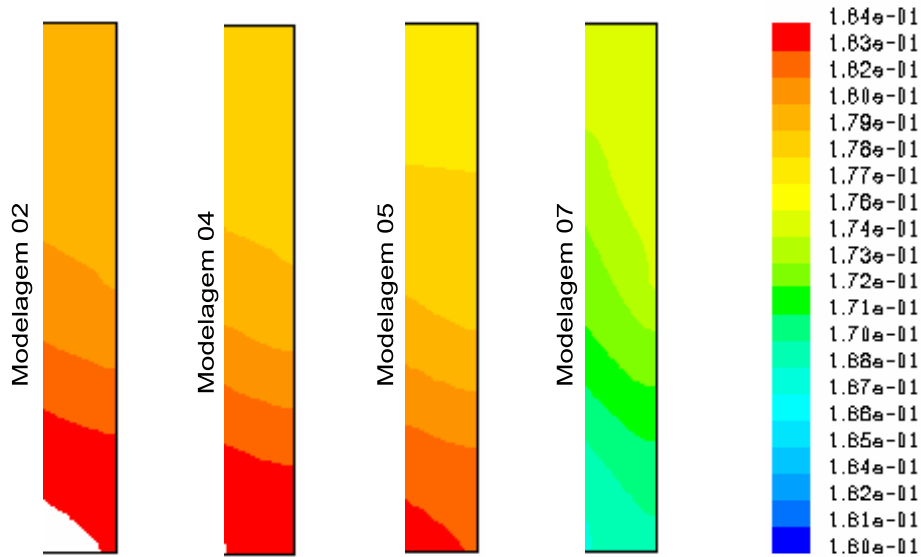


Figura 5.62 – Concentrações, em fração molar, de CO₂, na saída da fornalha para as modelagens 02, 04, 05 e 07. Vide Tabela 5.1, p. 81.

Para ambos os modelos, observou-se que os níveis de monóxido de carbono foram elevados. Acredita-se que estes valores estejam superestimados e que possivelmente o curto comprimento da fornalha é fator colaborador para essas elevadas concentrações.

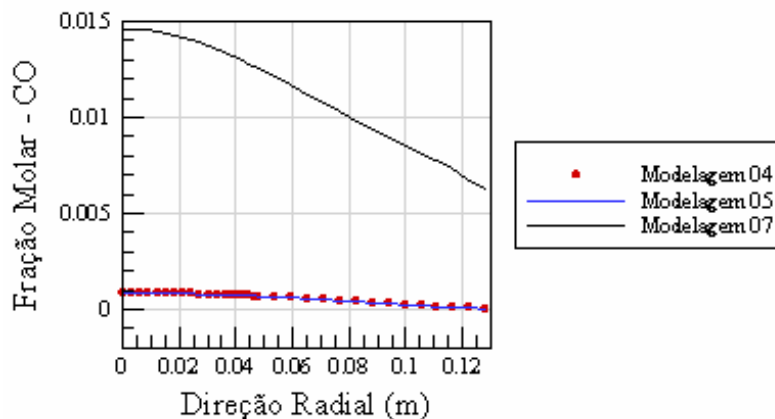


Figura 5.63 – Perfis das concentrações, em fração molar, de CO, na saída da fornalha para as modelagens 02, 04, 05 e 07. Vide Tabela 5.1, p. 81.

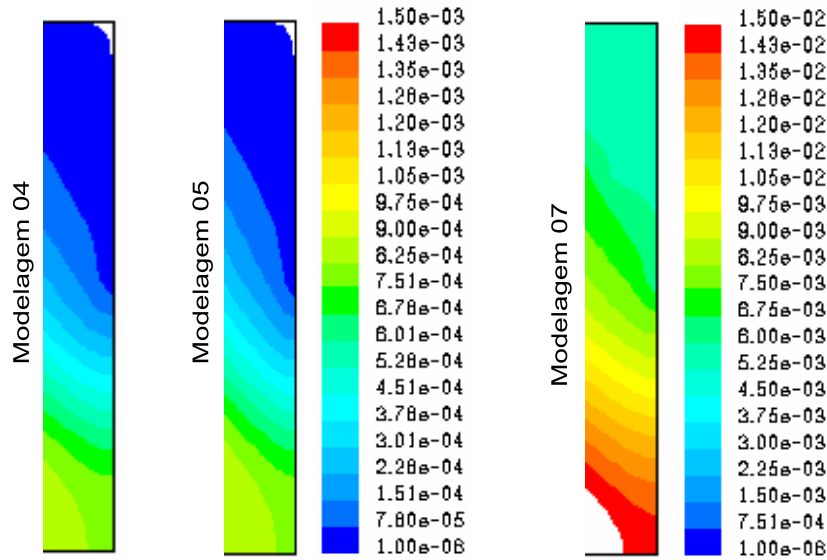


Figura 5.64 – Concentrações, em fração molar, de CO, na saída da fornalha para as modelagens 02, 04, 05 e 07. Vide Tabela 5.1, p. 81.

As concentrações do NO, na saída, chegam a 20ppmv para o modelo de taxas finitas que envolve os três mecanismos de formação de NO (thermal, prompt e fuel). Emissões nesses níveis são aceitáveis (inferiores a 150ppmv limite de emissões, segundo a EPA).

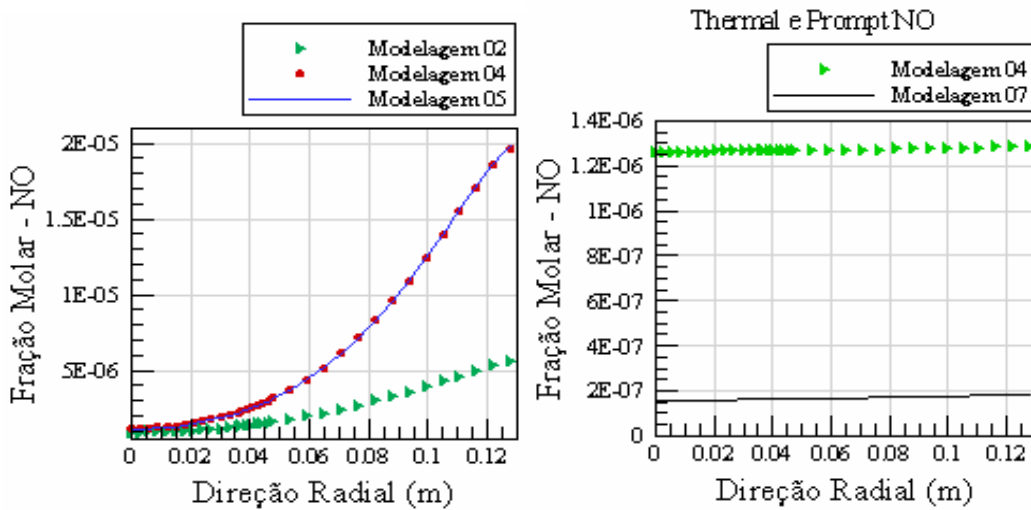


Figura 5.65 – Perfis das concentrações, em fração molar, de NO, na saída da fornalha para as modelagens 02, 04, 05 e 07. Vide Tabela 5.1, p. 81.

Percebe-se que a modelagem, em uma única etapa para o modelo de taxas finitas, mostra, como concentrações máximas de NO, valores pouco acima de 5ppmv, valores estes muito pequenos.

Os resultados para o modelo de taxas finitas, habilitando-se somente dois mecanismos de formação do NO, apresentam, em comparação com o modelo de fração de mistura, concentrações de até 1,3ppmv contra valores inferiores a 0,2ppmv na modelagem 07. Vide Figuras 5.64 e 5.65.

Esta diferença está ligada aos diferentes valores de temperatura máxima, encontrados nos modelos estudados. Isto mostra, também, a dependência do thermal NO, com relação à temperatura.

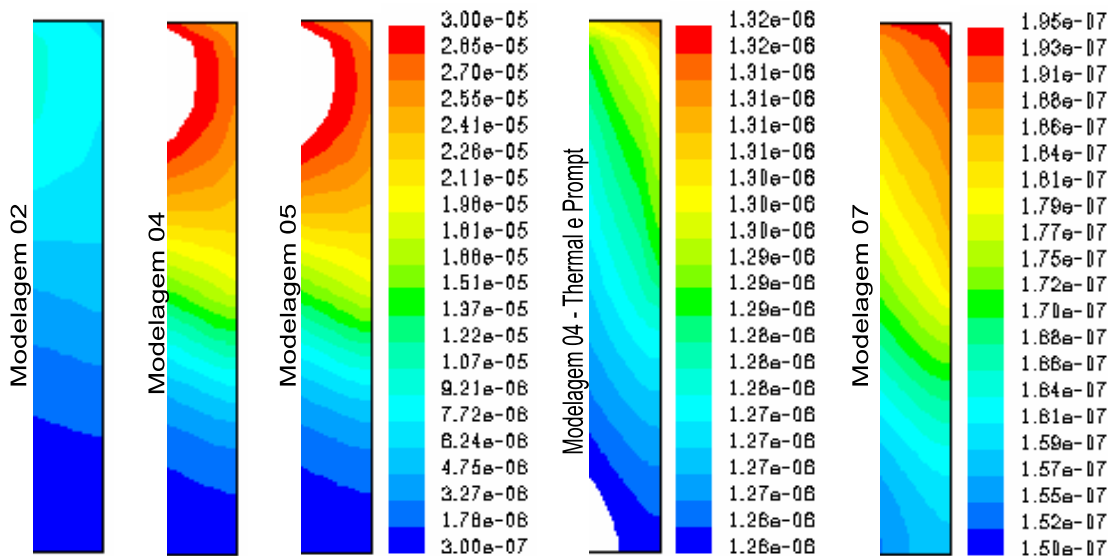


Figura 5.64 – Concentrações, em fração molar, de NO, na saída da fornalha para as modelagens 02, 04, 05 e 07. Vide Tabela 5.1, p. 81.

Dentre todas as modelagens apresentadas percebeu-se, que de forma qualitativa, as modelagens em duas etapas, baseadas na formulação de taxas finitas, apresentaram resultados coerentes. Estes resultados, contudo, devem ser comparados a dados experimentais para uma melhor avaliação qualitativa e, também, para uma análise quantitativa.

Os níveis de emissão de NO e SO₂ estão coerentes, sendo que para o dióxido de enxofre serão necessárias medidas de controle em suas emissões. No caso do CO, encontramos níveis elevados, próximos a 0,1%, que indicaria um excesso de combustível, mas como a mistura se aproxima da estequiometria esperavam-se níveis inferiores.

Os níveis de oxigênio e metano na saída da fornalha não foram satisfatórios, apesar da tendência em aproximar-se de zero, os níveis obtidos na simulação são elevados, numa média de 0,5% para o oxigênio e de 0,1% para o metano. Outros estudos devem ser realizados com o objetivo de obter uma melhor modelagem do processo de combustão estudado.

A tabela 5.5 apresenta a composição do gás resultante do processo de combustão simulado para o modelo de taxas finitas, em duas etapas. Acredita-se ser este o modelo mais indicado. É mais completo que o modelo PDF quanto à formação do NO, e os níveis de CO são mais coerentes.

Espécies	Emissões (em volume)
CH4	0,1%
O2	0,6%
N2	63,5%
Ar	1%
CO2	18,1%
CO	0,1%
SO2	57ppmv
NO	20ppmv
H2O	16,6%

Tabela 5.5 – Composição do gás resultante do processo de combustão, em duas etapas, simulado para o modelo de taxas finitas.

Comparando-se a tabela 5.5 das emissões resultantes da simulação com a tabela 2.7 das emissões do centro de eliminação de resíduos da cidade Montreal, pode-se considerar concordantes as emissões do vapor d'água em torno de 16%, e de NO cerca de 20ppmv.

As emissões do monóxido de carbono foram, de fato, superestimadas pelo modelo, cerca de 0,1% contra 24ppmv registrado no aterro em Montreal. Não existem informações a respeito de qualquer tratamento realizado no aterro do Canadá para a redução das emissões de dióxido de enxofre, contudo, os resultados da simulação, apesar de superiores, estão na mesma ordem de grandeza (57ppmv).

Utilizando-se as composições do combustível e do oxidante, contidas na Tabela 4.2, e, levando-se em conta suas vazões de entrada, verificou-se que são injetados na fornalha cerca de 60,9% (em massa) de nitrogênio. Esse valor está em concordância com o encontrado nos resultados da simulação (cerca de 60,49%, em massa), porém não corresponde às emissões de nitrogênio, em massa, para o aterro em Montreal (cerca de 13,36%, em massa). Pelo balanço de massa tem-se que a tabela 2.8 contém os valores mais prováveis para as emissões no Canadá.

Os resultados, descritos neste capítulo, indicam que é possível a aplicação do modelo na investigação do processo de combustão do biogás. Permitem, também, avaliar como uma alternativa importante o aproveitamento dos gases, provenientes de aterros sanitários, na geração de energia.