

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA  
FACULDADE DE TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

**ESTUDO NUMÉRICO DE UMA CÂMARA DE  
COMBUSTÃO DE MICROTURBINA A GÁS DE BAIXA  
EMIÇÃO DE POLUENTES**

**JOSÉ LÚCIO PINHEIRO JÚNIOR  
09/52435**

**ORIENTADOR: CARLOS ALBERTO GURGEL VERAS**

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO EM CIÊNCIAS MECÂNICAS**

**BRASÍLIA/DF: NOVEMBRO - 2010.**

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA  
FACULDADE DE TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

**ESTUDO NUMÉRICO DE UMA CÂMARA DE COMBUSTÃO DE  
MICROTURBINA A GÁS DE BAIXA EMISSÃO DE POLUENTES**

**JOSÉ LÚCIO PINHEIRO JÚNIOR**

**DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE  
ENGENHARIA MECÂNICA DA FACULDADE DE TECNOLOGIA  
DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA COMO PARTE DOS  
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE  
MESTRE EM CIÊNCIAS MECÂNICAS.**

**APROVADA POR:**

---

**Professor Carlos Alberto Gurgel Veras (ENM-UnB)  
(Orientador)**

---

**Professor Armando de Azevedo Caldeira Pires (ENM-UnB)  
(Examinador Interno)**

---

**Professor Edson Bazzo (EMC-UFSC)  
(Examinador Externo)**

**BRASÍLIA-DF, 24 DE SETEMBRO DE 2010**

## **FICHA CATALOGRÁFICA**

**PINHEIRO JÚNIOR, JOSÉ LÚCIO**

Estudo Numérico de uma Câmara de Combustão de Microturbina a Gás de Baixa Emissão de Poluentes [Distrito Federal] 2010.

xviii, 104p., 210 x 297 mm (ENM/FT/UnB, Mestre, Ciências Mecânicas, 2010).

Dissertação de Mestrado – Universidade de Brasília. Faculdade de Tecnologia.

Departamento de Engenharia Mecânica.

1.Câmaras de Combustão LPP

2.Formação de NO<sub>x</sub>

3.Chama GLP-ar

4.Simulação

I. ENM/FT/UnB

## **REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA**

PINHEIRO JR., J. L. (2010). Estudo Numérico de uma Câmara de Combustão de Microturbina a Gás de Baixa Emissão de Poluentes. Dissertação de Mestrado em Ciências Mecânicas, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 104p.

## **CESSÃO DE DIREITOS**

AUTOR: José Lúcio Pinheiro Júnior.

TÍTULO: Estudo Numérico de uma Câmara de Combustão de Microturbina a Gás de Baixa Emissão de Poluentes.

GRAU: Mestre

ANO: 2010

É concedida à Universidade de Brasília permissão para reproduzir cópias desta dissertação de mestrado e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte dessa dissertação de mestrado pode ser reproduzida sem autorização por escrito do autor.

---

José Lúcio Pinheiro Júnior

70.766-060 Brasília – DF – Brasil.

## **AGRADECIMENTOS**

Devo agradecer a diversas pessoas que muito me ajudaram na realização deste trabalho, direta ou indiretamente. Agradeço primeiramente ao professor Carlos Gurgel pela orientação e a oportunidade de realizar este trabalho. Agradeço ao colega Fábio pela ajuda quando iniciava o aprendizado nos programas *Gambit* e *Fluent* e pelas preciosas dicas que permitiram encontrar a justa saída nos momentos em que não a visualizava. Aos demais professores e aos colegas do curso pelos momentos de aprendizado e troca de conhecimentos. Aos técnicos e demais funcionários da universidade que, zelosos, sempre cuidaram de manter à disposição a estrutura universitária.

Agradeço também o programa de capacitação do servidor da Câmara dos Deputados, que com um modelo bastante acessível e voltado ao incentivo à formação, seguramente se constituiu em uma grande ajuda à realização deste trabalho.

## RESUMO

As turbinas a gás se destacam na área de propulsão aeronáutica e, principalmente, geração de energia. Nesse último caso, a eficiência alcançada com o uso do ciclo combinado e recuperação de calor pode superar 50%, além de que a modularidade de um sistema de geração com turbinas a gás permite uma construção rápida, com um investimento inicial reduzido e fáceis ampliações de acordo com necessidades futuras. Outra vantagem é a possibilidade de utilizar uma grande variedade de combustíveis, apenas com algumas adaptações. Aproveitando essas características, os combustores de turbinas a gás operavam tradicionalmente sem a pré-mistura do combustível e oxidante, por motivos de segurança e estabilidade da chama. No entanto, esse regime de operação leva a uma elevada formação de óxidos de nitrogênio, devido às altas temperaturas alcançadas nas regiões onde a mistura de ar e combustível se aproxima da condição estequiométrica. Para atender a novos limites impostos para a emissão desses poluentes, nas últimas décadas tem se destacado o uso da tecnologia LPP (*lean premixed prevaporized*) que, empregando uma mistura gasosa uniforme de baixa razão de equivalência, tem como principal vantagem evitar as condições de alta temperatura, responsáveis pelo mecanismo térmico de formação de  $NO_x$ . Dessa forma, as emissões de  $NO_x$  em turbinas a gás podem ser reduzidas a níveis inferiores a 10 ppm.

O projeto desses combustores LPP não é uma tarefa simples, apesar da ampla difusão e desenvolvimento de ferramentas CFD pois, devido ao elevado esforço computacional necessário para realizar simulações turbulentas tridimensionais com mecanismos detalhados, são empregados mecanismos de cinética química reduzida. Além disso, as interações entre o processo turbulento e a cinética química são de difícil análise, e requer modelos acurados para fornecer boas estimativas para as emissões dos principais poluentes. Limitações desse tipo são as principais causas das dificuldades enfrentadas ao se prever os níveis de emissões dos modernos combustores de baixo nível de poluentes, sobretudo considerando-se o aumento da importância e participação de diversos mecanismos de formação de poluentes nas emissões totais. Conseqüentemente, a seleção de modelos apropriados é fundamental para consistência de resultados e validação das simulações.

Esse trabalho apresenta a simulação, em condições de plena carga, de uma câmara de combustão LPP real, desenvolvida e construída na Universidade de Brasília para

uso em pequenas plantas de geração de energia com GLP como combustível. Por meio da comparação de dados experimentais disponíveis e resultados de simulações com um código CFD comercial, uma modelagem para o combustor – baseada nos modelos  $k - \varepsilon$  e *eddy dissipation* – é investigada para utilização em previsões e aperfeiçoamentos dessa câmara de combustão LPP.

Embora o processo de reação química seja limitado pela mistura turbulenta em grande parte do combustor (hipótese adotada pelo modelo *eddy dissipation*), faz-se necessário associar a descrição da cinética química ao processo reativo para reproduzir o início da combustão e a região de ancoragem da chama. Depois de ajustado o comportamento para as emissões de  $CO$ , as previsões fornecem uma indicação para os níveis de emissões de  $NO_x$ . Além disso, por meio de uma análise de sensibilidade do modelo às variáveis de maior influência, algumas modificações no combustor são consideradas com o objetivo de reduzir as emissões de  $NO_x$  e  $CO$ .

## ABSTRACT

Last decades new technologies in gas turbines involve the use of lean premixed prevaporized (LPP) combustors for achieving new restrictions on emission levels. The main advantage of LPP combustors is the small emission of  $NO_x$ , since the high temperatures of near stoichiometric operation – largely responsible for  $NO_x$  production, known as thermal  $NO_x$  – are avoided.

The design of LPP combustors is a complex task and, nowadays, has employed Computational Fluid Dynamics (CFD) codes in the flow field study and reaction process, although reduced mechanisms are used due to the required computational effort for carrying out turbulent 3D simulations with available detailed mechanisms. Also interactions between turbulent flow field and chemical kinetics require an accurate model to obtain good prediction about flow field and reaction rates.

Model limitations like that are responsible by great difficulties for predicting pollutants emissions in modern combustors of low emission level, considering relative importance of diverse pathways. So choice of appropriate models is a key point to obtain relative consistency of results and to validate any simulation.

This study presents the simulation of a real LPP combustor with combustion at two stages built at Universidade de Brasília for small plants operating with LPG fuel at full load. By means of comparisons between available experimental data and numerical results of a commercial CFD code, a combustor model based on  $k-\varepsilon$  and eddy dissipation models is investigated to be used in prediction and developments of that LPP combustor. However, to establish the combustion beginning and pilot flame zone it's necessary to use a finite rate associated with eddy dissipation model.

After reproduce the  $CO$  emissions behavior, results provide an indication for  $NO_x$  emission levels. In addition, sensitivity analysis and some combustor modifications are considered in order to reduce  $NO_x$  and  $CO$  emissions.

## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO .....	1
2	OBJETIVOS .....	3
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA E FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	4
3.1	- PUBLICAÇÕES RELACIONADAS .....	4
3.2	- CÂMARAS DE COMBUSTÃO DE BAIXA EMISSÃO DE NO <sub>x</sub> .....	7
3.3	- EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO.....	10
3.4	- MECÂNICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL E MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS .....	12
3.5	- CINÉTICA QUÍMICA .....	14
3.5.1	<i>Reações elementares e não elementares.....</i>	15
3.5.2	<i>Ordem de dependência e molecularidade .....</i>	16
3.5.3	<i>Modelo de Arrhenius .....</i>	17
3.5.4	<i>Reações consecutivas e paralelas.....</i>	19
3.5.5	<i>Reações individuais e reações em cadeia.....</i>	20
3.5.6	<i>Equilíbrio químico.....</i>	21
3.5.7	<i>Condição de estado estacionário para espécies químicas.....</i>	22
3.5.8	<i>Processos para obtenção de taxas e mecanismos.....</i>	23
3.6	- TURBULÊNCIA .....	24
3.6.1	<i>Descrição do fenômeno .....</i>	25
3.6.2	<i>As escalas turbulentas .....</i>	26
3.6.3	<i>Equacionamento principal e o problema de fechamento.....</i>	29
3.6.4	<i>Modelos de fechamento de 1ª ordem .....</i>	30
3.6.5	<i>Modelos de fechamento de ordem superior.....</i>	34
3.6.6	<i>Leis de parede.....</i>	35
3.7	- INTERAÇÃO COMBUSTÃO-TURBULÊNCIA.....	36
3.7.1	<i>Regime de chamas dobradas .....</i>	37
3.7.2	<i>Regime de chamas distribuídas .....</i>	38
3.7.3	<i>Regime de elementos de chama .....</i>	38
3.7.4	<i>O modelo eddy dissipation.....</i>	39
3.7.5	<i>O modelo EDC .....</i>	40
3.8	- MECANISMOS DE FORMAÇÃO DE NO <sub>x</sub> .....	41
3.8.1	<i>NO térmico .....</i>	41
3.8.2	<i>NO prompt.....</i>	43
3.8.3	<i>NO combustível .....</i>	44
3.8.4	<i>Mecanismo do óxido nitroso.....</i>	44



4	O COMBUSTOR DLN-LPP E SEU MODELO COMPUTACIONAL .....	46
4.1 -	O COMBUSTOR DLN-LPP .....	46
4.2 -	O MODELO COMPUTACIONAL .....	47
4.3 -	MODELO UTILIZADO PARA O GLP .....	52
4.4 -	ANÁLISE DO REGIME DE CHAMA .....	53
4.5 -	O REFINAMENTO DA MALHA .....	56
5	RESULTADOS OBTIDOS E ANÁLISE .....	59
5.1 -	ANÁLISE DOS MODELOS DE TURBULÊNCIA .....	59
5.2 -	EDDY DISSIPATION MODEL .....	65
5.3 -	FINITE RATE/EDDY DISSIPATION MODEL .....	69
5.3.1	<i>Modelo com transferência de calor e eddy dissipation modificado</i> .....	74
5.3.2	<i>Simulação das demais condições experimentais</i> .....	81
5.3.3	<i>Análise de sensibilidade do modelo</i> .....	85
5.4 -	O MODELO EDC .....	98
6	CONCLUSÕES .....	100
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	102

## LISTA DE TABELAS

<i>Tabela 5.1 – Condições operativas experimentais utilizadas nas simulações.</i> .....	59
<i>Tabela 5.2 – Emissões obtidas para o combustor com o modelo eddy dissipation.</i> .....	68
<i>Tabela 5.3 – Propriedades do mecanismo de reação empregado.</i> .....	71
<i>Tabela 5.4 – Emissões obtidas para o combustor com o modelo finite rate/eddy dissipation.</i> .....	73
<i>Tabela 5.5 – Constantes do modelo eddy dissipation empregadas no mecanismo de reação.</i> .....	79
<i>Tabela 5.6 – Emissões obtidas para o combustor com o modelo finite rate/eddy dissipation modificado.</i> .....	81
<i>Tabela 5.7 – Vazões de ar, combustível e razões de equivalência das condições experimentais anteriores.</i> .	82
<i>Tabela 5.8 – Emissões de CO com o modelo finite rate/eddy dissipation modificado nas demais condições operativas, segundo o modelo apresentado na tabela 5.3 e tabela 5.5.</i> .....	82
<i>Tabela 5.9 – Emissões de CO com o modelo finite rate/eddy dissipation modificado nas demais condições operativas em função de <math>\phi_p</math>.</i> .....	84
<i>Tabela 5.10 – Emissões de NO<sub>x</sub> com o modelo finite rate/eddy dissipation modificado nas demais condições operativas em função de <math>\phi_p</math>.</i> .....	85
<i>Tabela 5.11 – Condições previstas ao variar a composição do gás GLP.</i> .....	92
<i>Tabela 5.12 – Comparativo entre as emissões previstas pelo modelo com a zona de diluição atual e alongada em 60 mm.</i> .....	93
<i>Tabela 5.13 – Comparativo entre as emissões previstas pelo modelo com a zona secundária de reação atual e alongada em 60 mm.</i> .....	95
<i>Tabela 5.14 – Comparativo entre as emissões previstas pelo modelo e os resultados experimentais com a zona primária de combustão reduzida em 60 mm.</i> .....	97
<i>Tabela 5.15 – Comparativo entre as emissões previstas pelo modelo com a zona primária de reação atual e alongada em 25 mm.</i> .....	97
<i>Tabela 5.16 – Emissões obtidas para o combustor com o modelo EDC.</i> .....	99

## LISTA DE FIGURAS

<i>Figura 3.1 - Concentrações durante a conversão da espécie <math>A_1</math> a <math>A_3</math> por meio de reações consecutivas. ....</i>	19
<i>Figura 3.2 - Modificação no mecanismo controlador da reação (adaptado de [15]). .....</i>	24
<i>Figura 3.3 - Função densidade de probabilidade de uma variável aleatória <math>u</math>. .....</i>	25
<i>Figura 3.4 – Espectro energético típico do escoamento em função do comprimento característico dos vórtices. ....</i>	27
<i>Figura 3.5 – Sub-regiões da camada-limite. ....</i>	35
<i>Figura 3.6 – Classificação das chamas turbulentas pré-misturadas. ....</i>	39
<i>Figura 3.7 - Efeito do tempo de residência na formação de <math>NO_x</math> em chamas pré-misturadas. Adaptado de [8]. .....</i>	43
<i>Figura 4.1 - Combustor DLN – LPP do LEA-UnB (adaptado de [1]). .....</i>	46
<i>Figura 4.2 - Modelo computacional do combustor DLN-LPP do LEA. ....</i>	48
<i>Figura 4.3 - Modelo computacional do combustor DLN-LPP do LEA, vista lateral. ....</i>	48
<i>Figura 4.4 - Malha computacional preliminar para o combustor DLN-LPP do LEA. ....</i>	49
<i>Figura 4.5 – Campo de velocidades no plano <math>x = 0</math>, escoamento isotérmico. ....</i>	50
<i>Figura 4.6 – Detalhe do campo de velocidades no plano <math>x = 0</math>, escoamento isotérmico. ....</i>	51
<i>Figura 4.7 – Campo de velocidades no contorno, escoamento isotérmico. ....</i>	51
<i>Figura 4.8 – Contornos do módulo da velocidade no plano <math>x = 0</math>. ....</i>	51
<i>Figura 4.9 – Contornos de temperatura no plano <math>x = 0</math>. ....</i>	52
<i>Figura 4.10 – Variações em módulo observadas com o refinamento da malha. ....</i>	57
<i>Figura 4.11 - Malha computacional para o combustor DLN-LPP do LEA. ....</i>	58
<i>Figura 4.12 - Malha computacional para o combustor DLN-LPP do LEA, vista lateral. ....</i>	58
<i>Figura 5.1 – Perfil de velocidades no plano médio do combustor para o modelo de turbulência <math>k - \epsilon</math> .....</i>	60
<i>Figura 5.2 – Perfil de velocidades no plano médio do combustor para o modelo de turbulência <math>k - \omega</math> .....</i>	60
<i>Figura 5.3 – Perfil de velocidades no plano médio do combustor para o modelo de turbulência SST. ....</i>	60
<i>Figura 5.4 – Perfil de velocidades no plano médio do combustor para o modelo de turbulência <math>k - \epsilon</math> RNG. ....</i>	61
<i>Figura 5.5 – Perfil de velocidades no plano médio do combustor para o modelo de turbulência do Tensor de Reynolds. ....</i>	61
<i>Figura 5.6 – Perfil de temperatura no plano médio do combustor para o modelo de turbulência <math>k - \epsilon</math> .....</i>	62
<i>Figura 5.7 – Perfil de temperatura no plano médio do combustor para o modelo de turbulência <math>k - \omega</math> ....</i>	62
<i>Figura 5.8 – Perfil de temperatura no plano médio do combustor para o modelo de turbulência SST. ....</i>	62
<i>Figura 5.9 – Perfil de temperatura no plano médio do combustor para o modelo de turbulência <math>k - \epsilon</math> RNG. ....</i>	63
<i>Figura 5.10 – Perfil de temperatura no plano médio do combustor para o modelo de turbulência do Tensor de Reynolds. ....</i>	63

<i>Figura 5.11 – Perfil de temperatura na saída do combustor para diferentes modelos de turbulência.....</i>	<i>65</i>
<i>Figura 5.12 – Campo de temperatura obtido com o modelo eddy dissipation.....</i>	<i>67</i>
<i>Figura 5.13 – Concentração de <math>NO_x</math> em ppm presente no plano médio do combustor com o modelo eddy dissipation. ....</i>	<i>67</i>
<i>Figura 5.14 – Concentração de <math>CO</math> em ppm presente no plano médio do combustor com o modelo eddy dissipation. ....</i>	<i>68</i>
<i>Figura 5.15 – Posição da região de chama com o mecanismo de oxidação do propano e butano modificados, observando-se o campo de temperatura.....</i>	<i>69</i>
<i>Figura 5.16 – Concentração de <math>CO</math> em ppm presente no plano médio do combustor com a energia de ativação dos passos (5.1) e (5.2) modificada. ....</i>	<i>70</i>
<i>Figura 5.17 – Quantidade de <math>CO</math> em planos verticais ao longo do combustor.....</i>	<i>71</i>
<i>Figura 5.18 – Campo de temperatura obtido com o modelo finite rate/eddy dissipation. ....</i>	<i>72</i>
<i>Figura 5.19 – Concentração de <math>NO_x</math> em ppm presente no plano médio do combustor com o modelo finite rate/eddy dissipation. ....</i>	<i>72</i>
<i>Figura 5.20 – Taxa da reação (5.1) em <math>kmol/m^3s</math> em detalhe no plano médio do combustor com o modelo finite rate/eddy dissipation. ....</i>	<i>74</i>
<i>Figura 5.21 – Temperatura de parede do modelo considerado adiabático.....</i>	<i>76</i>
<i>Figura 5.22 – Volume utilizado para simulação do fluxo de ar de diluição.....</i>	<i>77</i>
<i>Figura 5.23 – Temperatura de parede do modelo com fluxo de calor convectivo.....</i>	<i>77</i>
<i>Figura 5.24 – Campo de velocidade em uma secção do canal de diluição, indicando o valor da componente tangencial ao longo do eixo do combustor.....</i>	<i>78</i>
<i>Figura 5.25 – Campo de temperatura obtido com o modelo finite rate/eddy dissipation modificado.....</i>	<i>79</i>
<i>Figura 5.26 – Concentração de <math>CO</math> em ppm presente no plano médio do combustor com o modelo finite rate/eddy dissipation modificado.....</i>	<i>80</i>
<i>Figura 5.27 – Concentração de <math>NO_x</math> em ppm presente no plano médio do combustor com o modelo finite rate/eddy dissipation modificado.....</i>	<i>80</i>
<i>Figura 5.28 – Ajuste da constante A em função da razão de equivalência da chama-piloto.....</i>	<i>84</i>
<i>Figura 5.29 – Influência da vazão de ar da chama-piloto sobre a temperatura máxima e emissão de <math>NO_x</math> .</i>	<i>86</i>
<i>Figura 5.30 – Influência da vazão de ar da chama-piloto sobre as emissões de <math>CO</math> e <math>HC</math> .....</i>	<i>87</i>
<i>Figura 5.31 – Influência da vazão de combustível da chama-piloto sobre a temperatura máxima e emissão de <math>NO_x</math> .....</i>	<i>88</i>
<i>Figura 5.32 – Influência da vazão de combustível da chama-piloto sobre as emissões de <math>CO</math> e <math>HC</math> .....</i>	<i>88</i>
<i>Figura 5.33 – Influência da vazão de mistura dos combustores radiais sobre a temperatura máxima e emissão de <math>NO_x</math> .....</i>	<i>89</i>
<i>Figura 5.34 – Influência da vazão mistura dos combustores radiais sobre as emissões de <math>CO</math> e <math>HC</math> .....</i>	<i>90</i>
<i>Figura 5.35 – Influência da vazão do ar de diluição sobre a temperatura máxima e emissão de <math>NO_x</math> .....</i>	<i>91</i>

<i>Figura 5.36 – Influência da vazão de ar de diluição sobre as emissões de CO e HC .....</i>	<i>91</i>
<i>Figura 5.37 – Campo de temperatura no plano médio do combustor com a zona de diluição alongada de 60 mm. ....</i>	<i>93</i>
<i>Figura 5.38 – Concentração de CO em ppm presente no plano médio do combustor com a zona de diluição alongada de 60 mm. ....</i>	<i>93</i>
<i>Figura 5.39 – Campo de temperatura no plano médio do combustor com a zona secundária de reação alongada de 60 mm. ....</i>	<i>94</i>
<i>Figura 5.40 – Concentração de CO em ppm presente no plano médio do combustor com a zona secundária de reação alongada de 60 mm.....</i>	<i>95</i>
<i>Figura 5.41 – Campo de temperatura no plano médio do combustor com a zona primária de combustão reduzida de 60 mm. ....</i>	<i>96</i>
<i>Figura 5.42 – Concentração de CO em ppm presente no plano médio do combustor com a zona primária de combustão reduzida de 60 mm. ....</i>	<i>96</i>
<i>Figura 5.43 – Campo de temperatura obtido com o modelo EDC.....</i>	<i>98</i>

## LISTA DE SÍMBOLOS E UNIDADES

$a$	Fator pré-exponencial	Depende da ordem da reação
$A$	Espécie química	
$A$	Constante do modelo <i>eddy dissipation</i>	
$b$	Aceleração de campo	m/s <sup>2</sup>
$B$	Força de campo	N
$B$	Constante do modelo <i>eddy dissipation</i>	
$c$	Constante de von Karman	
$C$	Constantes usadas nos modelos de turbulência	
$C_D$	Constante do modelo de turbulência de Prandtl-Kolmogorov	
$D$	Diâmetro	m
$Da$	Número de Damköhler	
$e$	Energia específica	J/kg
$exp$	Função exponencial	
$E$	Energia de ativação	J/mol K
$F$	Força	N
$G$	Constante do modelo de turbulência do comprimento de mistura de Prandtl e de Prandtl-Kolmogorov	
$h$	Comprimento de mistura de Prandtl	m
$I$	Intensidade de turbulência	
$j$	Coefficiente estequiométrico	
$K$	Constante da taxa de reação	Depende da ordem da reação
$k$	Energia cinética turbulenta	m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>
$Ka$	Número de Karlovitz	
$l$	Comprimento característico da escala integral turbulenta	m
$ln$	Logaritmo natural	
$L$	Comprimento	m
$Ma$	Número de Mach	
$M$	Quantidade inteira	
$M_w$	Massa molecular	kg/mol

$m$	Massa	kg
$n$	Coeficiente da temperatura	
$N$	Quantidade inteira	
$o$	Número de onda	$m^{-1}$
$p$	Pressão absoluta	Pa
$P( )$	Probabilidade	
$P_R$	Número de Prandtl	
$q$	Taxa de reação	$mol/m^3s$
$Q$	Espécie química	
$R$	Constante do gás	J/kg.K
Re	Número de Reynolds	
$s$	Posição no espaço	m
$S$	Velocidade de propagação da chama	m/s
$t$	Tempo	s
$T$	Temperatura	K
$u$	Componente cartesiana da velocidade	m/s
$u$	Vetor velocidade	m/s
$u^+$	Velocidade adimensional na camada-limite no sentido do escoamento	
$v$	Componente cartesiana da velocidade	m/s
$V$	Velocidade	m/s
$w$	Componente cartesiana da velocidade	m/s
$W$	Constante	
$x$	Coordenada cartesiana	m
$X$	Espécie química	
$y$	Coordenada cartesiana	m
$y^+$	Número de Reynolds na camada-limite	
$Y$	Fração mássica	
$z$	Coordenada cartesiana	m
$Z$	Termo de fonte	Depende da grandeza escalar considerada
$\alpha$	Difusividade térmica	$m^2/s$
$\delta$	Delta de Kronecker	
$\delta$	Espessura da chama	m
$\Delta$	Varição	

$\nabla$	Operador matemático	
$\varepsilon$	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta	$m^2/s^3$
$\kappa$	Condutividade térmica	W/m.K
$\gamma$	Espessura da camada-limite	m
$\lambda$	Segundo coeficiente de viscosidade	N.s/m <sup>2</sup>
$\eta$	Comprimento das microescalas turbulentas	m
$\phi$	Razão de equivalência	
$\varphi$	Grandeza escalar	Depende da grandeza escalar considerada
$\Phi$	Função de dissipação	N/m <sup>2</sup> s
$\mu$	Viscosidade absoluta	N.s/m <sup>2</sup>
$\Rightarrow$	Termo agrupado no modelo de turbulência	$m^3/s^3$
$\pi$		
$\nu$	Viscosidade cinemática	$m^2/s$
$\rho$	Massa específica	kg/m <sup>3</sup>
$\sigma^2$	Variância de uma variável	Depende da variável considerada
$\sigma$	Constantes usadas nos modelos de turbulência	
$\tau$	Tensão de cisalhamento	N/m <sup>2</sup>
$\tau$	Intervalo de tempo	s
$\Gamma$	Constante difusiva	Depende da grandeza escalar considerada
$\omega$	Frequência das flutuações de vorticidade	$s^{-1}$
$\dot{\omega}$	Taxa de formação de espécie química	mol/m <sup>3</sup> s



## OUTROS SÍMBOLOS

[ ]	Concentração
	Módulo
~	Em base molar
→	vetor
-	Valor médio
.	indica taxa de variação temporal

## LISTA DE SUBÍNDICES

<i>ar</i>	ar
<i>d</i>	sentido direto de reação
<i>e</i>	energia
<i>F</i>	referente a atrito
<i>i</i>	índice cartesiano
<i>i</i>	condição genérica
<i>I</i>	referente à escala integral turbulenta
<i>j</i>	índice cartesiano
<i>K</i>	referente à escala turbulenta de Kolmogorov
<i>k</i>	índice cartesiano
<i>l</i>	referente ao comprimento característico da escala integral turbulenta
<i>L</i>	laminar
<i>n</i>	índice de espécie química
<i>m</i>	índice de reação química
<i>p</i>	referente à chama-piloto
<i>P</i>	produtos
<i>Q</i>	químico
<i>r</i>	sentido reverso de reação
<i>R</i>	reagentes
<i>ref</i>	referência
<i>T</i>	referente à turbulência

$w$	referente à parede
$x$	coordenada cartesiana
$y$	coordenada cartesiana
$z$	coordenada cartesiana
$\lambda$	referente à escala de turbulência intermediária
$\varphi$	grandeza escalar
$o$	condição inicial

## LISTA DE ÍNDICES SUPERIORES

m	ordem de reação
n	ordem de reação
'	referente ao sentido direto da reação química
'	Referente à flutuação turbulenta
"	referente ao sentido reverso da reação química

## LISTA DE SIGLAS

CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CRZ	<i>Central Recirculation Zone</i>
DLN	<i>Dry Low NO<sub>x</sub></i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
EDC	<i>Eddy-dissipation Concept</i>
GLP	Gás Liquefeito de Petróleo
HC	Hidrocarbonetos não-queimados
LEA	Laboratório de Energia e Ambiente
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
LPP	<i>Lean Premixed Prevaporized</i>
LPG	<i>Liquefied Petroleum Gas</i>
ppm	parte por milhão
RAM	<i>Random Access Memory</i>
RNG	<i>Re-Normalization Group</i>
RQL	<i>Rich-burn/Quick-quench/Lean-burn</i>
SST	<i>Shear Stress Transport</i>
UnB	Universidade de Brasília

# 1 INTRODUÇÃO

A emissão de poluentes atmosféricos é uma das principais preocupações ambientais dos dias atuais devido a fenômenos como o efeito estufa, a formação de chuvas ácidas e às alterações climáticas observadas nos últimos anos. Nesse contexto se destaca a queima de combustíveis fósseis em turbinas a gás, empregadas em larga escala em plantas para produção de energia elétrica e em meios de transporte.

As câmaras de combustão para turbinas a gás tradicionalmente operavam com a injeção do combustível sem uma pré-mistura, gerando uma chama difusiva. Esse modo apresenta como principais vantagens estabilidade da chama e questões de segurança, uma vez que o combustível só entra em contato com o oxidante no momento da queima. Com a necessidade de se minimizar o consumo de combustíveis e a emissão de poluentes, o desenvolvimento desse tipo de turbinas trouxe grandes melhorias nas emissões de monóxido de carbono e hidrocarbonetos não queimados, quase sempre acompanhadas de maiores pressões e temperaturas mais elevadas nas câmaras de combustão. Essa situação favorece a produção de outros poluentes, os óxidos de nitrogênio,  $NO_x$ , notadamente pelo mecanismo de Zeldovich ou mecanismo térmico. Esses poluentes, já nos anos 50, foram associados ao fenômeno conhecido como *smog* em Los Angeles. Estão também relacionados à formação de chuvas ácidas ao produzirem ácidos nitrogenados quando em contato com vapor d'água na atmosfera; e à degradação da camada de ozônio quando lançados na estratosfera.

Na busca por uma ampla redução nas emissões de  $NO_x$ , sem comprometer a eficiência do processo de combustão, uma das tecnologias mais promissoras para projeto de câmaras de combustão é a tecnologia LPP (*Lean Premixed Prevaporized*), que consiste em evitar-se regiões de altas temperaturas na frente de chama próximas às gotículas de combustível ou – quando o combustível é gasoso –, nas regiões onde, pelo próprio processo de mistura entre as frentes de combustível e oxidante, a relação ar/combustível é próxima à estequiométrica; por meio de técnicas de vaporização prévia, pré-mistura dos reagentes e emprego de oxidante em excesso. Para manter elevada eficiência de combustão, a tecnologia é combinada com um maior tempo de residência do escoamento para compensar a redução das taxas de oxidação do combustível e do  $CO$ , em consequência da redução de temperatura promovida pelo excesso de oxidante.

O processo de vaporização, caso seja utilizado combustível líquido, e mistura prévia garantem uma mistura uniforme do reagente e do combustível, enquanto que com o excesso de oxidante é possível diminuir a temperatura na frente de chama de forma a eliminar quase que completamente a formação dos óxidos de nitrogênio pelo mecanismo de Zeldovich. Razões de equivalência típicas estão situadas numa faixa de 0,4 a 0,7; com temperaturas menores que 1800 K.

Por outro lado, a pré-mistura e a condição de operação próxima ao limite de flamabilidade reduzem os limites de operação com uma chama estável, e trazem outras dificuldades como retorno de chama e autoignição da mistura, o que requer um maior desenvolvimento e aperfeiçoamento da tecnologia para aplicações práticas mais críticas, como a aviação.

O aperfeiçoamento de câmaras LPP, cujos projetos buscam diminuir cada vez mais o nível de emissões, enfrenta uma grande dificuldade relacionada a se obter previsões acuradas para a emissão de  $NO_x$ ,  $CO$  e hidrocarbonetos não queimados, devido à complexidade da cinética química envolvida e suas interações com o escoamento turbulento.

Dessa forma, pesquisas sobre a modelagem do problema e o desenvolvimento e uso de modelos de reações químicas mais detalhados e confiáveis em códigos CFD (*Computational Fluid Dynamics*) disponíveis constituem papel fundamental à melhor compreensão dos fenômenos envolvidos e melhoria dos sistemas. Este trabalho propõe a simulação computacional e análise de um combustor projetado no Laboratório de Energia e Ambiente da Universidade de Brasília com tecnologia LPP; por meio da construção, teste de um modelo e comparação com resultados experimentais coletados em outro trabalho, relativos à operação com gás liquefeito de petróleo, GLP, como combustível.

## 2 OBJETIVOS

Esse trabalho tem por objetivo analisar uma câmara de combustão do Laboratório de Energia e Ambiente (LEA) com o conceito de baixa emissão de  $NO_x$ , baseada na tecnologia LPP (*Lean Premixed Prevaporized*) sob simulação numérica do escoamento reativo. Propõe-se adotar um modelo de simulação coerente com esse tipo de equipamento e realizar um comparativo entre os resultados obtidos numericamente e os resultados experimentais disponíveis, usando, no caso da simulação, uma mistura de 50% propano e 50% butano para a composição do GLP usado como combustível.

Pretende-se assim analisar a viabilidade do emprego da simulação numérica em código comercial CFD com modelos simplificados de combustão e reações químicas para descrever a formação de poluentes e auxiliar no desenvolvimento de câmaras de combustão de tecnologia LPP.

Dessa forma, o capítulo 3 apresenta uma revisão bibliográfica de trabalhos relacionados aos combustores LPP e mecanismos simplificados de reações químicas para modelagem do processo de combustão, além dos fundamentos teóricos fundamentais para compreensão do processo de produção de óxidos nitrosos, simulação numérica de escoamentos turbulentos e o processo de combustão. O capítulo quarto é dedicado a uma breve apresentação do combustor DLN-LPP do Laboratório de Energia e Meio Ambiente, com os seus diferentes modos de operação, e à apresentação do modelo computacional empregado na simulação do combustor. O capítulo 5 reúne os resultados do trabalho, com a discussão e análise dos dados e, no capítulo 6 estão presentes as conclusões relativas ao estudo.

### 3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA E FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

#### 3.1 - PUBLICAÇÕES RELACIONADAS

A principal referência para esse estudo é o trabalho de dissertação realizado por Ferreira [1] em 2007, intitulado “Desenvolvimento e Caracterização de uma Câmara de Combustão DLN – *Dry Low NO<sub>x</sub>* com Tecnologia LPP – *Lean Premixed Prevaporized*”, relativo ao desenvolvimento e caracterização do combustor LPP em estudo, do LEA. Esse trabalho detalha as características construtivas e operacionais da câmara de combustão como também apresenta resultados experimentais de emissões de poluentes e temperatura em pontos de entrada e saída da câmara para algumas condições de funcionamento. Outra referência da Universidade de Brasília é o trabalho desenvolvido por Neiva [2], “Simulação Numérica de Câmara de Combustão Tipo LPP”, também de 2007, que apresenta uma simulação numérica de um combustor LPP, mas de conceito bem diverso do empregado no trabalho de Ferreira. Nesse trabalho, assim como em muitos relacionados a simulações, especial atenção é dedicada ao vórtice responsável pela formação da chamada zona de recirculação central, CRZ, onde se desenvolve um fluxo reverso no eixo de simetria, responsável pela estabilização da chama.

Além desses trabalhos, publicações científicas sobre câmaras de combustão LPP, principalmente a respeito da simulação numérica desses combustores, serviram como base de referência para o desenvolvimento do projeto. Nessa esfera é possível destacar as referências mencionadas a seguir.

Em uma publicação voltada à modelagem de turbinas LPP operando com gás natural, Brewster et al. (1999) [3] apresentam um compêndio de trabalhos desenvolvidos na última década nessa área, apontando os modelos adotados, e uma revisão dos métodos empregados na modelagem da combustão turbulenta. Os autores mencionam a dificuldade em se obter predições acuradas para as emissões de  $CO$ ,  $HC$  e  $NO_x$  em combustores com pré-mistura devido à complexidade da cinética química e sua interação com as flutuações turbulentas. Além desse desafio, a complexa geometria dos combustores LPP requer um longo esforço para criação da malha para tais combustores, o que representa outra dificuldade a ser superada nesses trabalhos de simulação numérica com códigos CFD. Devido a esse fato, as simulações envolvendo a solução direta das grandes escalas turbulentas (*LES*) e pequenas escalas turbulentas (*DNS*) são adotadas em

geometrias simples, de pouco interesse prático ao projeto de combustores LPP. A impossibilidade de capturar as estruturas turbulentas com as malhas em combustores de interesse prático faz com que sejam utilizados modelos de turbulência, que fornecem as equações adicionais necessárias para o fechamento do sistema de equações do escoamento turbulento, e o modelo  $k - \varepsilon$  tem sido utilizado quase que universalmente, se mostrando adequado para a grande maioria das aplicações envolvendo combustores LPP. Além disso, devido às dificuldades já mencionadas, a necessidade de melhoria no modelo de turbulência é secundária em relação às necessidades de cinética química mais detalhada e modelagem da interação entre cinética química e turbulência. Outra consideração importante no trabalho diz respeito ao fato que os modelos que consideram uma cinética química veloz e assumem a taxa de reação limitada apenas pela mistura turbulenta funcionam razoavelmente bem para o caso de chamas difusivas, mas para chamas pré-misturadas faz-se necessário o emprego das taxas de reações finitas da cinética química para levar em consideração a interação entre cinética química e turbulência. Em relação à formação dos óxidos de nitrogênio, a maioria dos trabalhos utiliza modelos de pós-processamento, desconsiderando a influência das reações químicas relativas à formação de  $NO_x$  na estrutura do escoamento reativo principal, devido à pequena quantidade desses óxidos e suas espécies intermediárias. Em muitos casos, apenas o mecanismo térmico para formação de  $NO_x$  é incluído, considerando-se também o mecanismo *prompt* em alguns trabalhos como a segunda fonte mais importante para origem desses óxidos. Dos trabalhos relacionados, poucos incluíam a transferência de calor por radiação, possivelmente pela dificuldade de incluí-la no modelo e não pela sua importância, uma vez que a ausência da radiação era citada dentre os motivos principais para as discrepâncias entre os dados experimentais e as previsões numéricas. Quanto aos mecanismos reduzidos, são apresentados mecanismos para o gás natural, de dois, quatro, cinco e nove passos, sendo indicadas as condições específicas empregadas no processo de redução. Resultados obtidos com os mecanismos reduzidos para simulações em um reator parcialmente misturado indicaram uma boa acurácia dos mecanismos de cinco e, sobretudo nove passos na previsão dos níveis de  $CO$ ,  $NO$  e temperatura média, utilizando-se como base para comparação os resultados obtidos com o mecanismo detalhado para gás natural *GRI-Mech*, versão 2.11.

Utilizando modelos para códigos CFD e mecanismos reduzidos, Jazbec et al. (2000) [4] investigam o fenômeno de ignição de misturas pobres de metano,

explicitando o modelo utilizado no programa CFX-4, para o qual comparam os resultados aos obtidos também em simulações, para um reator do tipo *plug flow* (nesse tipo de reator o transporte na direção do fluxo é dominado pelo processo convectivo e, em seções normais à direção do escoamento, existe uniformidade da composição gasosa e suas propriedades) com o programa CHEMKIN II e mecanismo detalhado de reações.

Em termos dos mecanismos reduzidos e globais empregados nos códigos CFD para combustão de hidrocarbonetos, o trabalho de Westbrook and Dryer (1984) [5] sobressai como a principal referência até hoje. Nesse trabalho, de estudo bastante aprofundado, foram separadas as principais espécies encontradas na combustão de hidrocarbonetos e efetuadas análises das principais reações responsáveis pela formação e dissociação dessas espécies. A partir das observações de dependência das taxas de reações quanto à disponibilidade de combustível e oxidante, é proposto um mecanismo global (um único passo de reação) para os mais conhecidos hidrocarbonetos e também para metanol e etanol. Apesar do possível ajuste da velocidade de propagação de uma chama laminar para uma determinada condição, foi relatado que os mecanismos de um passo levam a grandes erros em condições onde a razão de equivalência varia espacial ou temporalmente. Outro problema observado se refere à temperatura adiabática de chama, que passou a ser superestimada devido, sobretudo, à desconsideração do equilíbrio químico entre  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2$  e  $H_2O$ . Para tentar contornar esse problema, foram propostos mecanismos denominados quase-globais, constituídos por dois passos, onde primeiramente o combustível é convertido em  $CO$  e  $H_2$ , e posteriormente há a oxidação a  $CO_2$  e  $H_2O$ . Essa consideração está de acordo com importantes observações experimentais dos mesmos autores em 1979: de que os hidrocarbonetos são parcialmente oxidados a  $CO$  e  $H_2$ , e essas espécies não têm um consumo apreciável até que todos os hidrocarbonetos tenham desaparecido. São discutidas as aplicações dos mecanismos elementares em reatores típicos e condições específicas (*plug flow*, tubo de choque, detonação, reator pré-misturado e chama laminar), analisando as principais reações de sistemas específicos levando-se em consideração as características peculiares a cada sistema.

O trabalho de Turrell et al. [6] (2004) apresenta o processo de modelagem e simulação em código CFD de um combustor LPP com dispositivo gerador de vorticidade (*swirler*), com apresentação de resultados da fluidodinâmica do escoamento e comparação entre simulações empregando os principais modelos de turbulência disponíveis em programas CFD de uso corrente. Relatam que, dos modelos disponíveis, somente com o



modelo de turbulência SSG (Speciale, Sarkar e Gatski), foi possível prever a formação do vórtice na zona central de recirculação (CRZ). O modelo SSG é classificado como de fechamento de ordem superior, pois adota uma formulação evolutiva para o Tensor de Reynolds.

Dentre trabalhos com combustível GLP em combustores LPP, a publicação de Kim et al. [7] (2009) figura como uma referência interessante pela avaliação da influência de parâmetros geométricos na estabilização da chama e caracterização do comportamento das emissões de  $CO$  e  $NO_x$  de um combustor segundo a variação de parâmetros como a razão de equivalência e a quantidade de combustível injetada por meio de um tubo piloto central.

### **3.2 - CÂMARAS DE COMBUSTÃO DE BAIXA EMISSÃO DE $NO_x$**

Os projetos de câmaras de combustão buscam obter características como fácil ignição, elevada eficiência de combustão, ampla faixa de funcionamento e mínima emissão de poluentes [8]. Em combustores de geometria fixa e com um único ponto de injeção de combustível, ocorrem, invariavelmente conflitos, tal como o aumento na emissão de  $CO$  e hidrocarbonetos não queimados devido à redução na emissão de óxidos de nitrogênio ( $NO_x$ ). Dessa forma, as soluções adotadas envolvem sempre soluções de compromisso de algum tipo entre os requisitos básicos.

Uma das formas de se contornar esses problemas consiste na adoção de geometria variável para ajustar a quantidade de ar na entrada da zona primária de combustão [9]. Em cargas elevadas, grande quantidade de ar é empregada para minimizar a formação de óxidos de nitrogênio e fuligem, enquanto que, em condições de cargas parciais, o fluxo de ar é reduzido de modo a aumentar a razão de equivalência e reduzir a velocidade do escoamento, o que aumenta o tempo de residência e a eficiência de combustão de modo a atingir reduzidos níveis de emissão de  $CO$  e hidrocarbonetos não queimados. A tecnologia de geometria variável tem espaço promissor em plantas industriais, mas devido à complexidade dos mecanismos e respectivos controles, há como contrapartida o aumento dos custos, peso e redução da confiabilidade, o que dificulta sua adoção em pequenas turbinas e aplicações aeronáuticas.

Outra alternativa para conciliar os requisitos de projeto consiste em realizar a combustão em etapas. Nesse caso, são usadas duas zonas separadas, cada uma projetada

especificamente para otimizar aspectos específicos do processo de queima. Em cargas parciais, pode-se empregar uma zona primária operando com razão de equivalência em torno de 0,8 para elevar a eficiência de queima e diminuir a emissão de hidrocarbonetos não queimados e a formação de  $CO$ . Essa zona é capaz de promover a elevação de temperatura necessária para condições na faixa desde a operação sem carga até pequenas cargas. Em situações de maiores solicitações de potência, a zona primária atua como uma chama-piloto, capaz de fornecer o calor necessário à queima na zona principal, que opera com uma mistura de ar e combustível pré-misturado e baixa razão de equivalência. À plena carga, a razão de equivalência nas duas zonas é mantida baixa, em torno de 0,6 para minimizar as emissões de  $NO_x$  e fumaça. A combustão em etapas tem sido largamente empregada em plantas industriais para atender os requisitos de baixos níveis de emissão sem a necessidade do uso das tecnologias que envolvam a injeção de água ou vapor.

No caso de combustíveis líquidos, a tecnologia LPP (*Lean Premixed Prevaporized*) se destaca em combustores de baixa emissão de  $NO_x$ . Esse conceito tem por objetivo a completa vaporização do combustível e sua mistura com o ar antes do processo de combustão, sob uma razão de equivalência inferior à estequiométrica. Dessa forma, as emissões de óxidos nitrogenados podem ser reduzidas drasticamente evitando-se o processo de queima de gotas, a formação de pontos quentes e reduzindo-se a temperatura da chama. Em contrapartida, as principais dificuldades atreladas ao processo são: o tempo requerido para completa vaporização e mistura do combustível, a possibilidade de ocorrência de autoignição e retrocesso de chama em situações de alta pressão e temperatura de entrada mais elevada em operação a plena carga. As técnicas envolvendo geometria variável e combustão em estágio podem ser empregadas em conjunto com a tecnologia LPP para contornar esses principais empecilhos.

O conceito de combustores RQL (*Rich-burn/Quick-quench/Lean-burn*) também promove substancial redução nas emissões de óxidos nitrogenados, e tem sido objeto de estudo das técnicas mais recentes. Tal técnica consiste na combinação de duas zonas de combustão: uma primária rica em combustível e outra secundária com razão de equivalência baixa. Após a zona primária, a quantidade de ar adicional necessária para completar o processo de combustão e reduzir a temperatura pela diluição do fluxo é injetada de modo a garantir uma mistura rápida e uniforme com os gases da zona primária, evitando-se a condição de formação de  $NO_x$  associada à alta temperatura da condição estequiométrica. Esse rápido processo de mistura é essencial ao sucesso da técnica, de

outra forma volumes de gases quentes remanescentes serão responsáveis pela formação de apreciáveis quantidades de  $NO_x$ .

Também com grande potencial para redução da emissão de  $NO_x$ , o uso de conversores catalíticos em câmaras de combustão LPP – o combustível é vaporizado e misturado com ar em uma razão de equivalência extremamente baixa, seguindo para o conversor catalítico – permite que a combustão ocorra em condições em que a relação ar/combustível estaria abaixo do limite de inflamabilidade para a situação normal de queima envolvendo apenas a fase homogênea gasosa. Os maiores entraves associados a esse processo estão relacionados ao custo dos materiais utilizados nos conversores catalíticos e à durabilidade, uma vez que o ambiente encontrado nas câmaras de combustão é bastante agressivo e envolve elevadas temperaturas. No caso do uso de conversores catalíticos, a temperatura de entrada para a turbina pode ser reduzida além do normal em função da durabilidade dos materiais nos conversores catalíticos, o que vai de encontro à busca de maior eficiência energética. Além disso, a perda de carga associada a esses sistemas deve ser considerada [10].

As técnicas para redução da emissão de  $NO_x$  descritas nos parágrafos anteriores, por não envolverem a adição de água ou vapor d'água, são denominadas *Dry Low  $NO_x$* . Baixa emissão de óxidos de nitrogênio também pode ser obtida por meio de técnicas com o uso de água. Nesse caso, a água ou vapor podem ser adicionados ao fluxo de ar de combustão antes do *swirler*, o que promove uma boa homogeneidade e atomização (no caso da forma líquida), ou diretamente na região da chama por meio de injetores estrategicamente posicionados. A injeção de água ou vapor promove uma diminuição substancial da temperatura da chama além de interferir no processo reativo, sobretudo na redução da concentração do radical  $O$  no caso da formação de  $NO_x$  [11]. No entanto, a quantidade de água requerida no processo é considerável – por volta de 40% do fluxo mássico de combustível no caso de injeção na forma líquida; quantidade que pode ser acrescida em cerca de 60% no caso de vapor, devido a menor capacidade de absorver calor pela ausência da parcela latente –, e deve ser desmineralizada para evitar a formação de depósitos e problemas com corrosão nas regiões mais aquecidas do combustor. Por isso, caso não haja boa disponibilidade de água de alta qualidade, essa técnica não deve ser empregada. Além disso, pode ocorrer aumento nas emissões de  $CO$  e hidrocarbonetos não queimados devido à redução de temperatura e oscilações da chama [11].

### 3.3 - EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO

As equações representativas dos princípios físicos básicos de conservação da massa, quantidade de movimento e energia são o ponto de partida para a descrição do movimento dos fluidos e sua distribuição interna de energia. Em tal análise, o fluido é considerado como uma distribuição contínua de matéria, descrito por meio de propriedades macroscópicas, como velocidade, temperatura, pressão e massa específica, tomadas como a média em relação a um número de moléculas pertencentes a uma “partícula” fluida. Assim, o número de moléculas deve ser suficientemente elevado, de modo que as propriedades não sejam influenciadas por uma só molécula, mas não tão grande de maneira que as propriedades possam ser atribuídas a um único ponto no espaço.

Para o princípio da conservação da massa aplicado a um volume de controle é obtida a equação da continuidade, descrita na sua forma vetorial por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (3.1)$$

Quanto ao princípio da conservação da quantidade de movimento, parte-se da 2ª Lei de Newton, aqui descrita separando-se as forças de campo,  $\vec{B}$ , das demais forças:

$$d\vec{F} + d\vec{B} = dm \frac{d\vec{V}}{dt} \quad (3.2)$$

e considerando as equações constitutivas do meio fluido, tomadas para um fluido newtoniano:

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - p \delta_{ij} + \delta_{ij} \lambda \nabla \cdot \vec{V} \quad (3.3)$$

além da relação de Stokes para o chamado 2º coeficiente de viscosidade,  $\lambda$ , presente na relação acima:

$$3\lambda + 2\mu = 0 \quad (3.4)$$

são obtidas as equações de Navier-Stokes, em coordenadas cartesianas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \cdot u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v \cdot u) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w \cdot u) = \rho b_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu \left( 2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{V} \right) \right] \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \cdot v) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v \cdot v) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w \cdot v) = \rho b_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu \left( 2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{V} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho w) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \cdot w) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v \cdot w) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w \cdot w) = \rho b_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu \left( 2 \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{V} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.7)$$

Finalmente, o princípio da conservação de energia, também para um fluido newtoniano fornece a seguinte equação:

$$\rho \frac{De}{Dt} = -p \nabla \cdot \vec{V} + \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + \Phi + Z_e \quad (3.8)$$

onde a função  $\Phi$ , dita função de dissipação, reúne os efeitos de dissipação de calor e dos esforços viscosos na expressão abaixo e o termo  $Z_e$  expressa os termos de fontes e sumidouros de energia internamente ao volume de controle infinitesimal.

$$\begin{aligned} \Phi = \mu \left\{ 2 \left[ \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right)^2 + \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right)^2 + \left( \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right)^2 \right] + \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 + \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right)^2 + \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right)^2 \right\} \\ - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{V})^2 \end{aligned} \quad (3.9)$$

Seguindo o mesmo raciocínio para obtenção das equações de Navier-Stokes, a conservação de uma grandeza escalar genérica,  $\varphi$ , em um campo fluidodinâmico pode ser descrita pela seguinte equação:

$$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\varphi\vec{V}) = \nabla \cdot (\Gamma_\varphi \nabla \varphi) + Z_\varphi \quad (3.10)$$

na qual o primeiro termo representa o andamento no tempo da grandeza  $\varphi$  ao interno do volume de controle infinitesimal; o segundo termo é chamado termo de transporte convectivo, pois representa o transporte do escalar devido ao campo de velocidade do fluido; o terceiro termo é o termo de transporte difusivo, responsável pelo transporte do escalar mesmo sem a movimentação do fluido por meio da constante difusiva da grandeza  $\varphi$ ,  $\Gamma_\varphi$ ; e o último termo é o termo de fonte, que define a quantidade da grandeza escalar que é gerada ou dissipada internamente ao volume de controle infinitesimal durante o

intervalo de tempo considerado. Tal equação pode representar, por exemplo, num escoamento reativo, composto de uma mistura homogênea, a concentração de cada componente da mistura; ou num escoamento turbulento, uma equação utilizada no modelo de turbulência para descrever a conservação de alguma propriedade do modelo.

Para um problema tridimensional compressível, existem seis incógnitas:  $\rho$ ,  $u$ ,  $v$ ,  $w$ ,  $p$  e  $T$ , o que exige seis equações para o fechamento do problema. As equações da conservação da massa, de Navier-Stokes nas três direções e da energia somam cinco; a sexta equação, que permite o fechamento é a equação de estado, que relaciona massa específica com a pressão e a temperatura:

$$\rho = \rho(p, T) \quad (3.11)$$

e que sob a hipótese de gás perfeito, assume a seguinte forma:

$$p = \rho RT \quad (3.12)$$

Cabe observar que no caso de um fluido incompressível, tipicamente um líquido ou um gás a condições de escoamento de baixa velocidade ( $Ma \leq 0,3$ ), existe uma independência entre a equação da energia e as equações de conservação da massa e de Navier-Stokes, o que significa que o movimento do fluido é determinado com a solução dessas quatro equações e a equação da energia pode ser resolvida em um segundo momento, uma vez já conhecida a velocidade e a pressão em todos os pontos do domínio.

### **3.4 - MECÂNICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL E MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS**

No âmbito da Engenharia existem três metodologias para análise de um problema ou projeto: métodos analíticos, métodos numéricos e a experimentação. A grosso modo, apesar da possibilidade de observação do fenômeno real, pode-se dizer que os métodos experimentais são muito custosos pelo tempo associado às experimentações e preço da instrumentação e todos equipamentos envolvidos. Além disso, há situações em que a observação experimental se torna inviável, quer seja por questões de segurança, disponibilidade de sensores confiáveis capazes de suportar as condições do meio ou porque a própria presença do sensor causa tamanha perturbação no meio que torna inviável manter

a condição de interesse para aquisição das medidas. Dessa forma, o uso das metodologias teóricas é cada vez mais difundido como análise de projeto e de solução de problemas, sendo reservada à experimentação a tarefa de avaliação final do projeto, ou simplesmente quando devido à complexidade do problema e ausência de modelos matemáticos, seja a única alternativa disponível [12].

Por outro lado, os métodos analíticos, apesar de conduzirem a uma solução exata e em pouco tempo, são aplicáveis somente a problemas simples ou sob hipóteses simplificativas que acabam por afastar consideravelmente a solução analítica do fenômeno real. Não devem, no entanto, serem descartados, uma vez que a análise analítica pode fornecer uma rápida visão do problema e uma orientação qualitativa da influência e andamento de algumas variáveis do modelo. Mas a solução das equações apresentadas no tópico anterior não é normalmente uma tarefa simples em aplicações práticas de Engenharia, e graças à admirável evolução computacional dos últimos anos, o uso dos métodos numéricos para solução desses problemas se tornou uma realidade.

O uso de métodos numéricos aplicados à solução de problemas que envolvem o escoamento de fluidos, é denominado Mecânica dos Fluidos Computacional, e requer o tratamento e solução das equações de conservação da massa, acopladas às de Navier-Stokes e da energia. A maior dificuldade para aplicação dos métodos para solução numérica de equações diferenciais é devida ao aspecto altamente não-linear das equações de Navier-Stokes, representado pelos termos de transporte convectivo. Historicamente, os primeiros métodos numéricos capazes de lidar com tais não-linearidades foram os Métodos de Diferenças Finitas – baseados na substituição dos operadores diferenciais pelos correspondentes numéricos –; no entanto, foram principalmente desenvolvidos em sistemas de coordenadas ortogonais, o que não permitia a sua aplicação a geometrias complexas.

A constante evolução e aprimoramento dos métodos levou ao desenvolvimento do Método dos Volumes Finitos, no qual é realizado um balanço de conservação da propriedade para obter a correspondente equação aproximada em cada volume elementar do domínio. Tal método é bastante robusto, devido às suas características conservativas, e no caso de escoamento de fluidos, em que as equações diferenciais representam a conservação da propriedade a nível de pontos, a adoção do método parece uma extensão natural que assegura a inexistência de gerações e sumidouros de quantidades com origem numérica no interior do domínio de cálculo. Por tais razões, apesar de que atualmente outros métodos são capazes de resolver as equações de conservação no campo de Mecânica dos Fluidos, o Método dos Volumes Finitos é sem

dúvida o mais difundido e empregado nos pacotes comerciais, sobretudo quando se observa a penetração industrial.

Como qualquer método numérico, o domínio contínuo no qual se encontra definido o conjunto de equações diferenciais deve ser discretizado, ou seja, dividido em um número finito de pontos, para os quais a solução numérica deverá ser obtida com um erro especificado. As derivadas existentes nas equações diferenciais devem ser substituídas por termos que contenham a função e, dessa forma, uma equação diferencial será transformada em um sistema de equações algébricas, a ser resolvido para todos os  $N$  pontos do domínio. Se o número de variáveis a serem calculadas em cada ponto do domínio é  $M$ , o sistema algébrico será constituído por  $M \times N$  equações algébricas e  $M \times N$  incógnitas.

O passo seguinte é obter as equações de conservação em forma aproximada para volumes elementares do domínio envolvendo os pontos de solução numérica. A forma mais usual nos métodos de volumes finitos para se obter as equações de conservação aproximadas é efetuar a integração numérica sobre o volume elementar – no espaço e no tempo – das equações diferenciais descritas em uma forma particular, a forma divergente ou conservativa, em que os fluxos aparecem dentro do operador derivada, a exemplo da equação (3.1). Dessa forma, na primeira integração os fluxos aparecem nas fronteiras do volume elementar, o que é equivalente à realização de um balanço da propriedade no volume de controle. Realizar o processo de integração das equações diferenciais também transforma as derivadas em termos que contêm a própria função, e portanto, realiza a passagem das equações diferenciais às equações algébricas.

### **3.5 - CINÉTICA QUÍMICA**

Processos envolvendo reações químicas estão presentes em várias aplicações de Engenharia, notadamente em processos de combustão, com aproveitamento da energia química dos combustíveis voltado à obtenção de energia mecânica. Melhorias em tais processos estão relacionadas à redução de custos, pela maior razão entre trabalho disponível e massa de combustível empregado, e à redução do impacto ambiental envolvido, pela menor quantidade de poluentes lançadas à atmosfera; recaindo sobre um melhor entendimento e controle do processo reativo.

A modelagem e análise de problemas envolvendo reações químicas, por outro lado, introduz uma considerável complexidade, devido aos modelos para reações químicas, que se comportam de uma forma não-linear, e ao aumento do número de



espécies envolvidas, que traz como consequência um aumento de natureza exponencial no número de equações a serem resolvidas para solução do modelo. Mas, sendo imprescindível a utilização de modelos capazes de reproduzir mais fielmente a realidade, as aplicações em Engenharia têm se aprofundado cada vez mais nos estudos aplicados à Cinética Química, para obtenção de modelos viáveis pautados no estudo das taxas de reações elementares e dependências observadas quanto a parâmetros do sistema.

### **3.5.1 Reações elementares e não elementares**

Ao se analisar uma transformação química, as mudanças observadas durante o processo podem ser representadas por meio de uma ou mais reações químicas, as quais relacionam as taxas de reação para as diferentes espécies envolvidas na transformação por meios dos coeficientes estequiométricos. A quantidade de reações na formulação de um modelo para o processo reativo está intrinsecamente ligada à observação experimental do processo, sob diferentes condições de temperatura, pressão, concentração das espécies, outras fontes de energia como intensidade luminosa, um campo elétrico ou magnético, etc. À medida que se procede uma investigação cada vez mais aprofundada do processo reativo, o modelo representativo tende a estar cada vez mais próximo das transformações que ocorrem a nível molecular, com informações a nível de ruptura das ligações químicas dos reagentes originando espécies intermediárias e, a partir das novas associações, a formação das espécies finais do referido processo.

Uma reação que representa o processo reativo a nível molecular é denominada uma reação elementar e, devido a essa estreita relação com a física do processo reativo, há uma correspondência direta entre a taxa de reação e a equação estequiométrica. Deve-se ressaltar também que para uma reação elementar os coeficientes estequiométricos são números inteiros – uma vez que não existe uma fração de molécula –, além de que estes coeficientes são normalmente 1 ou 2, podendo em alguns casos chegar a 3. A reação elementar, portanto, possui uma representação mais simples, até mesmo no número de espécies envolvidas, uma vez que descreve cada pequeno passo do processo reativo. Por outro lado, um processo reativo relativamente simples a nível macroscópico pode envolver uma quantidade significativa de reações elementares, necessárias para modelar cada passo do processo em cada possível caminho de reação para cada espécie envolvida.

Quando uma reação não envolve a representação desse nível de detalhe, tem-se obviamente uma reação não elementar, onde não há mais uma correspondência direta entre os coeficientes estequiométricos e a equação da taxa de reação, e por isso os coeficientes estequiométricos não são mais necessariamente números inteiros. Uma reação não elementar resulta da observação do que na realidade consiste o efeito global de uma seqüência de reações elementares – intencionalmente reunidas ou assim descritas devido à impossibilidade de se determinar um intermediário formado em quantidade muito pequena ou com tempo de vida muito curto. Como na grande maioria das aplicações práticas de Engenharia envolvendo reações químicas tem-se real interesse em efeitos globais e grandezas facilmente observáveis, a representação com reações não elementares se torna bastante interessante, pois se constitui em um modelo mais simples e é capaz de fornecer bons resultados.

### 3.5.2 Ordem de dependência e molecularidade

De acordo com observações experimentais, a taxa de uma reação química apresenta uma dependência com a concentração de um ou mais reagentes, ou ainda, espécies intermediárias, espécies que atuam como catalisadores – não sendo consumidas durante o processo reativo – e produtos. O modo mais de comum de expressar essa dependência segue um equacionamento pelo qual a taxa de reação é proporcional ao produto das concentrações elevadas a um expoente real, ou seja:

$$q \propto [A]^m [Q]^n \quad (3.13)$$

Os expoentes envolvidos nessa expressão são ditos a ordem da reação com relação a cada uma das espécies, e a ordem total de uma reação é definida como a soma de todos os expoentes envolvidos no modelo.

Em se tratando de reações elementares, é usual descrevê-las com base na molecularidade, que especifica o número de reagentes envolvidos em um passo do processo reativo. Dessa forma, reações onde uma molécula se decompõe em produtos, por exemplo por ação térmica, sem o envolvimento de outro reagente, é uma reação unimolecular, como no exemplo:



No entanto, o tipo mais comum de reações envolve dois reagentes, e é chamado bimolecular:



Reações envolvendo três reagentes ainda são encontradas em situações envolvendo pressões de moderadas a altas, enquanto reações com um maior número de reagentes envolvidos não são encontradas na natureza, e não constituem processos a nível molecular. Outra importante observação com respeito a reações elementares, é que considerando o sentido direto, a molecularidade e a ordem total de uma reação são as mesmas, de forma que, em reações elementares, a ordem de reação se constitui sempre em um número inteiro menor ou igual a três. Dessa forma, mecanismos de reação onde a ordem encontrada experimentalmente é representada por um número real ou um inteiro maior que três não se constituem em mecanismos elementares.

Quando a expressão para taxa de uma reação utiliza o modelo apresentado em (3.13), a ordem total,  $(n + m)$ , determina as unidades para a constante da taxa de reação,  $K$ , que é expressa na forma:

$$[K] = \left[ (\text{tempo})^{-1} (\text{concentração})^{1-(n+m)} \right] \quad (3.16)$$

### 3.5.3 Modelo de Arrhenius

Tendo por base reações elementares, um modelo para essas taxas de reações foi desenvolvido utilizando-se a teoria cinética dos gases, sendo o mais empregado para expressar taxas de reações em fase gasosa. Esse modelo é conhecido como modelo de Arrhenius, em homenagem a Svante Arrhenius, que publicou um trabalho em 1889 demonstrando uma grande variedade de reações com taxa dependente da temperatura conforme o seguinte equacionamento:

$$K = a \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) \quad (3.17)$$

onde  $K$  é denominada constante da taxa de reação,  $E$  equivale à energia de ativação, quantidade de energia mínima que deve ser fornecida aos reagentes para que possam reagir,  $a$  é o fator pré-exponencial, e incorpora diversas relações, dentre as quais, taxa de colisão das partículas – relacionada ao livre caminho médio – e coeficiente de efetividade

da colisão – relacionado à geometria das colisões, pois nem todas colisões efetivamente são capazes de romper ligações e provocar novos grupamentos.

Posteriormente, para melhor representar a dependência da taxa de reação com a temperatura, observada em diversas reações para as quais o modelo de Arrhenius não era capaz de prover um bom ajuste – sobretudo em uma ampla faixa de variação – foi proposto o modelo de Arrhenius Modificado, segundo a expressão:

$$K = a T^n \exp\left(\frac{-E}{\tilde{R}T}\right) \quad (3.18)$$

onde o fator  $n$  é denominado expoente ou coeficiente da temperatura, assumindo valores positivos, normalmente entre 0 e 1. De qualquer forma, a maior sensibilidade à temperatura reside no termo exponencial, com a energia de ativação. Reações com baixa energia de ativação sofrem menor influência da temperatura, enquanto reações com elevados valores de energia de ativação são bastante dependentes da temperatura. Em um gráfico do  $\ln K$  versus  $1/T$ , o valor da inclinação da curva é igual a  $-E/\tilde{R}$ , fornecendo o valor da energia de ativação.

A taxa de reação,  $q$ , é constituída, além dessa parte dependente da temperatura, por uma parte dependente da concentração das espécies – relacionada à estequiometria da reação no caso de reações elementares ou, de uma forma geral, relacionada à ordem da reação – resultando no seguinte equacionamento:

$$q_m = K_{dm} \prod_{n=1}^N [X_n]^{j'_{nm}} - K_{rm} \prod_{n=1}^N [X_n]^{j''_{nm}} \quad (3.19)$$

onde  $[X_n]$  é a concentração molar da  $n$ -ésima espécie e  $K_{dm}$  e  $K_{rm}$  são as constantes das taxas de reação nos sentidos direto e reverso para a  $m$ -ésima reação. A partir da taxa de reação, obtêm-se as taxas de formação das espécies químicas,  $\dot{\omega}$ , com a utilização das relações estequiométricas em cada uma das reações envolvidas:

$$j_{nm} = j''_{nm} - j'_{nm} \quad (3.20)$$

$$\dot{\omega}_n = \sum_{m=1}^M j_{nm} q_m, (n = 1, \dots, N) \quad (3.21)$$

sendo  $j'_{nm}$  e  $j''_{nm}$  os coeficientes estequiométricos da espécie  $n$  nos sentidos direto e reverso para a  $m$ -ésima reação.

### 3.5.4 Reações consecutivas e paralelas

Em muitas situações tem-se uma reação ocorrendo em mais de uma etapa, de forma que o reagente forma primeiramente espécies intermediárias, a partir das quais ocorre a formação dos produtos. Tal situação caracteriza reações consecutivas, fortemente influenciadas pela ordem de grandeza das taxas das reações envolvidas. Considere um processo consecutivo em dois passos, do tipo:



Se a taxa da segunda etapa for muito inferior à primeira, há grande formação do composto intermediário  $A_2$  sem que  $A_3$  esteja presente em quantidade considerável. A formação de  $A_2$  estará relacionada ao consumo de  $A_1$  e, numa escala de tempo maior, o surgimento de  $A_3$  relacionado ao consumo de  $A_2$ . Tal situação é representada tipicamente pelo gráfico do lado esquerdo da figura 3.1. Por outro lado, se a taxa de reação da segunda etapa é bem superior à da primeira, não é observada quantidade apreciável de  $A_2$  no sistema, pois tão logo a espécie intermediária seja formada, é rapidamente consumida para produção de  $A_3$ . Em tal situação, tipicamente representada no lado direito da figura 3.1, é comum assumir, como aproximação, que a variação da concentração de  $A_2$  com o tempo seja nula, caracterizando uma situação de estado estacionário.

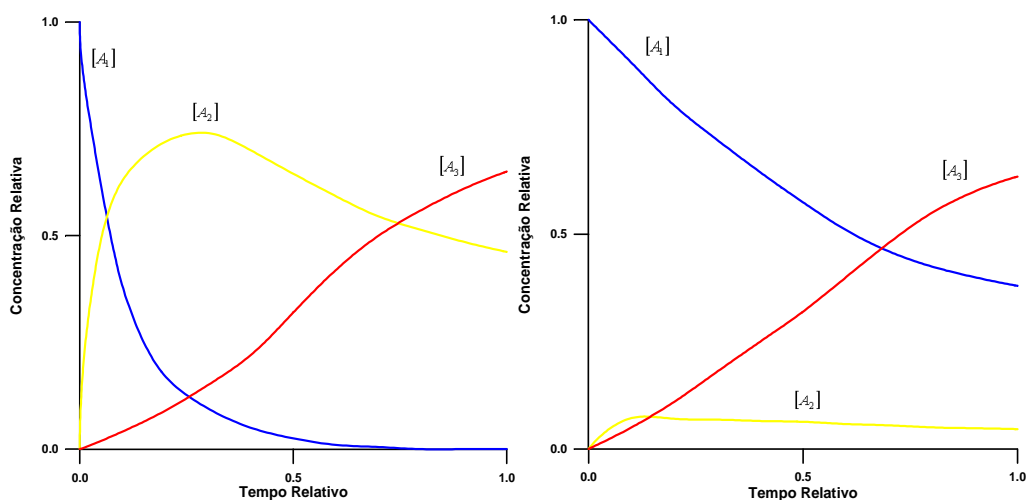


Figura 3.1 - Concentrações durante a conversão da espécie  $A_1$  a  $A_3$  por meio de reações consecutivas.

Outra possibilidade envolve a participação de uma mesma espécie em dois ou mais processos, de forma a existir múltiplos caminhos para formação ou consumo da espécie em questão. Nessa situação as reações são denominadas paralelas, sendo muito comum a decomposição de um reagente em produtos diversos, diferentes reagentes originando o mesmo produto e reações de uma espécie com dois ou mais reagentes, como mecanismos do tipo:



Situações desse tipo em geral não têm uma análise simples, mas em algumas situações específicas, devido a diferentes ordens de grandeza entre as taxas envolvidas, pode-se desprezar um dos possíveis caminhos de reação em simplificações do modelo. Deve-se observar que nesse exemplo as reações são paralelas com relação a  $A_1$ , mas exibem outro caráter com relação às demais espécies, o que leva a esquemas bem mais complexos para análise quando num mecanismos estão envolvidas algumas dezenas de espécies e reações.

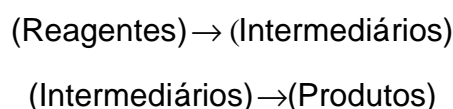
### 3.5.5 Reações individuais e reações em cadeia

A considerar reações elementares, a formação dos produtos dificilmente ocorre numa única etapa de quebra e reagrupamento de ligações químicas. Tendo essa constatação em mente, os processos elementares envolvem a formação de intermediários no caminho para formação dos produtos. Os tipos de intermediários formados dependem da química dos materiais, agrupados da seguinte forma:

- *radicais livres*: átomos livres ou grandes fragmentos de moléculas estáveis que contêm um ou mais elétrons desemparelhados, são via de regra instáveis e altamente reativos;
- *íons e substâncias polares*: átomos, moléculas ou fragmentos de moléculas carregados eletricamente;
- *moléculas*: usualmente estão relacionadas como reagentes ou produtos de uma etapa em reações múltiplas, mas em se tratando de uma espécie altamente reativa pode ser considerada um intermediário reativo;

- *complexos de transição*: a grande quantidade de colisões entre as moléculas reagentes resulta em uma ampla distribuição de energia entre as moléculas, o que pode promover ligações tensionadas, formas ou associações instáveis de moléculas, que podem se decompor para dar origem aos produtos ou, por meio das colisões, retornar ao estado normal. Essas formas instáveis são chamadas complexos de transição.

Mecanismos reativos envolvendo esses intermediários podem ser de dois tipos: reações individuais e reações em cadeia. Numa reação individual, o intermediário é formado na primeira reação, desaparecendo logo em seguida para formar o produto, e pode ser representado pelo esquema seguir:



Nas reações em cadeia o intermediário é formado na primeira reação, chamada então de etapa de iniciação. Em uma ou mais etapas seguintes o intermediário se combina com o reagente para formar o produto e mais um intermediário; essa é a etapa de propagação da cadeia, sendo a característica essencial da reação em cadeia. Na etapa de propagação o intermediário não é consumido, atuando simplesmente como um catalisador na conversão do material, o que indica que cada molécula de intermediário pode catalisar uma longa cadeia de reações, mesmo milhares delas antes de ser consumida [13]. Ao final do processo, o intermediário é destruído na etapa de término da cadeia. Esse tipo de reação é muito importante nos processos de combustão:



### 3.5.6 Equilíbrio químico

As transformações químicas tendem, com o passar do tempo, a atingir um estado de equilíbrio, onde macroscopicamente não se observam mais alterações no sistema. Esse estado está intimamente ligado à Segunda Lei da Termodinâmica, correspondendo à condição de máxima entropia do sistema. Conhecidas as espécies envolvidas, as

concentrações dos reagentes, e duas propriedades nos estados iniciais e finais, a composição no equilíbrio pode então ser estabelecida por meio da entropia máxima do sistema. Nessa condição, denominada de equilíbrio químico, as taxas de reação no sentido direto e reverso são iguais, de forma que o resultado líquido não impõe nenhuma variação no sistema. No entanto, em termos do processo reativo, tal condição corresponderia a um intervalo de tempo suficientemente grande para que o sistema chegasse a essa condição de equilíbrio.

Sob o ponto de vista prático, uma cinética química muito rápida faz com que os produtos do reator sejam determinados pelo equilíbrio químico. Condições de cinética não tão rápida, além de condições não ideais de mistura, variação de temperatura e de pressão fazem com que em grande parte das aplicações de Engenharia os produtos não sejam determinados pelo equilíbrio, mas pela interação dos fenômenos de transferência de calor e transferência de massa com a taxa de reação química.

### 3.5.7 Condição de estado estacionário para espécies químicas

Uma espécie intermediária que apresenta uma concentração muito baixa, de forma que sua detecção e medição no sistema se torna bastante complexa, sugere a utilização de uma aproximação, chamada aproximação de estado estacionário, onde a taxa de variação da concentração dessa espécie é considerada nula. Desse modo, admite-se que sendo a espécie  $A$  uma dessas intermediárias:

$$[A] \text{ é pequena e } \frac{d[A]}{dt} \cong 0 \quad (3.26)$$

Do mecanismo elementar de cinética química resulta uma equação para a taxa de variação da espécie intermediária, em função das constantes das taxas de reações e concentrações das espécies envolvidas; onde é aplicada a aproximação de estado estacionário. Utilizando essa aproximação, se torna possível obter a concentração da espécie intermediária em função das concentrações das demais espécies e das constantes das taxas das reações, graças à equação adicional para a taxa de variação da concentração.



### 3.5.8 Processos para obtenção de taxas e mecanismos

A busca por um modelo capaz de descrever as condições verificadas experimentalmente é uma tarefa bastante árdua e exigente. Esse trabalho é desenvolvido em três áreas de investigação de uma reação: a estequiometria, a cinética e o mecanismo. Normalmente a tarefa começa com o estudo da estequiometria, seguido da investigação cinética, a partir da qual o mecanismo é analisado com base nas informações empíricas para as taxas. A investigação cinética envolve um grande trabalho experimental, onde são empregados vários reatores clássicos com condições bem definidas e aparatos sofisticados para medições de temperatura, pressão, velocidade e concentração de espécies químicas [14]. Grande parte do desenvolvimento alcançado nos últimos anos quanto a mecanismos mais fiéis à realidade está ligado ao advento de técnicas mais precisas para a observação experimental, destacando-se os processos óticos não-intrusivos baseados na utilização do laser.

A título de exemplo desse trabalho investigativo, podem ser citadas, dentre os procedimentos mais simples para busca de um mecanismo, as seguintes observações:

- A estequiometria indica se temos uma reação simples ou não, pois uma estequiometria complicada ou que se altere com as condições da reação é uma evidência de reações múltiplas;
- Mesmo que a estequiometria não evidencie o caráter múltiplo pela observação anterior, pode-se descartar a existência de uma reação elementar pelo fato que, em reações elementares, nenhuma molecularidade maior que três foi observada até hoje [15];
- Para reações reversíveis, considerando a existência de dois caminhos alternativos, se um deles for preferido no sentido direto, este mesmo caminho deve ser preferido no sentido inverso, com base no chamado princípio de reversibilidade microscópica;

Uma variação na energia de ativação com a temperatura indica uma modificação no mecanismo controlador da reação, existindo, dessa forma, reações múltiplas. Tal situação pode ser visualizada de forma gráfica, aplicando-se o logaritmo natural na expressão para a taxa. Uma distorção na relação linear esperada representa a presença de outra reação, que, ao assumir importância sob aquela condição específica, passa a distorcer a relação pré-existente. Para reações em paralelo, um aumento de temperatura provoca um acréscimo no valor da energia de ativação, enquanto que para

etapas em série há uma diminuição. Comportamento inverso é observado no caso de diminuição da temperatura, como apresentado na figura 3.2.

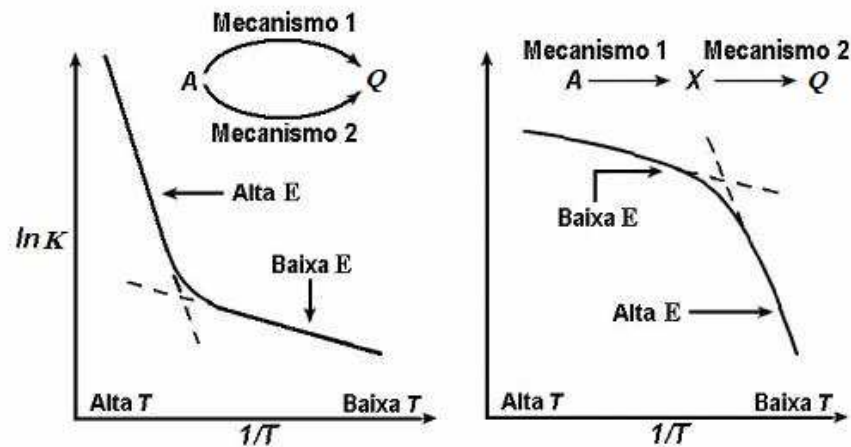


Figura 3.2 - Modificação no mecanismo controlador da reação (adaptado de [15]).

### 3.6 - TURBULÊNCIA

A cinética química não é capaz de prover todas as informações necessárias para construção de um modelo adequado ao estudo de turbinas LPP. Os fenômenos relacionados à transferência de calor e massa são muito importantes, e suas interações com a cinética química é que determinam o que efetivamente ocorre no reator. Dessa forma, o desenvolvimento de turbinas LPP está intimamente relacionado ao conhecimento das condições do escoamento, como forma de se otimizar e controlar o processo reativo.

O escoamento dos fluidos a baixas velocidades é descrito na forma de estruturas laminares, com a movimentação suave das camadas, sem mistura a nível macroscópico de camadas adjacentes. Tal situação, no entanto, não caracteriza o comportamento observado na maioria dos escoamentos encontrados na natureza e em aplicações práticas de Engenharia, onde a estrutura do escoamento se caracteriza por movimentos tridimensionais aleatórios adicionais à movimentação principal. Esse regime turbulento está associado ao crescimento da importância relativa às forças de inércia e, apesar da maior dissipação de energia, irregularidade do escoamento e impossibilidade de se estabelecer uma relação de causa e efeito, as altas taxas de transporte de calor e massa representam um novo patamar, aproveitado em várias aplicações de Engenharia.

Devido ao seu aspecto aleatório, a análise do fenômeno da turbulência envolve ferramentas e modelos estatísticos que assumem grande importância na tentativa

de caracterização de tendências de comportamento e desenvolvimento de modelos mais realísticos, empregados no aperfeiçoamento de aparatos envolvendo o escoamento de fluidos, como as câmaras de combustão LPP.

### 3.6.1 Descrição do fenômeno

Para descrever as variações características no campo de velocidades do escoamento turbulento é empregado o modelo da decomposição de Reynolds, onde conforme proposto por Theodore Von Kármán, o fenômeno é descrito como flutuações da velocidade do escoamento governadas por equilíbrio estatístico. Nesse modelo, a velocidade instantânea  $u$  numa posição  $\vec{s}$  e instante  $t$  é descrita pela composição de um valor médio na direção principal do escoamento,  $\bar{u}$ , e uma flutuação de velocidade, representada por uma variável aleatória centrada,  $u'$ .

$$u(\vec{s}, t) = \bar{u}(\vec{s}, t) + u'(\vec{s}, t) \quad (3.27)$$

Seguindo esse tratamento de um fenômeno aleatório, o enfoque estatístico na caracterização de tendências de comportamento leva à natural definição de uma função de densidade de probabilidade,  $P(u)$ , que representa a probabilidade de que a velocidade instantânea assuma valores dentro de um determinado intervalo  $\Delta u$ , conforme pode ser observado na figura 3.3.

$$P(u) \Delta u = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \sum_i \Delta t_i \quad (3.28)$$

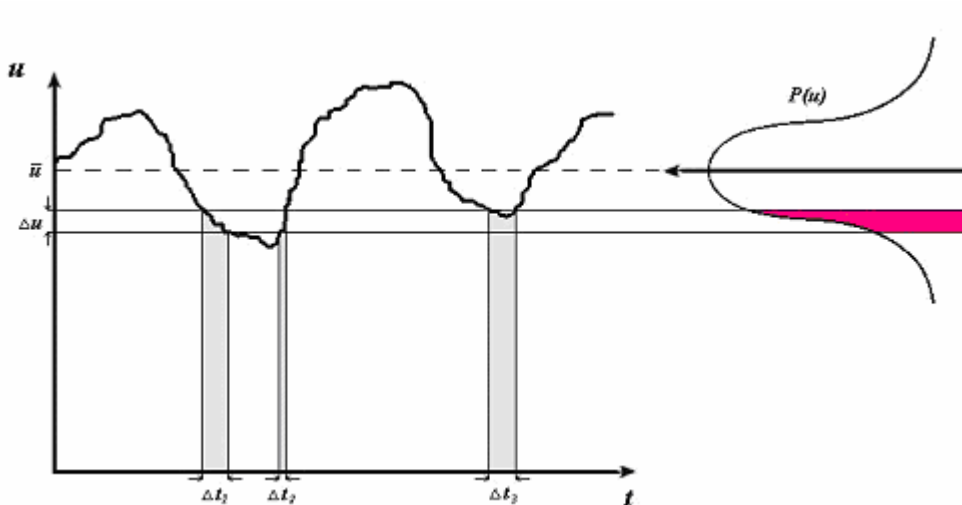


Figura 3.3 - Função densidade de probabilidade de uma variável aleatória  $u$ .

A partir de uma função de densidade de probabilidade podem ser definidas diversas funções estatísticas para análise do comportamento de um evento estocástico. Funções muito importantes na caracterização de variáveis aleatórias centradas, os momentos - em especial os de segunda ordem ou varianças - são amplamente utilizados no estudo do escoamento turbulento, e com base nos mesmos são definidos importantes conceitos como a energia cinética de turbulência,  $k$ , e a intensidade de turbulência,  $I$ :

$$\overline{u'^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} u'^2 P(u') du' = \sigma_x^2 \quad (3.29)$$

$$\overline{v'^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} v'^2 P(v') dv' = \sigma_y^2 \quad (3.30)$$

$$\overline{w'^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} w'^2 P(w') dw' = \sigma_z^2 \quad (3.31)$$

$$k = \frac{1}{2} (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}) \quad (3.32)$$

$$I = \frac{\sqrt{\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}}}{\bar{u}} \quad (3.33)$$

Outras funções estatísticas importantes quando estão envolvidas nas análises múltiplas variáveis aleatórias, e portanto, sempre presentes nas análises do fenômeno da turbulência são as chamadas correlações. As correlações espaciais contêm informações sobre condições em diferentes pontos do espaço em um mesmo instante de tempo; as correlações temporais condições no mesmo ponto do espaço em diferentes instantes; enquanto as correlações espaço-temporais reúnem informações em pontos distintos tomados também em diferentes instantes. A título de ilustração, a correlação espacial entre as flutuações de velocidades consideradas nos pontos 1 e 2 envolve a resolução da seguinte integral:

$$u'_1 u'_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} u'_1 u'_2 P(u'_1, u'_2) du'_1 du'_2 \quad (3.34)$$

### 3.6.2 As escalas turbulentas

A análise das estruturas presentes nos escoamentos turbulentos revela a presença de vórtices de diferentes dimensões, que assumem um importante papel na distribuição de energia no escoamento. Tomando um campo de velocidades em um certo instante de tempo, é possível imaginar uma descrição do campo em termos de infinitas harmônicas caracterizadas por um número de onda,  $\omega$ , inverso do comprimento característico dos vórtices. Com essa descrição, é possível associar um nível de energia

para cada comprimento característico e obter um espectro energético do escoamento em função da dimensão dos vórtices presentes no escoamento, como representado na figura 3.4.

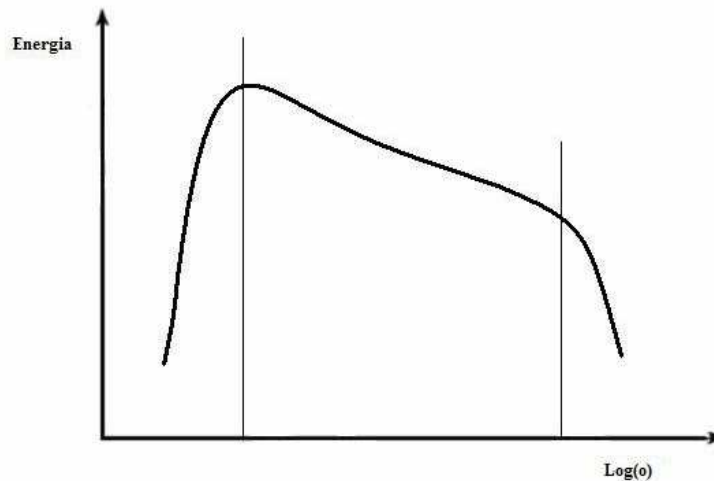


Figura 3.4 – Espectro energético típico do escoamento em função do comprimento característico dos vórtices.

Nesse espectro, se observa uma região para baixos números de onda que termina com um pico de energia a um comprimento conhecido como escala integral ou característica das grandes escalas turbulentas. Após esse pico, existe uma região intermediária de distribuição de energia até um elevado número de onda a partir do qual o espectro energético sofre uma intensa redução devido aos efeitos viscosos. Esse ponto determina um outro comprimento característico do escoamento, conhecido como a escala de Kolmogorov ou micro-escala turbulenta. Tal denominação provém em homenagem ao cientista que ao analisar o espectro energético, obteve o andamento da distribuição de energia, observando que ao interno do espectro não existe produção de energia turbulenta, apenas a transferência entre as diversas escalas (princípio da “cascata” de energia), e que a energia transferida às menores escalas é dissipada através dos efeitos viscosos.

#### 3.6.2.1 As grandes escalas turbulentas

Os maiores vórtices turbulentos, aos quais estão associadas as menores velocidades de rotação, são provocados essencialmente pelas forças externas, pela presença

das paredes ou devido ao gradiente de pressão. Em tais escalas é encontrada a energia turbulenta introduzida no escoamento, e como são as primeiras estruturas formadas, são também muitas vezes referidas como as escalas de produção de energia. Tipicamente o comprimento característico da escala integral,  $l$ , é da ordem de um décimo da grandeza característica do escoamento, como por exemplo o diâmetro de um tubo. Fisicamente, o comprimento da escala integral representa a distância entre dois pontos do escoamento em que cessa a correlação entre as flutuações de velocidade dos dois pontos, e pode ser determinado integrando ao longo do escoamento os coeficientes de correlação espaciais. A nível de velocidade, são associadas a essa escala as flutuações turbulentas de velocidade:  $u'$ ,  $v'$  e  $w'$ , e dessa forma um número de Reynolds associado às grandes escalas,  $Re_l$ , pode ser expresso como:

$$Re_l = \frac{u'l}{\nu} \quad (3.35)$$

A nível temporal, se associa a essa escala um tempo característico,  $t_l$ , obtido pela razão entre a energia cinética turbulenta,  $k$ , e a taxa em que essa energia é dissipada,  $\varepsilon$ :

$$t_l = \frac{k}{\varepsilon} \quad (3.36)$$

### 3.6.2.2 As micro-escalas turbulentas

A escala de comprimento de Kolmogorov,  $\eta$ , está associada à dimensão das menores escalas presentes no escoamento e representa o nível em que ocorre a dissipação da energia cinética turbulenta devido a efeitos ligados à viscosidade cinemática, que são significantes nessa escala dimensional. Por meio de análise dimensional, esse comprimento característico pode ser expresso em função da taxa de dissipação de energia,  $\varepsilon$ , e da viscosidade cinemática do fluido,  $\nu$ , com a seguinte relação:

$$\eta = \left( \frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (3.37)$$

A nível de tempo, é associado um tempo característico,  $t_K$ , também baseado na taxa de dissipação da energia cinética turbulenta e na viscosidade cinemática do fluido:

$$t_K = \left( \frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.38)$$

### 3.6.2.3 As escalas turbulentas intermediárias

As escalas intermediárias, ou de Taylor, correspondem às estruturas com dimensão entre as pequenas e grandes escalas e são responsáveis pela transferência da energia cinética turbulenta entre os níveis de produção e dissipação. Um comprimento característico,  $l_\lambda$ , é algumas vezes utilizado, e pode ser associado à dimensão das pequenas ou grandes escalas com base no número de Reynolds associado às grandes escalas turbulentas:

$$l_\lambda = \eta(\text{Re}_l)^{\frac{1}{4}} = l(\text{Re}_l)^{\frac{-1}{2}} \quad (3.39)$$

### 3.6.3 Equacionamento principal e o problema de fechamento

Adotando-se o modelo da decomposição de Reynolds no equacionamento conservativo para um meio fluido, a correlação entre flutuação de massa específica e velocidade surge como nova incógnita na equação da continuidade, que assume a seguinte forma em coordenadas cartesianas e notação compacta:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \bar{u}_j + \bar{\rho}' \bar{u}_j'] = 0 \quad (3.40)$$

Para a equação de conservação da quantidade de movimento (Navier-Stokes), considerando um fluido incompressível e newtoniano, surge também como nova incógnita um termo relacionado à transferência de quantidade de movimento efetuada pelas flutuações de velocidades, o chamado tensor de Reynolds:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = b_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{p} \delta_{ij} + \overline{\rho u_i' u_j'} - \mu \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] \quad (3.41)$$

Novas incógnitas exigem equações adicionais para a solução do conjunto de equações conservativas, o que aumenta a complexidade do sistema e, portanto, o esforço para resolução, comparado ao mesmo problema envolvendo um fluxo laminar. As equações adicionais requeridas para o fechamento do sistema de equações num

escoamento turbulento devem ser fornecidas por uma nova formulação específica, ao que se convém chamar um modelo de turbulência.

De acordo com a estratégia adotada para resolver esse problema de fechamento, os modelos de fechamento se dividem em dois grandes grupos: os modelos de 1ª ordem – quando a representação do tensor de Reynolds é descrita com base em equações diretas ou “constitutivas” – e modelos de ordem superior, quando é adotada uma formulação diferencial ou evolutiva relacionada à conservação de conceitos físicos da turbulência para representação do tensor. Dentro desses grupos costuma-se ainda diferenciar os modelos de turbulência pelo número de equações que descrevem o andamento de alguma grandeza turbulenta característica.

Uma alternativa ao uso dos modelos de turbulência consiste em efetuar a discretização das equações conservativas nas formas originais, descritas no subtítulo 3.3, o que leva a uma solução exata que contém internamente os contributos relativos às flutuações turbulentas. Dessa maneira, faz-se necessário realizar uma média temporal das soluções para obter uma solução que defina o campo de movimento médio do fluido. Esse método é denominado simulação numérica direta, DNS (*Direct Numerical Simulation*). No entanto, essa estratégia requer uma malha extremamente refinada – com a qual seja possível descrever as menores escalas turbulentas – enquanto os passos de tempo de integração empregados também devem ser extremamente pequenos. Tais requisitos, apesar da fantástica evolução computacional vivida nos últimos anos, limita a aplicação da técnica DNS a problemas relativamente simples, porém de grande valia para testes dos modelos de turbulência empregados na simulação de casos práticos.

### 3.6.4 Modelos de fechamento de 1ª ordem

Como sugere a equação de Navier-Stokes, os primeiros modelos utilizaram uma representação do tensor de Reynolds na mesma forma do tensor de Navier, com o emprego de uma viscosidade turbulenta,  $\mu_T$ , segundo a Hipótese de Boussineq:

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_T \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.42)$$

Um aprimoramento do modelo, a fim de introduzir uma natureza tensorial à viscosidade turbulenta, de forma a superar uma das principais limitações do modelo – o fato das direções principais do tensor de Reynolds em muitas circunstâncias não



coincidirem com as direções principais do tensor taxa de deformação – resultou na hipótese generalizada de Boussineq:

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_T \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left( \frac{\partial u_k}{\partial x_k} + k\rho \right) \quad (3.43)$$

onde persiste ainda como inconsistência o fato da viscosidade turbulenta não poder assumir o caráter de uma propriedade termodinâmica, sendo sempre uma função do escoamento. Alguns modelos de turbulência desse tipo são brevemente apresentados a seguir.

#### 3.6.4.1 O modelo do comprimento de mistura de Prandtl (1925)

Um dos mais simples, antigo e conhecido, esse modelo é aplicado sobretudo para escoamento no interior da camada-limite turbulenta onde, por fornecer bons resultados, continua como uma opção válida para estudos dessa natureza. Pode ser utilizado ainda para obtenção de condições iniciais na solução do escoamento com modelos mais avançados.

$$\overline{u'_i u'_j} = \nu_T \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad (3.44)$$

$$\nu_T = h^2 \left| \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right| \quad (3.45)$$

$$\begin{cases} h = h_i \rightarrow h_i > h_0 \\ h = h_0 \rightarrow h_0 \geq h_i \end{cases} \quad (3.46)$$

$$h_i = G y \left( 1 - \exp\left(-\frac{y^+}{A^+}\right) \right) \quad (3.47)$$

$$y^+ = \frac{u_F y}{\nu} \quad (3.48)$$

$$h_0 = C_1 \gamma \quad (3.49)$$

$$G = 0,41 \quad , \quad C_1 = 0,089 \quad , \quad A^+ = 26 \quad (3.50)$$

onde  $\gamma$  é a espessura da camada-limite e o fator  $h$  é denominado o comprimento de mistura de Prandtl, sendo derivado de resultados empíricos com ajuste das constantes do modelo,  $A^+$ ,  $C_1$  e  $G$ . Em muitos casos é possível estabelecer uma relação simples entre o comprimento de mistura,  $h$ , e um comprimento característico do escoamento [16].

### 3.6.4.2 O modelo de Prandtl-Kolmogorov

É um modelo que, como desenvolvimento do modelo anterior, utiliza uma nova formulação para a viscosidade turbulenta, como função da energia cinética de turbulência segundo a expressão (3.52), conhecida como a relação de Prandtl-Kolmogorov. Aplicações desse modelo incluem estudos da camada-limite atmosférica.

$$\overline{u'_i u'_j} = \nu_T \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad (3.51)$$

$$\nu_T = C_D h \sqrt{k} \quad (3.52)$$

$$\rho \left( \frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{P_R k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \mu_T \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right)^2 - \frac{C_D \rho k^{\frac{3}{2}}}{h} \quad (3.53)$$

$$\begin{cases} h = h_i \rightarrow h_i > h_0 \\ h = h_0 \rightarrow h_0 \geq h_i \end{cases} \quad (3.54)$$

$$h_i = G y \left( 1 - \exp \left( - \frac{y^+}{A^+} \right) \right) \quad (3.55)$$

$$h_0 = C_1 \gamma \quad (3.56)$$

$$P_R = 1,0 \quad , \quad C_D = 0,164 \quad (3.57)$$

### 3.6.4.3 O Modelo k-ε

O modelo  $k - \varepsilon$  é um dos modelos mais consagrados e difundidos, pela sua aplicabilidade em diversas situações fornecendo bons resultados a custo relativamente baixo, além da sua robustez. Por essas características tem sido adotado como um modelo padrão em aplicações industriais e se encontra disponível na grande maioria dos códigos CFD. O modelo original, devido a Jones & Launder (1972) [18], toma o seguinte desenvolvimento, com equações evolutivas para  $k$ , a energia cinética de turbulência, e  $\varepsilon$ , a taxa de dissipação da energia cinética de turbulência:

$$\overline{u'_i u'_j} = \nu_T \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \quad (3.58)$$

$$\nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.59)$$

$$C_\mu = 0,09 \quad (3.60)$$

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u} \cdot \nabla k = \nabla \cdot \left\{ \left[ \nu + \frac{\nu_T}{\sigma_k} \right] \nabla k \right\} + \bar{\pi} - \varepsilon \quad (3.61)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \bar{u} \cdot \nabla \varepsilon = \nabla \cdot \left\{ \left[ \nu + \frac{\nu_T}{\sigma \varepsilon} \right] \nabla \varepsilon \right\} + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \overset{\Rightarrow}{\pi} + C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.62)$$

$$\sigma_k = 1 \quad , \quad \sigma_\varepsilon = 1,3 \quad , \quad C_{\varepsilon 1} = 1,44 \quad , \quad C_{\varepsilon 2} = 1,92 \quad (3.63)$$

$$\overset{\Rightarrow}{\pi} = -u'_0 u' \times \nabla \bar{u} \quad (3.64)$$

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \nu \left[ \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right]^2 \quad (3.65)$$

#### 3.6.4.4 O Modelo k- $\omega$

O modelo  $k-\omega$  consiste numa alternativa do modelo  $k-\varepsilon$  para baixos números de Reynolds, situação onde a viscosidade cresce em importância e o modelo  $k-\varepsilon$  pode não fornecer bons resultados. A formulação mais popular deste modelo, que foi primeiramente proposto por Kolmogorov, utiliza uma equação para a frequência das flutuações de vorticidade,  $\omega$ , na seguinte forma:

$$\overline{u'_i u'_j} = \nu_T \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \quad (3.66)$$

$$\nu_T = C_\mu \frac{k}{\omega} \quad (3.67)$$

$$C_\mu = 1,0 \quad (3.68)$$

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u} \cdot \nabla k = \nabla \cdot \left\{ \left[ \nu + \frac{\nu_T}{\sigma_k} \right] \nabla k \right\} + \overset{\Rightarrow}{\pi} - \beta \omega k \quad (3.69)$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \bar{u} \cdot \nabla \omega = \nabla \cdot \left\{ \left[ \nu + \frac{\nu_T}{\sigma_\omega} \right] \nabla \omega \right\} + C_{\omega 1} \frac{\omega}{k} \overset{\Rightarrow}{\pi} + C_{\omega 2} \omega^2 \quad (3.70)$$

$$\sigma_k = 2,0 \quad , \quad \sigma_\omega = 2,0 \quad , \quad \beta = 0,09 \quad , \quad C_{\omega 1} = 0,44 \quad , \quad C_{\omega 2} = 0,92 \quad (3.71)$$

$$\overset{\Rightarrow}{\pi} = -u'_0 u' \times \nabla \bar{u} \quad (3.72)$$

#### 3.6.4.5 O Modelo k- $\varepsilon$ RNG

O modelo  $k-\varepsilon$  RNG (*Re-Normalization Group*) consiste numa modificação do modelo  $k-\varepsilon$  padrão, no qual é adotada uma nova equação para  $\varepsilon$  obtida segundo uma teoria matemática que modifica sobretudo a hipótese, de consideração prática adotada no modelo  $k-\varepsilon$  padrão, de equilíbrio turbulento. Aplicações práticas do modelo não têm demonstrado vantagens no uso desse modelo, limitado a classes de escoamentos

em que a nova equação tenha sido validada [17, 21]. Apesar das desvantagens apontadas na literatura, o modelo  $k - \varepsilon$  RNG é também objeto de estudo deste trabalho.

#### 3.6.4.6 O Modelo SST

Apesar das vantagens apresentadas pelo modelo  $k - \omega$  em relação ao  $k - \varepsilon$  em situações de gradiente de pressão adverso e separação do fluxo, pela maior sensibilidade às alterações no gradiente de pressão, a principal deficiência do modelo  $k - \omega$  consiste na sensibilidade de seus resultados para o valor de  $\omega$  em condições de escoamento não-perturbado. Uma possível solução para essa deficiência é o uso combinado dos modelos  $k - \omega$  e  $k - \varepsilon$ , empregando o modelo  $k - \omega$  em regiões próximas a paredes e o modelo  $k - \varepsilon$  nas regiões mais distantes. Essa solução, com um uso combinado dos modelos foi proposta por Menter [19], no que resultou no modelo denominado *Shear Stress Transport*, ou simplesmente SST. A combinação dos dois modelos é feita por uma função empírica de interpolação.

### 3.6.5 Modelos de fechamento de ordem superior

Há algum tempo se espera que os modelos de turbulência baseados na formulação evolutiva do tensor de Reynolds substituam modelos tão difundidos, como o  $k - \varepsilon$ , e se tornem padrões em códigos CFD utilizados na indústria. No entanto a difusão desses modelos tem acontecido de uma forma mais lenta do que muitas vezes prevista. Apesar do grande potencial demonstrado por esses modelos sobretudo junto à comunidade científica, a maior complexidade devido ao maior número de termos nos sistemas de equações, a necessidade de modelagem para outros termos de ordem superior presentes nas equações evolutivas – alguns com pouca informação experimental disponível – e algumas dificuldades numéricas na aplicação dos modelos são ainda fatores restritivos à ampla utilização.

A formulação evolutiva é obtida da manipulação da equação de Navier-Stokes, e contém equações de transporte para todas as componentes do tensor de Reynolds. Dentre a variedade de modelos existentes, destaca-se em alguns códigos CFD o modelo de Spziale, Sarkar e Gatski, SSG, pelo compromisso entre acurácia e esforço computacional.

### 3.6.6 Leis de parede

Os modelos de combustão apresentados são aplicáveis em condições onde os efeitos inerciais são preponderantes em relação aos efeitos viscosos. Na região da camada-limite turbulenta, a aplicação dos modelos de turbulência requer a observação de alguns cuidados, pois pela própria definição da camada-limite, essa é uma região onde os efeitos viscosos não podem ser desprezados.

Definindo uma grandeza denominada velocidade de atrito,  $u_F$ , função da tensão de cisalhamento na parede,  $\tau_w$ , e da massa específica do fluido,  $\rho$ , se compõe um parâmetro adimensional,  $y^+$ , que representa a razão entre termos inerciais e viscosos no interior da camada-limite:

$$u_F = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (3.73)$$

$$y^+ = \frac{u_F y}{\nu} \quad (3.74)$$

O parâmetro  $y^+$  é fundamental no estudo da camada-limite, e observando o comportamento desse parâmetro, se identificam zonas de diferentes comportamentos: para valores de  $y^+$  muito pequenos, a preponderância dos efeitos viscosos faz com que o perfil de velocidade seja relativamente independente das escalas inerciais, na região chamada substrato viscoso; enquanto que para valores de  $y^+$  elevados, tipicamente superiores a 500, os efeitos viscosos podem ser desprezados. Entre essas duas zonas existe uma importante região, a camada logarítmica, em que são impostas as condições de contorno dos modelos de turbulência (figura 3.5).

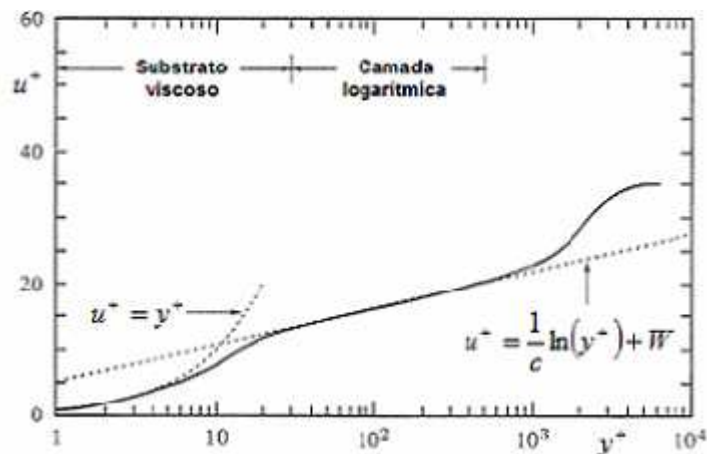


Figura 3.5 – Sub-regiões da camada-limite.

Nessa região, vale a expressão (3.75) para a velocidade, com a qual a velocidade no nó do volume de controle mais próximo à parede pode ser imposta

$$\bar{u}(y) = u_F \left[ \frac{1}{c} \ln(y^+) + W \right] \quad (3.75)$$

Relações desse tipo são denominadas leis de parede, e para que a sua aplicação não implique em condições notadamente não coerentes à realidade, faz-se necessário que sejam utilizadas dentro da região onde o efeito viscoso possa ser desprezado. Na prática, costuma-se utilizar nos códigos CFD uma primeira linha de volumes finitos tal que os nós desses volumes estejam posicionados a uma distância da parede em que  $y^+ \geq 30$  e de modo que preferencialmente se observe a seguinte relação:

$$30 \leq y^+ \leq 100 \quad (3.76)$$

### 3.7 - INTERAÇÃO COMBUSTÃO-TURBULÊNCIA

O processo de combustão em um escoamento laminar é governado fundamentalmente pela cinética química e pela taxa de difusão das espécies. Em um panorama de escoamento turbulento se observa que a estrutura da chama pode ser bastante modificada, o que revela a importância do processo turbulento na análise do fenômeno de combustão. Tal importância se torna ainda mais evidente quando se leva em consideração que o regime turbulento é a realidade para a grande maioria dos sistemas de uso prático, como motores a combustão interna, turbinas a gás e queimadores industriais. Um parâmetro fundamental nessa análise é a relação entre a velocidade característica do processo químico e a velocidade característica do processo de mistura turbulento, pois quando o processo químico é extremamente veloz, o processo de combustão será governado pelo processo de mistura turbulento e as condições estequiométricas; enquanto que processos de combustão envolvendo uma cinética química muito lenta serão limitados justamente pela velocidade de reação. Objetivamente, tais condições extremas podem ser identificadas por meio do número de Damköhler,  $Da$ , definido normalmente na forma de razão entre escalas características de tempo do processo químico,  $t_Q$  e de mistura turbulenta,  $t_T$ :

$$Da = \frac{t_T}{t_Q} \quad (3.77)$$

Dessa forma, a condição de cinética química extremamente veloz corresponde a uma condição tal que  $Da \gg 1$ ; enquanto que  $Da \ll 1$  representa uma condição governada essencialmente pela cinética química. Esse parâmetro é particularmente importante no estudo de chamas pré-misturadas, no qual o tempo característico de mistura é associado ao tempo de vida das maiores estruturas turbulentas e o tempo característico do processo químico é baseado na razão entre a espessura,  $\delta_L$ , e a velocidade de propagação de uma chama laminar,  $S_L$ .

$$t_Q = \frac{\delta_L}{S_L} \quad (3.78)$$

Uma típica chama turbulenta de pré-mistura, quando comparada a uma chama laminar, apresenta uma frente de chama enrugada e distorcida que se movimenta rapidamente no espaço, o que leva à impressão de uma chama bem mais espessa. Na verdade, a estrutura da chama está intimamente ligada ao tamanho das maiores e menores escalas do escoamento turbulento em relação à espessura da chama laminar, que caracteriza a espessura de uma zona de reação governada pelo transporte difusivo de calor e massa. Um parâmetro adotado para avaliar essa relação é o chamado número de Karlovitz,  $Ka$ , que define uma razão entre a espessura da chama laminar e o comprimento das microescalas turbulentas pela seguinte fórmula:

$$Ka = \left( \frac{\delta_L}{\eta} \right)^2 \quad (3.79)$$

De acordo com diferentes condições entre a espessura da chama laminar e as escalas turbulentas, identificadas pelo número de Karlovitz, a estrutura da chama pré-misturada pode ser classificada basicamente em três condições: regime de chamas dobradas, regime de chamas distribuídas e regime de elementos de chama.

### 3.7.1 Regime de chamas dobradas

Quando a espessura de chama é bem menor que a dimensão das menores escalas turbulentas, o escoamento turbulento promove a distorção e dobra ou enrugamento da fina frente de chama, onde ocorrem as reações químicas, dando origem às chamas dobradas. Nesse caso,  $Ka < 1$  e, como a espessura da chama está associada inversamente à

velocidade o processo de reação química, esse regime é caracterizado também por  $Da \gg 1$ .

### 3.7.2 Regime de chamas distribuídas

Também denominado de regime de chamas espessas: em oposição à situação anterior, quando as menores escalas turbulentas possuem dimensão notadamente inferior à espessura de chama,  $Ka \gg 1$ ; o transporte na frente de chama será também influenciado ou controlado pelas estruturas turbulentas. Na prática esse regime é de difícil utilização pela elevada perda de carga envolvida, visto que como as escalas turbulentas são de pequenas dimensões e o processo de mistura é rápido (alta flutuação de velocidade,  $Da < 1$ ), significa que as velocidades são elevadas e as aberturas para passagem do fluxo pequenas. Nesse regime, como o processo reativo é lento, fica evidente que as taxas de reações químicas dependem dos valores instantâneos de temperatura, e desse modo, as taxas médias de reação não podem ser obtidas simplesmente com o valor médio da temperatura.

### 3.7.3 Regime de elementos de chama

O regime entre as duas situações anteriores, quando a espessura da frente de chama se encontra entre as dimensões das menores e maiores escalas turbulentas, é de particular interesse porque corresponde à condição encontrada em diversos dispositivos de uso prático (figura 3.6). Em tal situação  $Da > 1$  e  $Ka > 1$ , mas não muito elevados. Nesse regime, observa-se a formação de pacotes de gases não-queimados envoltos pelos produtos da combustão dentro da zona reação. Tal característica é ponto de apoio para o modelo de combustão *eddy break-up* (quebra de vórtices), que supõe que a taxa de combustão seja determinada pela velocidade com que os pacotes de gases não-queimados sejam quebrados em pacotes menores até que haja suficiente área de contato entre a mistura e os gases quentes para permitir a reação. A consequência dessa suposição é que as taxas de reação passam a serem determinadas exclusivamente pela taxa de mistura turbulenta, e não mais pelo processo químico.



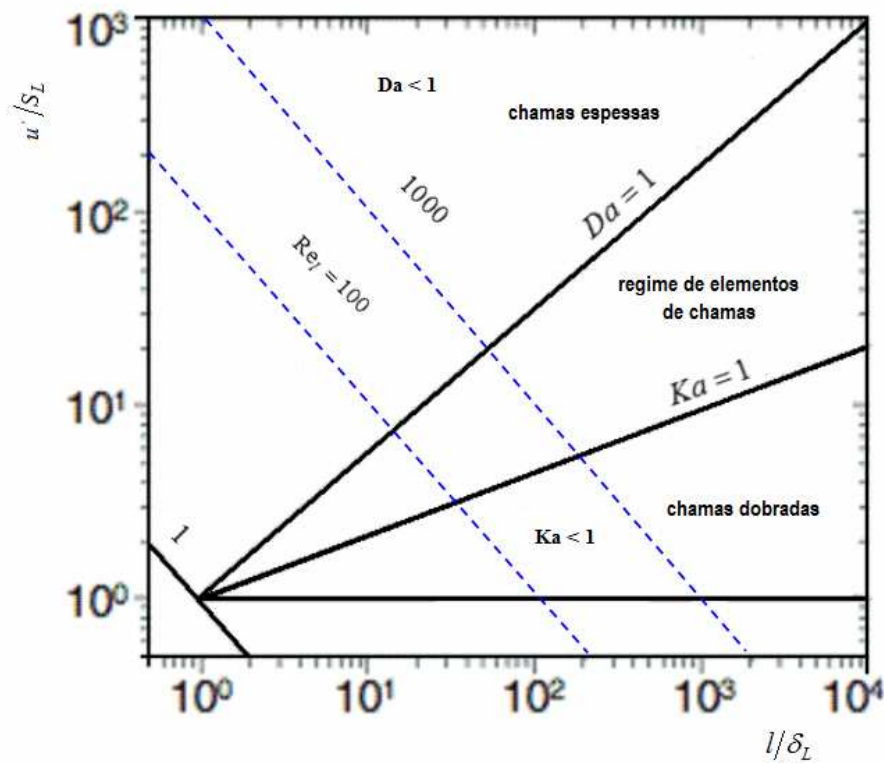


Figura 3.6 – Classificação das chamas turbulentas pré-misturadas.

### 3.7.4 O modelo eddy dissipation

Como anteriormente apresentado, em situações em que a cinética química do combustível é rápida, mas existe um processo de mistura turbulenta que efetivamente limita a velocidade do processo de combustão – o que pode ser o caso, por exemplo, da mistura entre combustível e oxidante numa chama sem pré-mistura ou da mistura de reagentes a baixa temperatura com os gases aquecidos da combustão numa chama pré-misturada –, a combustão é controlada pelo processo de mistura e as taxas de reação impostas pela cinética química podem ser desprezadas. Essa condição abre espaço para o emprego de alguns modelos de combustão desenvolvidos tendo como base essa disparidade entre as escalas características de tempo do processo químico e de mistura. Um modelo de combustão bastante adotado em tal condição é o modelo *eddy dissipation*, que adota a taxa de produção de uma espécie química  $n$  segundo uma reação  $m$  como o valor mínimo obtido dentre as expressões (3.80) e (3.81):

$$q_{n,m} = j'_{n,m}(M_w)_n A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left( \frac{Y_R}{j'_{R,m}(M_w)_R} \right) \quad (3.80)$$

$$q_{n,m} = j'_{n,m} (M_w)_n AB\rho \frac{\varepsilon}{k} \left( \frac{\sum_P Y_P}{\sum_i j''_{i,m} (M_w)_i} \right) \quad (3.81)$$

Pode-se observar que nesse modelo a taxa de reação é inversamente proporcional ao tempo característico das grandes escalas turbulentas,  $t_t = \frac{k}{\varepsilon}$ , o que está de acordo com a hipótese original do modelo *eddy break-up*. As constantes  $A$  e  $B$  são constantes empíricas do modelo e assumem os seguintes valores:

$$A = 4,0 ; B = 0,5 \quad (3.82)$$

Uma das limitações do modelo é que diferentemente das expressões de cinética química – em que cada reação possui uma taxa específica segundo o modelo de Arrhenius –, todas as reações possuem a mesma taxa turbulenta, o que não permite o emprego de mecanismos químicos de vários passos. Podem ser utilizados com o modelo mecanismos globais de reação de apenas um passo ou com uma espécie intermediária (dois passos). Outra limitação consiste no fato que o processo de combustão se inicia apenas com a presença da turbulência, o que pode significar uma ignição prematura, sobretudo nos casos de chama pré-misturada. Uma alternativa para contornar esse problema consiste no uso combinado do modelo *eddy dissipation* com o modelo de taxa de reação finita. Nesse caso, a taxa de reação é determinada pela menor entre os dois modelos, de forma que as taxas calculadas com base no modelo de Arrhenius podem atuar como um interruptor para determinar o ponto de partida do processo de combustão, a partir do qual o modelo *eddy dissipation* dominaria o processo.

### 3.7.5 O modelo EDC

O modelo EDC (*eddy-dissipation concept*) é uma extensão do modelo *eddy dissipation* apto ao uso, em escoamentos turbulentos de mecanismos de reação detalhados descritos segundo o modelo de Arrhenius. O modelo assume que as reações ocorrem ao interno de pequenas estruturas próprias tomadas como reatores a pressão constante, para os quais as taxas de reações do modelo de Arrhenius são calculadas para um intervalo de tempo também específico do modelo.

### 3.8 - MECANISMOS DE FORMAÇÃO DE $NO_x$

A formação dos óxidos de nitrogênio tem sido objeto de detalhados estudos ao longo de vários anos em função das suas reconhecidas características poluentes, associadas ao processo fotoquímico que envolve névoas de poluição, formação de chuvas ácidas, degradação da camada de ozônio, além de suas características tóxicas. Por tais motivos, a emissão desse poluente na atmosférica é alvo de progressivas restrições por meio de legislações cada vez mais rigorosas e impulsionadoras do desenvolvimento de tecnologias mais comprometidas com o meio ambiente, uma vez que é comum a concessão de algum benefício a instalações e equipamentos que reconhecidamente operem com menor nível de emissão de poluentes.

A categoria dos óxidos de nitrogênio, denominados genericamente  $NO_x$ , inclui o monóxido de nitrogênio ou óxido nítrico,  $NO$ , e o dióxido de nitrogênio,  $NO_2$ , um gás bastante tóxico, capaz de provocar severa irritação ao sistema respiratório. Normalmente a emissão de  $NO$  é bem superior à de  $NO_2$ , mas uma vez lançado na atmosfera, grande parte do  $NO$  pode rapidamente se transformar em  $NO_2$ . Dessa maneira, as emissões de  $NO$  e  $NO_2$  são somadas no cômputo geral dos óxidos de nitrogênio,  $NO_x$ , e não expressas em separado em avaliações usuais.

Para compreensão das tecnologias empregadas na redução e controle das emissões desses óxidos, faz-se necessário descrever os principais mecanismos de reações químicas associados à formação dos óxidos de nitrogênio:  $NO$  térmico,  $NO$  prompt,  $NO$  combustível e mecanismo do óxido nitroso.

#### 3.8.1 $NO$ térmico

Também conhecido por Zeldovich  $NO$ , é produzido pela oxidação do nitrogênio atmosférico ( $N_2$ ) a alta temperatura. Tal situação é tipicamente encontrada em regiões da chama e gases da combustão em condições próximas à estequiometria. Trata-se de um processo endotérmico com elevada energia de ativação (em torno de 319000 kJ/kmol), que se desenvolve a taxa significativa somente a partir de temperaturas de 1850 K. Observa-se a maior formação de  $NO$  com misturas ligeiramente pobres, como consequência da competição pelo oxigênio disponível entre o combustível e o nitrogênio. Apesar de que a maior temperatura está deslocada para condições de mistura ligeiramente

rica, nessas condições o oxigênio disponível é preferencialmente consumido pelo combustível. A formação do *NO* térmico pode ser descrito pelo mecanismo estendido de Zeldovich [9]:



É notório que a formação de *NO* térmico é maior quando se utiliza combustível na forma líquida do que na forma de vapor, para uma mesma temperatura e razão de equivalência; sendo que a diferença entre os dois casos diminui com o aumento da temperatura. Esse efeito se deve ao fato que na queima de combustíveis líquidos há localmente regiões adjacentes às gotas de combustível onde ocorre combustão em condições próximas à condição estequiométrica, ainda que a razão de equivalência global seja consideravelmente pobre. Por esse motivo, quando se dispõe de combustível na forma líquida, é vantajosa a opção de se vaporizar o combustível antes da queima.

Como a produção de *NO* é bastante dependente da temperatura, o aumento na temperatura do ar de admissão implicará aumento significativo da produção de *NO*. Outro fator considerado é a influência devida ao tempo de residência, válida para condições em que a mistura não seja excessivamente pobre. Com razão de equivalência abaixo de 0,5 a formação de *NO* é relativamente invariante com acréscimo do tempo de residência. Para maiores razões de equivalência se observam acréscimos nas emissões de *NO* (figura 3.7).

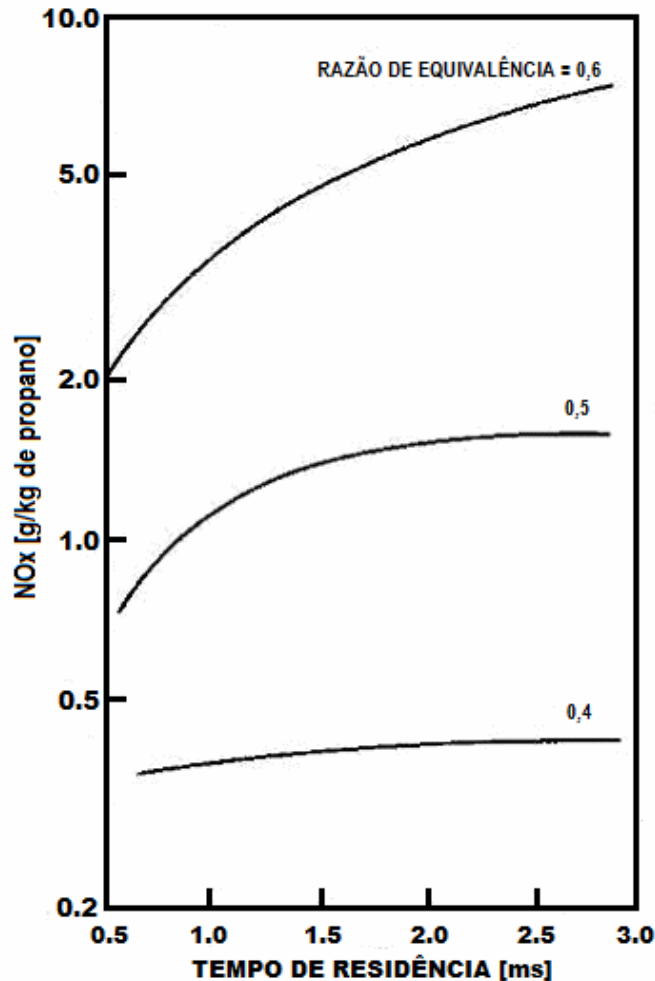


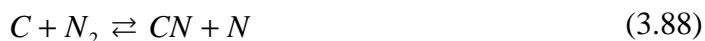
Figura 3.7 - Efeito do tempo de residência na formação de  $\text{NO}_x$  em chamas pré-misturadas. Adaptado de [8].

### 3.8.2 NO prompt

No início dos anos 70 foi descrito primeiramente por observações de Fenimore, que sob certas condições se observa a formação antecipada de  $\text{NO}$  na região de chama, o que não é previsto pelo mecanismo térmico; sendo conhecido também por Fenimore  $\text{NO}$ . Ainda não é completamente compreendido, mas é um mecanismo notadamente importante na combustão envolvendo pré-mistura, e relativamente independente da temperatura. Investigações desse processo sugerem a existência de um caminho para formação do  $\text{NO}$  pela oxidação de  $\text{HCN}$ , iniciado com a produção do radical  $\text{CH}$ . Na seqüência, ocorrem diversas reações envolvendo  $\text{HCN}$ ,  $\text{CN}$  e  $\text{NCO}$  até a formação de  $\text{NO}$ .

Omitindo-se o processo de formação de  $\text{CH}$ , o mecanismo de Fenimore, considerando-se misturas com razão de equivalência até 1,2 pode ser descrito pelas reações

abaixo. Para misturas mais ricas, a cinética química se torna ainda mais complexa e curiosamente ocorre de forma mais lenta, além de que há um ciclo de retorno do  $NO$  a  $HCN$ , o que inibe a formação de  $NO$ .



### 3.8.3 NO combustível

Alguns combustíveis podem conter nitrogênio em sua estrutura molecular, que durante a combustão é rapidamente convertido em  $HCN$  ou  $NH_3$  (amônia). A partir desses compostos o processo segue basicamente os passos atribuídos ao mecanismo de Fenimore apresentado anteriormente. Mas, nesse caso, a produção de  $NO$  com origem no nitrogênio presente no combustível não deve ser confundida com o  $NO$  oriundo do nitrogênio atmosférico, e por isso recebe designação especial. Para combustíveis sem nitrogênio a formação de  $NO$  combustível é nula, assumindo maior importância à medida que se passa da utilização de destilados leves – com pouco nitrogênio – ao uso de destilados pesados, cujo percentual de nitrogênio pode chegar até 2% da massa do combustível.

### 3.8.4 Mecanismo do óxido nitroso

Esse mecanismo é importante em condições de razão de equivalência inferior a 0,8 e baixa temperatura, condições típicas da tecnologia LPP. Basicamente se inicia pela formação de óxido nitroso,  $N_2O$ , a partir do nitrogênio atmosférico. O  $N_2O$  em seguida forma o  $NO$  principalmente pela presença dos radicais  $O$  e  $H$ , mas também pela interação com o monóxido de carbono.



Como referência à importância relativa de cada mecanismo, estudos referentes a um combustor de pré-mistura pobre usando metano como combustível indicam que com  $\phi = 0,8$  e temperaturas por volta de 1900 K, o mecanismo térmico é responsável por cerca de 60% da produção de  $NO_x$ , cabendo 30% ao mecanismo *prompt* e 10% ao mecanismo de óxido nitroso (para o metano não há formação do  $NO$  combustível). Ao se reduzir a temperatura e a razão de equivalência, a contribuição dos mecanismos *prompt* e de óxido nitroso aumenta gradativamente, e a 1500 K e  $\phi \cong 0,6$  o mecanismo térmico é responsável por apenas 5% do total de  $NO_x$  formado, ao passo que o mecanismo *prompt* é responsável por cerca de 65% enquanto os 30% restantes são originados pelo mecanismo do óxido nitroso. Se a razão de equivalência for reduzida ainda mais, o mecanismo do óxido nitroso passa a ser a maior fonte do  $NO_x$  formado [8].

A influência do aumento da pressão também deve ser considerada na formação de  $NO_x$ , uma vez que a busca pelo aumento de eficiência e redução do consumo de combustível leva à operação com razões de pressões cada mais elevadas. Resultados experimentais sugerem que essa dependência está associada ao tipo de combustor utilizado, mas em geral, para  $\phi < 1,0$  ocorre um aumento na formação de  $NO_x$  com o aumento da pressão, sobretudo com o aumento da razão de equivalência. Em condições de  $0,5 < \phi < 0,6$  o aumento da pressão quase não demonstra efeito na formação dos óxidos de nitrogênio.

## 4 O COMBUSTOR DLN-LPP E SEU MODELO COMPUTACIONAL

### 4.1 - O COMBUSTOR DLN-LPP

Nas atividades de pesquisa e desenvolvimento de uma microturbina no Laboratório de Energia e Ambiente, foi projetada uma câmara de combustão baseada no combustor DLN-1 da *General Electric*. Esse é um combustor *Dry Low NO<sub>x</sub>* que aplica o conceito de combustão em duas etapas para garantir a operação em toda faixa de níveis de carga e queima não só combustíveis gasosos – como gás natural – mas também de combustíveis líquidos. São utilizados seis injetores primários distribuídos radialmente e um injetor-piloto central avançado, além de um venturi e dispositivos geradores de vorticidade do tipo *swirler* com 8 pás e ângulo de 60° para ancoragem da chama (figura 4.1).

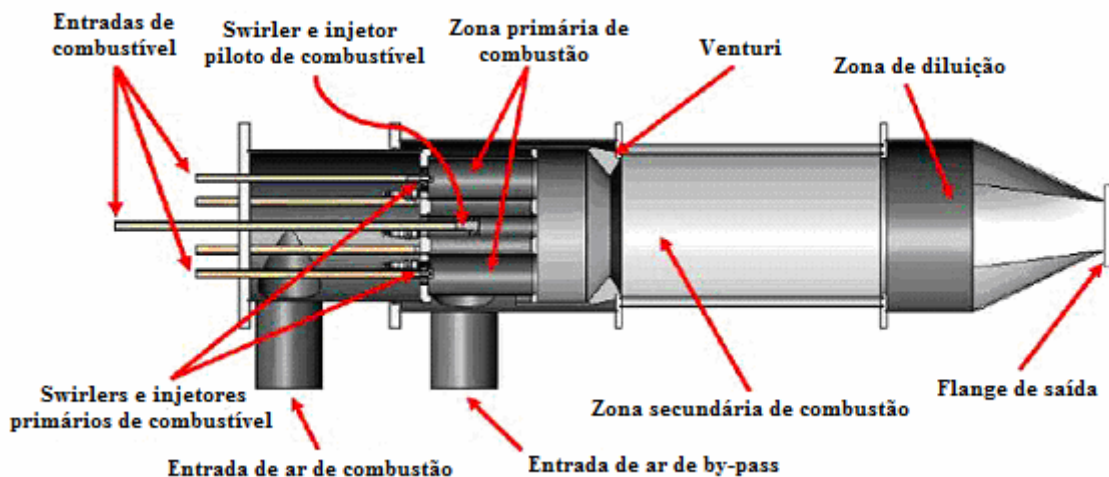


Figura 4.1 - Combustor DLN – LPP do LEA-UnB (adaptado de [1]).

Basicamente existem três zonas principais: zona primária de combustão, zona secundária de combustão e a zona de diluição. A zona primária de combustão, composta por pequenos cilindros, se localiza entre os injetores de combustível e o corpo cilíndrico centrado ao qual se conectam essas entradas independentes, enquanto a zona secundária de combustão se estende desse corpo cilíndrico até a zona de diluição [8]. A zona de diluição se localiza no final do combustor, compreendendo a região de mistura com o ar desviado da região de queima. Esse fluxo de ar que não participa do processo de combustão ingressa em uma entrada própria, a entrada de ar de *by-pass*, seguindo até a



zona de diluição entre a parede das zonas de combustão e a parede mais externa do combustor. O ar de *by-pass* tem por função reduzir a temperatura dos gases na saída do combustor a um nível seguro aos materiais da turbina. O comprimento do corpo cilíndrico a montante do venturi pode ser reduzido em até 60mm por meio de um mecanismo de avanço dos sete cilindros da zona primária de combustão (seis radiais e um central) e dos respectivos injetores. Os detalhes de projeto do combustor são descritos na referência [1].

De acordo com a faixa de carga, a câmara de combustão assume três diferentes modos de operação:

1. O modo primário é utilizado a partir do processo de ignição até um carregamento de cerca de 20%. Nesse modo, o combustível é injetado nos bicos radiais e a chama é essencialmente sem pré-mistura, com pouco excesso de ar;
2. Na faixa de carga compreendida entre 20 e 50%, ou modo *lean-lean*, injeta-se cerca de 30% do combustível no tubo-piloto, e a combustão ocorre nessa área e nos bicos radiais;
3. Para operação acima de 50% de carga, emprega-se a pré-mistura do combustível nos bicos radiais e uma chama no tubo-piloto com cerca de 17% do combustível. Esse modo é denominado modo de pré-mistura. Para chegar a esse modo de operação, parte-se da condição com 50% de carga e a injeção de combustível nos bicos radiais é eliminada, mantendo o fluxo apenas no tubo-piloto. Em tal condição de transição não há mais chama nos bicos radiais, e esses são então alimentados com uma mistura pobre de ar e combustível.

## 4.2 - O MODELO COMPUTACIONAL

O modelo computacional proposto neste trabalho foi desenvolvido exclusivamente para avaliar o comportamento do combustor DLN-LPP instalado no Laboratório de Energia e Ambiente, considerando o modo de operação 3, com pré-mistura de combustível nos injetores radiais e plena carga, de acordo com as condições experimentais relatadas na referência [1].

A partir da geometria do combustor DLN-LPP do Laboratório de Energia e Ambiente foi desenvolvido um modelo simplificado no programa *Gambit 2.4*, constituído basicamente dos 6 queimadores radiais, do *swirler* central, responsável pela rotação do

fluxo de ar da chama piloto, de uma entrada central de combustível no canal piloto, da zona de combustão com o venturi, da entrada de ar de diluição ao final da zona secundária e da zona de diluição ao final do combustor (figura 4.2 e figura 4.3).

O modelo de turbulência empregado no caso isotérmico e também com variação de temperatura foi o modelo  $k-\varepsilon$ , de Jones & Launder [18]. As simulações foram executadas em um computador com processador *Pentium Core 2 Duo*, de 2.1 GHz, 3MB de memória *cache* L2 e 4GB de memória RAM. Para convergência dos resultados foi adotado como critério resíduos inferiores a  $1.10^{-3}$  para a equação da continuidade, componentes da velocidade, energia cinética de turbulência ( $k$ ) e taxa de dissipação da energia cinética turbulenta ( $\varepsilon$ ); e inferior a  $1.10^{-6}$  para a equação da energia.

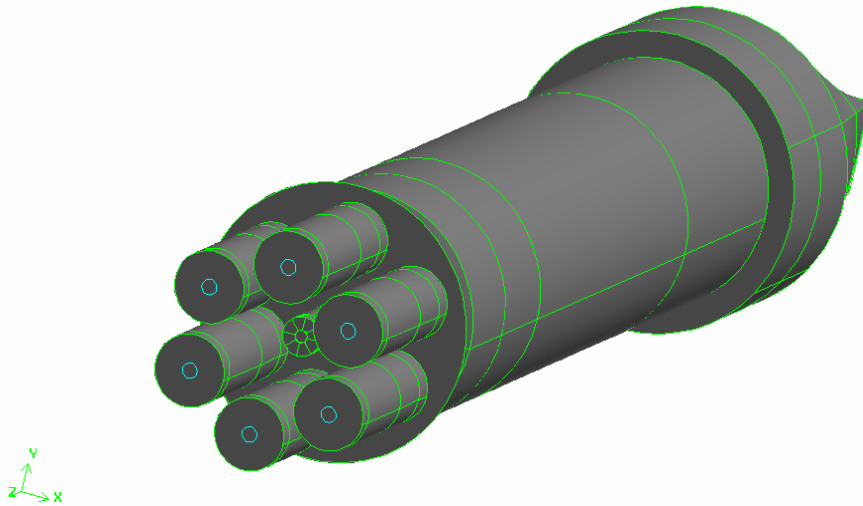


Figura 4.2 - Modelo computacional do combustor DLN-LPP do LEA.

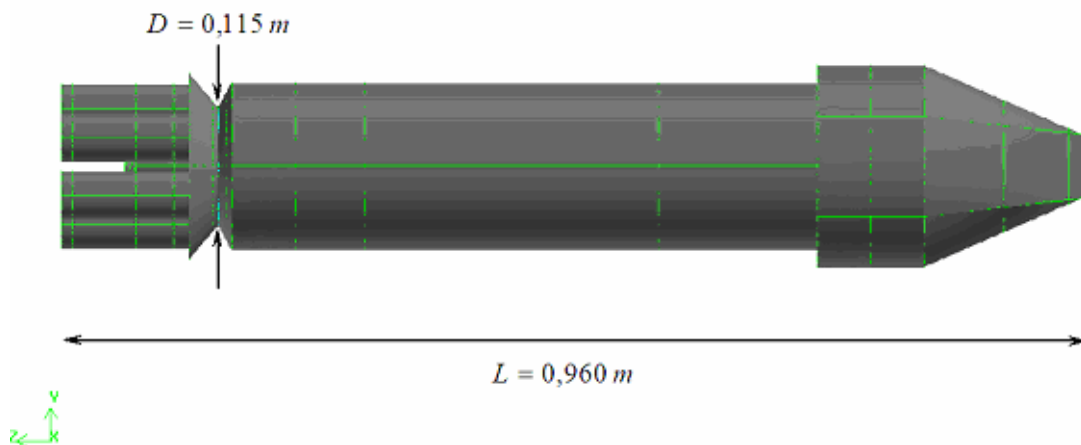


Figura 4.3 - Modelo computacional do combustor DLN-LPP do LEA, vista lateral.

O modelo geométrico pode ser subdividido em diversos volumes, o que possibilita diferenciar características para a geração da malha internamente ao modelo (diferentes tipos de elementos, tamanhos e taxas de crescimento). Essa característica torna mais flexível o processo de refinamento da malha e contribui para reduzir o esforço computacional, uma vez que em função da solução obtida é possível efetuar um refinamento onde são observados os maiores gradientes enquanto que em regiões de menor variação a malha pode ser mantida com maiores volumes, respeitados alguns compromissos numa faixa de transição em termos da variação máxima entre o tamanho dos volumes finitos adjacentes e para que não haja elementos muito distorcidos (com ângulos internos muito pequenos).

Com base nessa geometria para o modelo, foi criada uma malha computacional preliminar, constituída na sua maior parte por elementos hexaédricos (elementos tetraédricos também foram empregados), num total de 330.991 elementos e 304.066 nós. Para geração das malhas também foi utilizado o programa *Gambit* (figura 4.4). Essa malha computacional foi exportada para o programa *Fluent 6.3*, no qual foi realizada uma simulação apenas com fluxo de ar para verificar possíveis inconsistências no processo de modelagem. A partir dessa malha foi realizada a análise quanto ao refinamento, de modo a verificar o tamanho dos elementos adequados à simulação (quando a solução obtida se torna independente da malha utilizada) evitando o emprego de um tempo computacional muito elevado sem ganho significativo nos resultados – no caso de uma malha muito refinada – ou a impossibilidade de captar alguma estrutura do escoamento – no caso de uma malha muito grosseira.

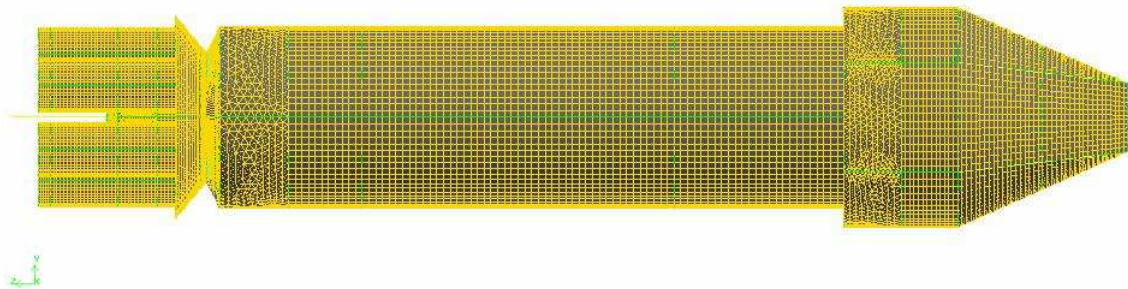


Figura 4.4 - Malha computacional preliminar para o combustor DLN-LPP do LEA.

Numa primeira análise, para observar o escoamento dentro do combustor, uma simulação-teste considerou o fluxo apenas de ar, à temperatura constante de 300 K, com condições de contorno, em termos de vazões, equivalentes a uma condição experimental do modo de operação em pré-mistura (fluxo de ar no tubo piloto: 0,00256 kg/s, fluxo de ar de diluição: 0,11956 kg/s, fluxo de ar pelo *swirler* central: 0,01183 kg/s e fluxo de ar nas entradas radiais: 0,07184 kg/s).

Os resultados obtidos para essa simulação são apresentados na figura 4.5 até a figura 4.8, quanto ao campo de velocidades. Os vetores são coloridos de acordo com o valor da componente axial, na figura 4.5 até a figura 4.7, e são tomados como planos principais os três planos centrais dos combustores radiais ( $x=0$ ,  $y=\sqrt{3}/3x$  e  $y=-\sqrt{3}/3x$ ) e o plano  $y=0$ . Na figura 4.8, que considera somente o módulo da velocidade, a variação das cores é realizada de acordo com esses valores.

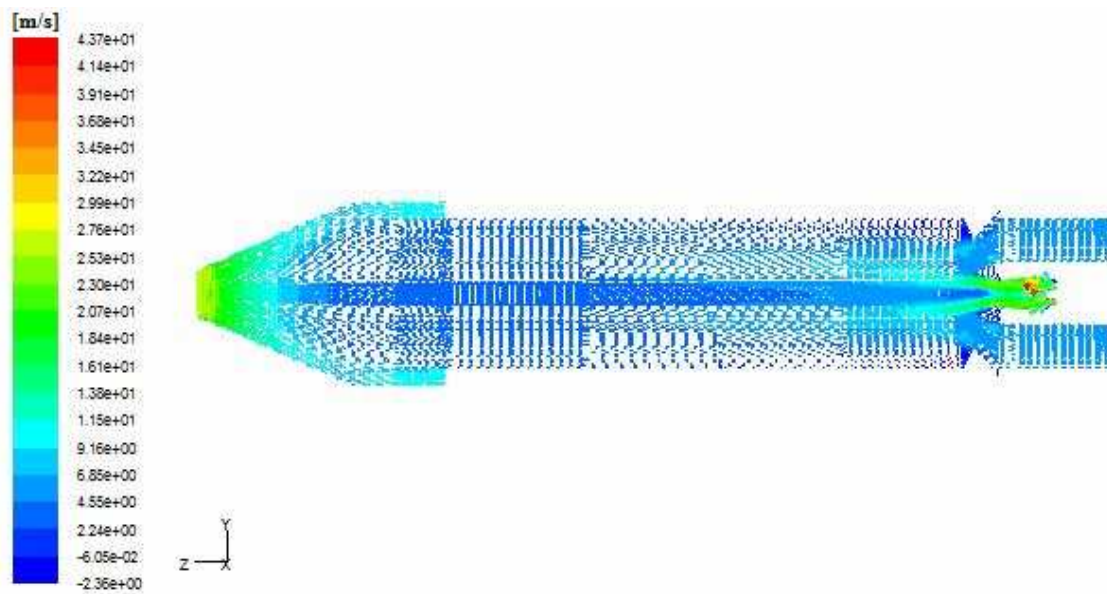


Figura 4.5 – Campo de velocidades no plano  $x=0$ , escoamento isotérmico.

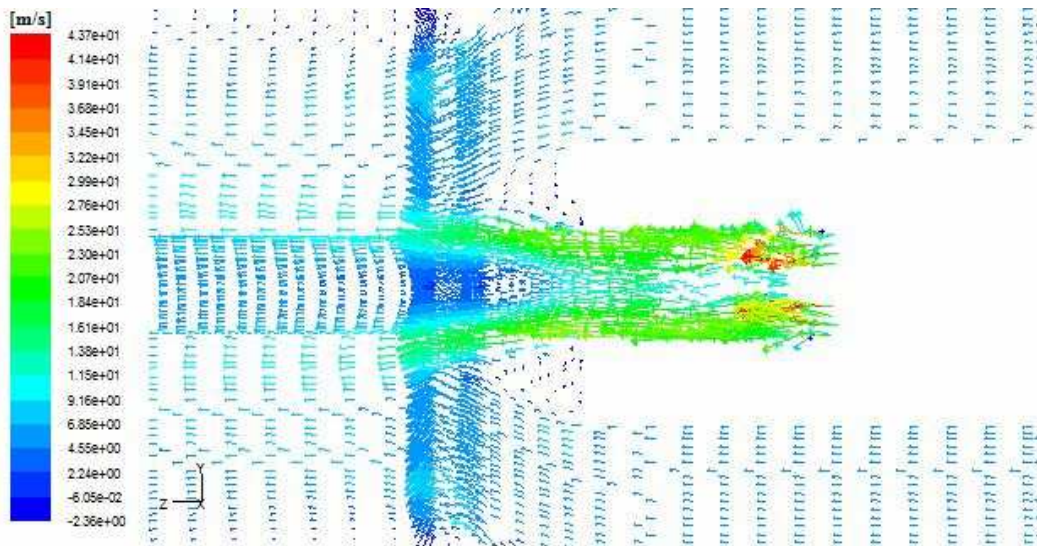


Figura 4.6 – Detalhe do campo de velocidades no plano  $x = 0$ , escoamento isotérmico.

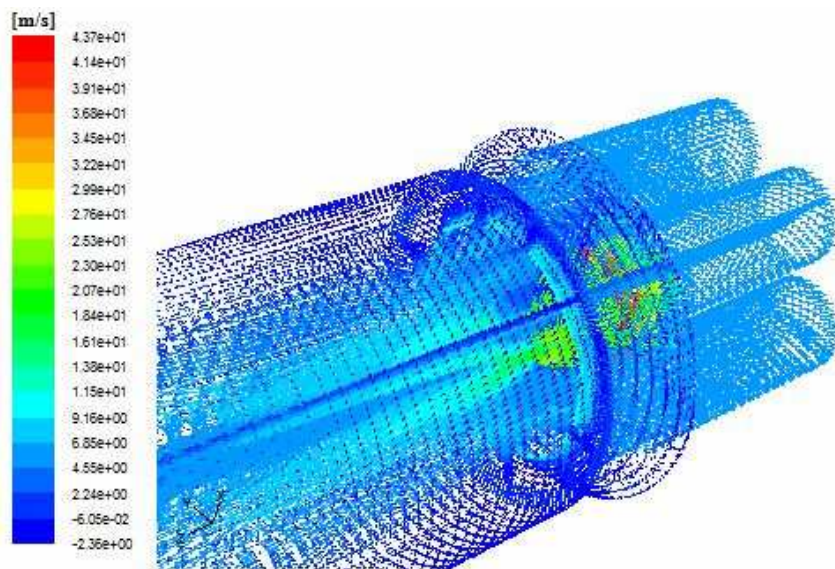


Figura 4.7 – Campo de velocidades no contorno, escoamento isotérmico.

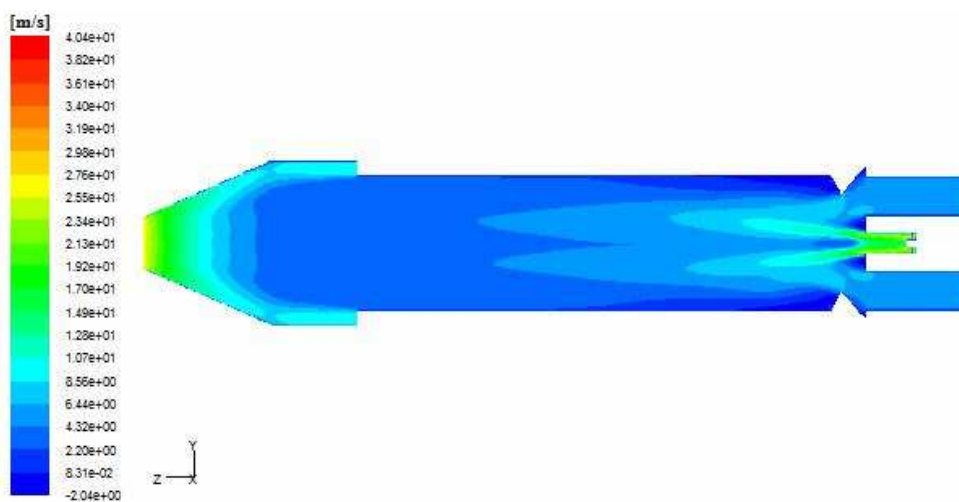


Figura 4.8 – Contornos do módulo da velocidade no plano  $x = 0$ .

Em um segundo momento, foram introduzidas nas condições de contorno variações de temperatura, entre 286 K e 368 K, como forma de se observar os resultados envolvendo a equação de energia. Para a entrada de combustível da zona primária foi introduzido ar a 286 K; na entrada de ar da zona primária, ar a 323,5 K; nas entradas radiais, ar a 303 K; e na entrada do ar de diluição, ar a 368 K. Esses valores estão de acordo com as condições experimentais para as temperaturas do combustível, do ar de combustão e do ar de *by-pass*. A figura 4.9 apresenta o resultado em termos dos contornos de temperatura no plano  $x = 0$  para essas condições de entrada.

Com essas primeiras simulações-teste pode-se perceber que a região do venturi é uma área crítica para a solução do sistema, devido às grandes variações de velocidade e circulação envolvidas, o que revela gradientes elevados. Desta forma, cuidados foram tomados com a malha gerada nessa região, objetivando uma rápida convergência e estabilidade dos resultados.

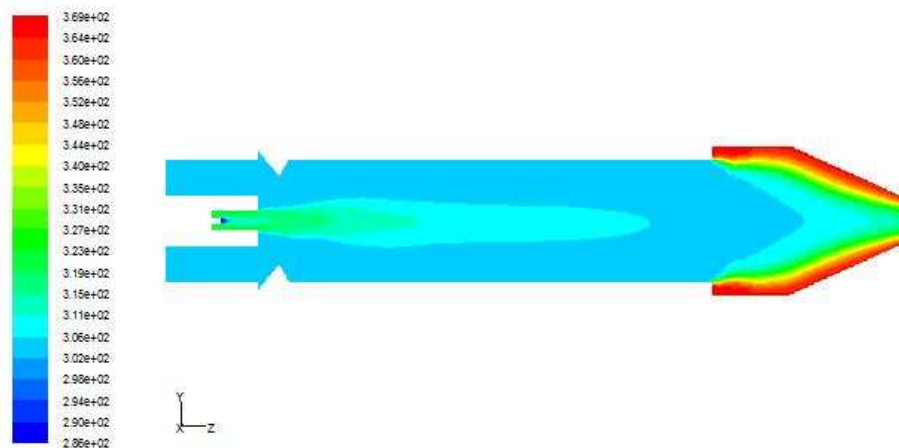


Figura 4.9 – Contornos de temperatura no plano  $x = 0$ .

### 4.3 - MODELO UTILIZADO PARA O GLP

O combustível utilizado até o momento no combustor DLN-LPP é o GLP (gás liquefeito de petróleo). Nessa condição o combustor foi modelado de acordo com os componentes principais do GLP, que são em grande maioria hidrocarbonetos com 3 e 4 átomos de carbono e ligações simples. Na prática, a composição do GLP varia de acordo com a matéria-prima do poço de exploração e especificações técnicas, que variam de país a país. Apesar de que possam ser encontrados componentes mais leves que o propano, como

o etano, e mais pesados que o butano, como o pentano; as especificações adotadas para o GLP no Brasil limitam, na prática, a presença desses componentes a um máximo de 3% em fração volumétrica. A especificação de que a pressão de vapor a 37,8 °C não ultrapasse o valor de 15 kgf/cm<sup>2</sup> (1471 kPa) restringe a presença dos constituintes mais leves, enquanto que os constituintes mais pesados são limitados pela característica de que o ponto de ebulição de 95% do volume do gás, a 760 mmHg (101,3 kPa), não deva exceder a temperatura de 2 °C [20].

Dessa forma, o GLP foi aqui considerado como uma mistura de propano e butano, cuja constituição se encontra respectivamente entre os percentuais de 30/70 e 60/40 considerados em termos volumétricos. De qualquer modo, dentro dessa faixa, a variação máxima do poder calorífico do combustível é de 13,6% em relação ao valor médio referido às especificações brasileiras [20].

Nesse trabalho o GLP foi considerado como uma mistura de propano e butano ao percentual de 50/50 em volume, de forma que são utilizados os mecanismos de reação simplificados disponíveis para esses dois hidrocarbonetos. Os limites extremos de 30/70 e 60/40 são considerados para analisar a influência da variação da composição sobre os resultados obtidos com modelo.

#### **4.4 - ANÁLISE DO REGIME DE CHAMA**

Para a escolha do modelo de combustão a ser empregado nas simulações, foi realizada uma análise do regime de chama esperado no combustor devido aos fenômenos de interação entre combustão e turbulência, de forma a selecionar os modelos mais adequados à situação e para que não se incorra em inconsistências e erros devido à escolha de condições incoerentes com a situação real.

Os parâmetros de referência para o regime de chama são os números de Damköhler e de Karlovitz [22], que foram estimados previamente para as condições do escoamento, com base na velocidade de propagação da chama laminar do propano e a razão de equivalência global, de acordo com o procedimento adotado na referência [9].

Tomando por base o diâmetro do venturi como o diâmetro característico do combustor, as propriedades do ar e a informação de fluxo no combustor, o número de Reynolds no combustor foi estimado em:

$$Re \approx 44200 \quad (4.1)$$

O número de Reynolds associado às grandes escalas turbulentas é cerca de duas ordens de grandeza inferior, considerando que a flutuação de velocidade e a dimensão característica correspondem aproximadamente cada uma a um valor dez vezes menor:

$$Re_l \approx 442 \quad (4.2)$$

A velocidade de propagação da chama laminar do propano, para uma condição de referência pode ser estimada pela equação abaixo:

$$S_{L,ref} [cm/s] = 34,22 - 138,65(\phi - 1,08)^2 \quad (4.3)$$

Tal equação, para uma condição de estequiometria global com  $\phi = 0,8$ , fornece diretamente a seguinte estimativa:

$$S_{L,ref} \approx 23,35 cm/s \quad (4.4)$$

Esse valor, corrigido em função da temperatura, pressão e da estequiometria, segundo as expressões sugeridas na referência [9], leva à estimativa da velocidade de propagação da chama laminar nas condições de interesse,  $S_L$ , onde os expoentes de temperatura,  $\zeta$ , e de pressão,  $\beta$ , para ajuste das curvas experimentais são funções da razão de equivalência da mistura,  $\phi$ . Considerando a temperatura dos reagentes de 350 K e a pressão no combustor de 107,4 kPa, a correção da velocidade em relação às condições referencias de 298 K e 101,3 kPa leva à seguinte velocidade:

$$S_L = S_{L,ref} \left( \frac{T_R}{T_{R,ref}} \right)^\zeta \left( \frac{p}{p_{ref}} \right)^\beta \quad (4.5)$$

$$\zeta = 2,18 - 0,8(\phi - 1) \quad (4.6)$$

$$\beta = -0,16 + 0,22(\phi - 1) \quad (4.7)$$

$$S_L \approx 33,62 cm/s \quad (4.8)$$

Com esse valor é possível estimar a espessura da chama com uma aproximação da difusividade em função da média entre a temperatura dos reagentes (350 K) e dos gases queimados (1850 K), além da pressão no combustor:

$$\delta_L = \frac{2\alpha}{S_L} \quad (4.9)$$

$$\alpha [m^2/s] = \alpha_{ar}(0,5(T_R + T_P), p) = 0,184 \cdot 10^{-3} \quad (4.10)$$

$$\delta_L \approx 1,09 mm \quad (4.11)$$



Obtidas a espessura de chama e a velocidade de propagação, o tempo característico do processo de reação pode ser estimado:

$$t_Q = \frac{\delta_L}{S_L} \approx 3,26 \text{ ms} \quad (4.12)$$

Para obter uma estimativa para o número de Damköhler falta apenas o tempo característico do processo de mistura turbulenta, que é dado em função das grandes escalas turbulentas, simplesmente por:

$$t_T = \frac{l}{u'} \approx 16,3 \text{ ms} \quad (4.13)$$

$$Da = \frac{t_T}{t_Q} \approx 5,0 \quad (4.14)$$

Quanto ao número de Karlovitz, é necessário primeiro obter a dimensão característica das microescalas turbulentas, que pode ser expressa em função da dimensão das grandes escalas e do número de Reynolds a essas associado:

$$\eta = l(\text{Re}_l)^{-\frac{3}{4}} \approx 1,12 \cdot 10^{-4} \text{ m} \quad (4.15)$$

$$Ka = \left( \frac{\delta_L}{\eta} \right)^2 \approx 94 \quad (4.16)$$

Repetindo esse procedimento com valores de razão de equivalência, temperatura e vazão correspondentes a condições de mistura pobre empregadas no modo de pré-mistura, as estimativas dos números de Damköhler e Karlovitz indicam valores superiores a 1, caracterizando um processo reativo limitado pela mistura turbulenta e com espessura da frente de chama entre as dimensões das menores e maiores escalas turbulentas. Esses resultados se constituem numa importante informação, pois delimitam as condições e o regime esperado para o processo combustivo – o regime de elementos de chama, conforme pode ser observado confrontando-se os valores dos parâmetros adimensionais à figura 3.6. Conseqüentemente, os modelos de combustão aplicáveis nas simulações do combustor no modo de pré-mistura devem ser baseados nas condições do regime de elementos de chama, como o modelo *eddy dissipation* e o modelo EDC, tendo sido o primeiro modelo escolhido como ponto de partida.

## 4.5 - O REFINAMENTO DA MALHA

Uma vez definido o modelo para o combustível e o modelo de combustão a ser adotado como ponto de partida (*eddy dissipation*), foram realizadas simulações envolvendo combustão a fim de verificar o refinamento da malha a ser adotada de modo a garantir um bom compromisso entre precisão e tempo computacional. Em tais testes foi utilizado o modelo de turbulência  $k - \epsilon$ .

Partindo da configuração com 330.991 elementos, foram observados os campos de velocidades e temperatura, além dos seus valores máximos e a fração mássica de  $CO_2$  obtida na superfície de saída do combustor.

A primeira dificuldade encontrada após a introdução do processo reativo diz respeito à convergência da solução, que comparativamente à situação sem reação química apresentava um resíduo para a equação da energia tipicamente uma ordem de grandeza superior para a malha de partida. Essa situação já indicava que a utilização de uma malha mais refinada traria melhores resultados, visto que ao aumentar o número de elementos era possível obter um menor resíduo para a equação da energia e a certo ponto atingir o mesmo patamar da condição sem reação química.

Das variáveis analisadas, a temperatura se mostrou menos sensível ao processo de refinamento, com uma variação do valor máximo de cerca de 2,2%. No entanto, no campo de velocidades se observavam sensíveis variações, ao um máximo próximo a 10,8%; situação muito semelhante à obtida com a observação dos valores absolutos da fração mássica de  $CO_2$  na saída do combustor, cuja variação máxima atingiu um valor percentual de 9,8%. A figura 4.10 apresenta os resultados obtidos com o aumento do número de elementos em diversas malhas utilizadas para simulação do combustor com processo reativo.

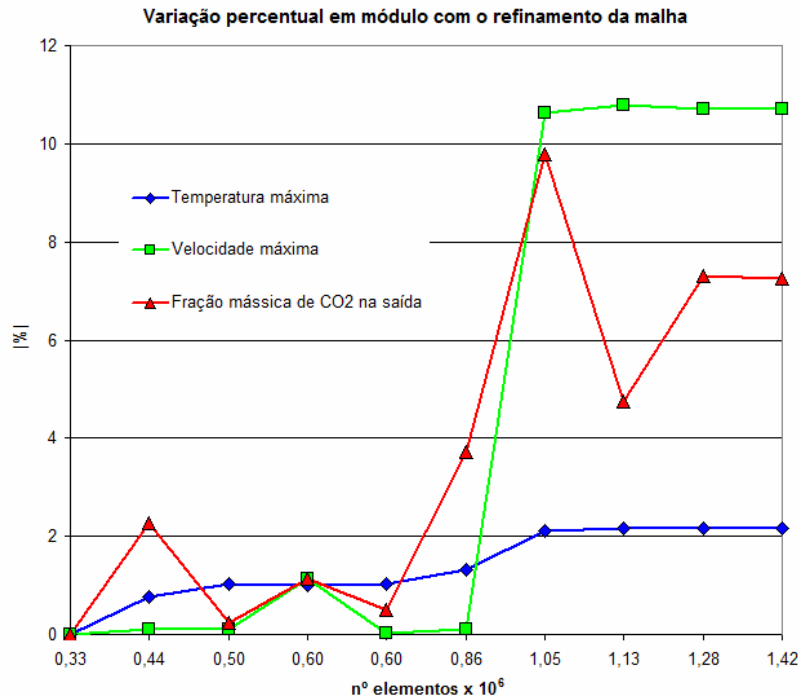


Figura 4.10 – Variações em módulo observadas com o refinamento da malha.

A partir desses resultados, os valores de máxima velocidade e máxima temperatura foram tomados como referência para a escolha da malha, devido ao claro comportamento assintótico dos resultados. Os valores encontrados para a fração mássica de  $CO_2$  na saída do combustor não se mostraram representativos, pois a variação percentual oscilava entre valores maiores e menores; e ao se efetuar a integral na superfície para a emissão total, a variação máxima não superou 2%, mantendo o mesmo patamar com aproximadamente 850.000 elementos. Dessa maneira, a malha adotada para as simulações do combustor corresponderia a um refinamento com pouco mais de 1 milhão de elementos, cujos resultados não apresentaram problemas quanto ao decaimento dos resíduos devido à equação da energia.

No entanto, a elevada quantidade de elementos obtida a partir desse processo de refinamento de todo domínio computacional demandava bastante recurso e tempo computacionais, sendo que o aprimoramento do modelo demandaria ainda um notável emprego de recursos. Dessa forma, com o objetivo de tornar a malha computacional a mais leve possível, os resultados das diferentes malhas com menores números de elementos foram comparados ao resultado da malha com cerca de 1 milhão de elementos em diversas subregiões, e não encontrando variação superior a 5% para as variáveis analisadas, a malha mais grosseira possível era tomada como referência para a

subregião observada. Ao final, conciliando os diversos parâmetros de geração de malha para cada uma das subregiões foi possível obter uma malha com 594.812 elementos, 463.700 nós e com um volume a mais de elementos hexaédricos. Com esse processo, foi possível aplicar uma maior variação da densidade de elementos, com maior concentração nas subregiões com maiores variações nas condições do escoamento e menor densidade em subregiões de menores variações. A malha final é representada na figura 4.11 e figura 4.12 abaixo.

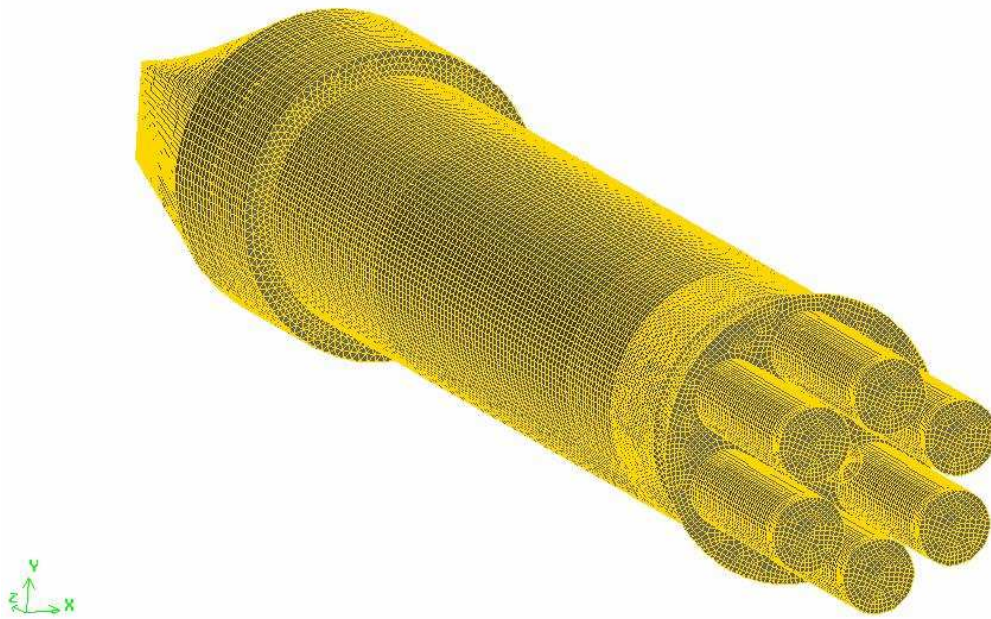


Figura 4.11 - Malha computacional para o combustor DLN-LPP do LEA.

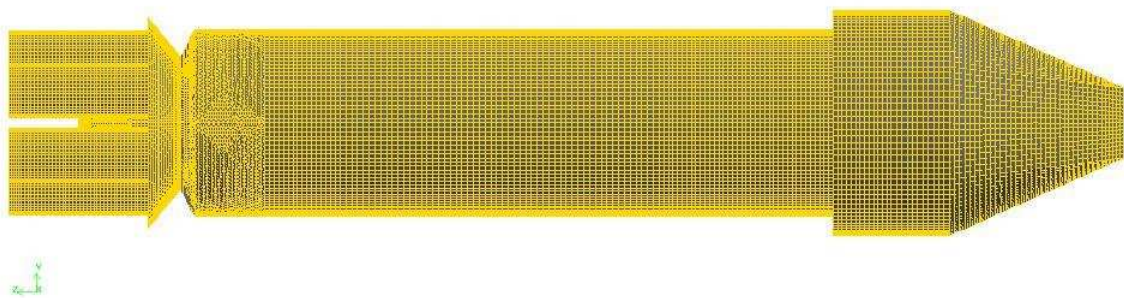


Figura 4.12 - Malha computacional para o combustor DLN-LPP do LEA, vista lateral.

## 5 RESULTADOS OBTIDOS E ANÁLISE

### 5.1 - ANÁLISE DOS MODELOS DE TURBULÊNCIA

A condição experimental tomada como referência para este trabalho corresponde à operação do combustor no modo de pré-mistura com uma razão de equivalência global de 0,48 – considerando o fluxo total de combustível e somente o fluxo de ar que participa do processo de combustão –, segundo as condições relatadas por Ferreira [1] e resumidas na tabela 5.1.

Tabela 5.1 – Condições operativas experimentais utilizadas nas simulações.

	Global	Entrada de ar de diluição	Entrada piloto	Entradas radiais
Vazão de ar [kg/s]	0,200	0,11956	0,011555	0,068885
Vazão de combustível [g/s]	2,5640	0	1,2405	1,3235
Razão de equivalência	0,48	-	1,62	0,29
Temperatura do ar [K]	-	-	323,65	323,65
Pressão [kPa]	-	-	107,42	107,42

Depois de definir o modelo de combustão a ser adotado como ponto de partida, foram realizadas várias simulações com os modelos de turbulência  $k-\varepsilon$ ,  $k-\omega$ ,  $k-\varepsilon$  RNG, SST e do tensor de Reynolds, com as condições de contorno de acordo com a tabela acima, para avaliar as principais diferenças e quais modelos apresentariam resultados mais próximos às condições observadas experimentalmente.

Observando os campos de velocidade e de temperatura, da figura 5.1 até a figura 5.10 – sobretudo sobre o campo de temperatura –, é nítida a influência do modelo de turbulência, pois a cada modelo corresponde uma solução particularmente diferente. Para comparação com os resultados experimentais, são disponíveis as medidas de emissões ( $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO_x$ , e  $O_2$ ) na saída do combustor e a temperatura na saída, na sua região central. Como o modelo ainda estava no início da fase de desenvolvimento, com os primeiros resultados para o processo de combustão, a temperatura de saída foi escolhida

como parâmetro comparativo para seleção dos modelos de turbulência; e não os resultados relativos às emissões, cujas previsões a essa altura seriam menos confiáveis e orientativas.

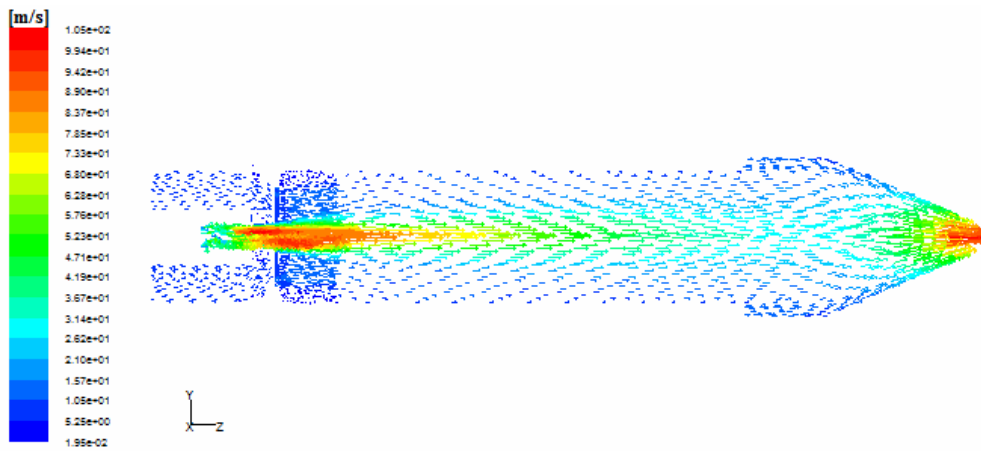


Figura 5.1 – Perfil de velocidades no plano médio do combustor para o modelo de turbulência  $k - \epsilon$ .

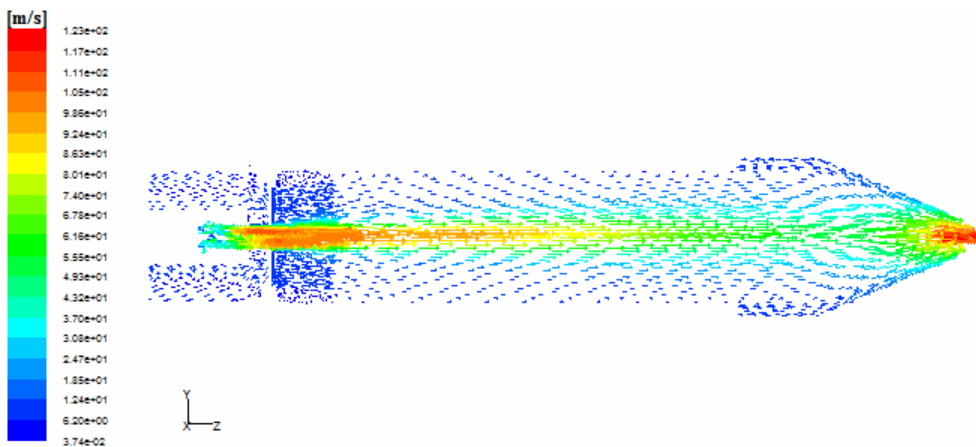


Figura 5.2 – Perfil de velocidades no plano médio do combustor para o modelo de turbulência  $k - \omega$ .

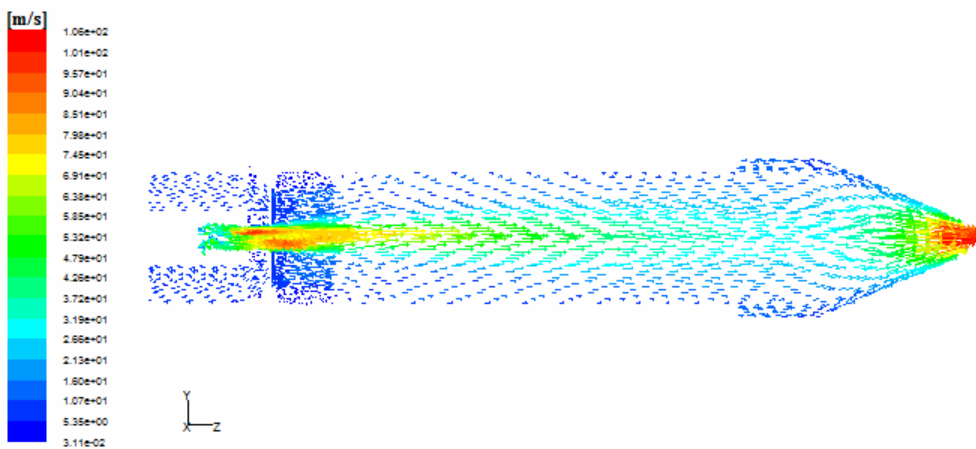


Figura 5.3 – Perfil de velocidades no plano médio do combustor para o modelo de turbulência SST.

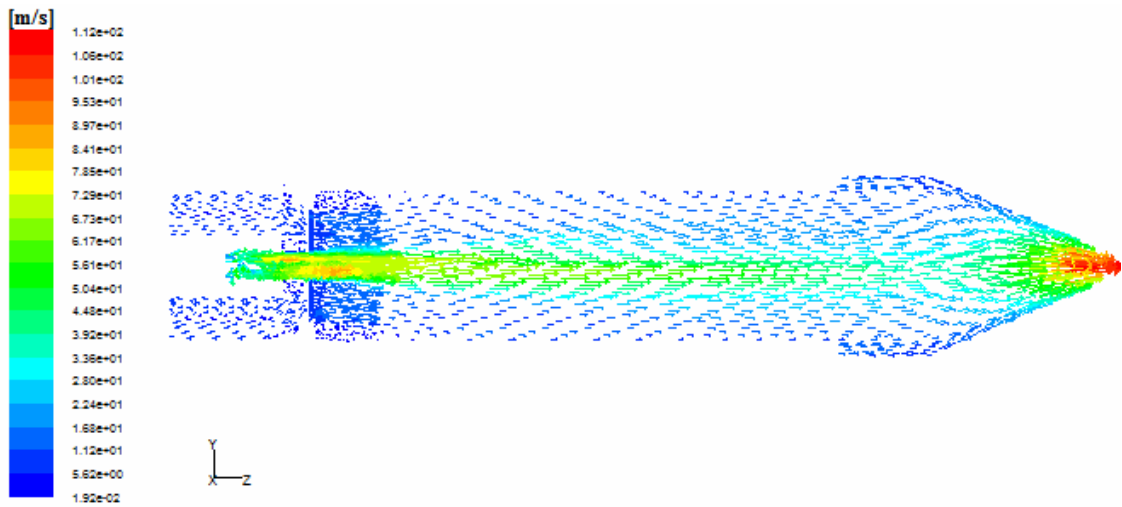


Figura 5.4 – Perfil de velocidades no plano médio do combustor para o modelo de turbulência  $k - \epsilon$  RNG.

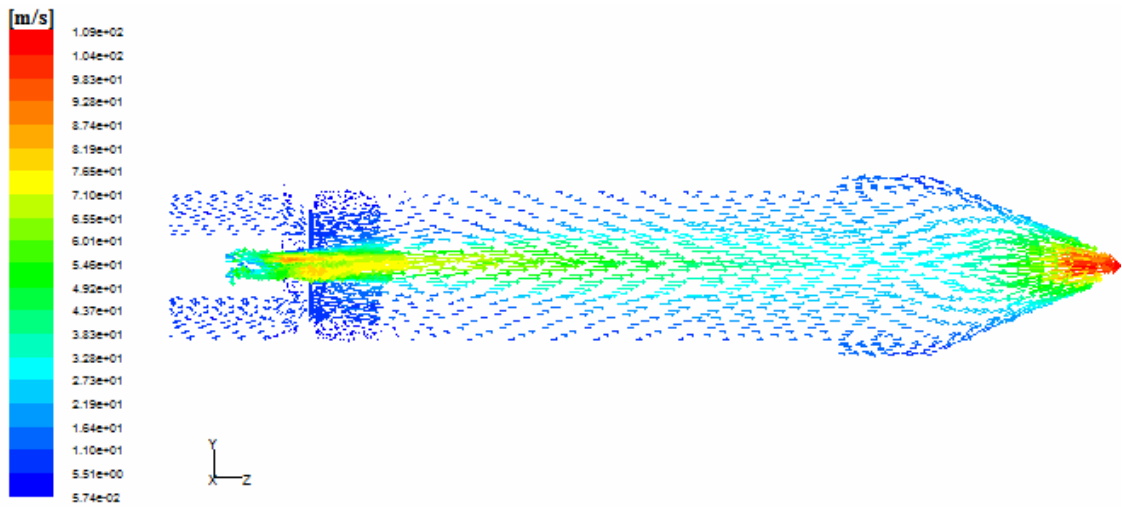


Figura 5.5 – Perfil de velocidades no plano médio do combustor para o modelo de turbulência do Tensor de Reynolds.

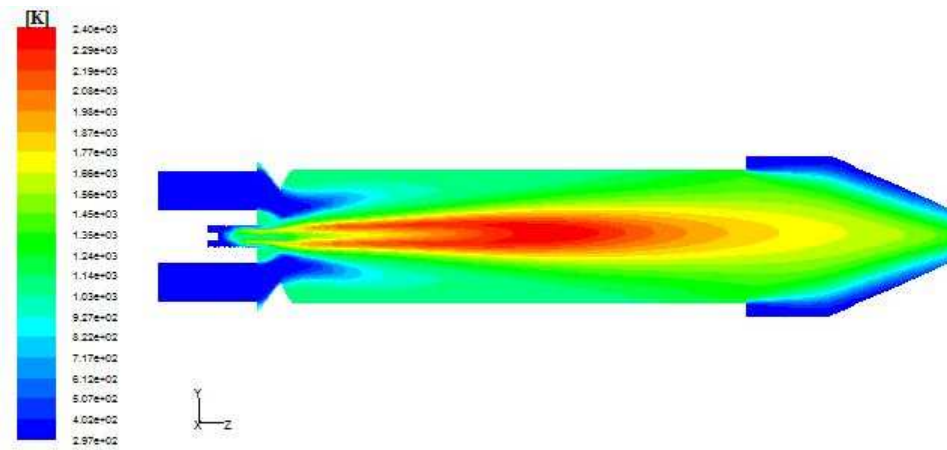


Figura 5.6 – Perfil de temperatura no plano médio do combustor para o modelo de turbulência  $k - \varepsilon$ .

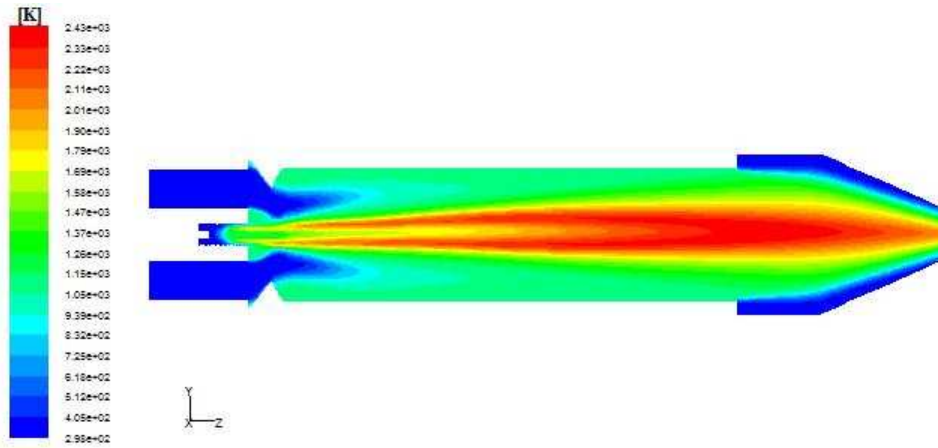


Figura 5.7 – Perfil de temperatura no plano médio do combustor para o modelo de turbulência  $k - \omega$ .

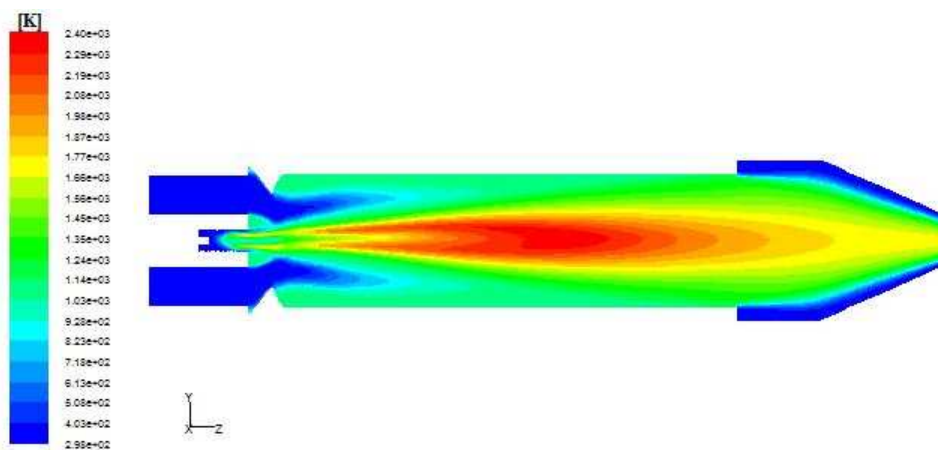


Figura 5.8 – Perfil de temperatura no plano médio do combustor para o modelo de turbulência SST.



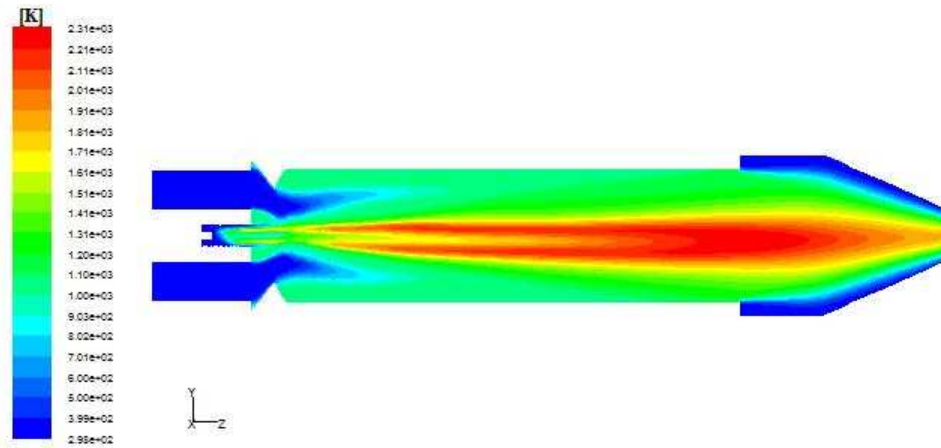


Figura 5.9 – Perfil de temperatura no plano médio do combustor para o modelo de turbulência  $k - \varepsilon$  RNG.

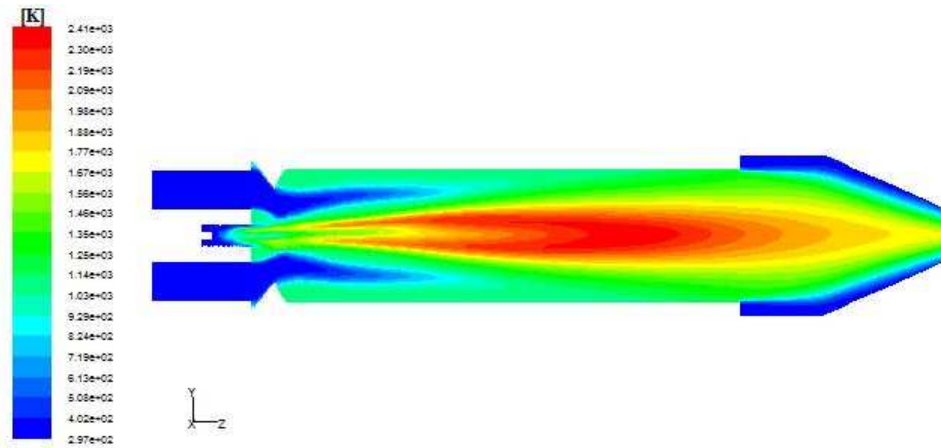


Figura 5.10 – Perfil de temperatura no plano médio do combustor para o modelo de turbulência do Tensor de Reynolds.

Pode-se observar da figura 5.6 até a figura 5.10 que a temperatura máxima obtida com cada modelo é da ordem da temperatura adiabática de chama (o uso de mecanismos reduzidos, com reações irreversíveis e a ausência de espécies intermediárias superestima a temperatura adiabática de chama) e apresenta uma variação contida, na faixa de 2313 a 2433 K, o que indica que em todos os casos existe uma zona com mistura próxima à estequiométrica, mas com significativa variação quanto à extensão da área de máxima temperatura e seu perfil do centro às paredes do combustor, em um percurso radial. Como a razão de equivalência da condição simulada é de 1,62 para a chama-piloto, uma condição próxima à estequiométrica nessa região não é um resultado estranho.

Com os modelos  $k - \omega$  e  $k - \varepsilon$  RNG forma-se uma zona de chama que se estende ao longo de todo comprimento do combustor, atingindo inclusive a parte central da zona de diluição. Tal condição, de certo, não corresponde ao funcionamento esperado para

o combustor LPP sob operação no modo de pré-mistura, e sugere o emprego de outros modelos. Os modelos  $k-\varepsilon$  e SST apresentaram resultados próximos, indicando a predominância da aplicação das condições relativas ao modelo  $k-\varepsilon$  sobre o  $k-\omega$  no modelo SST; com alguma diferença no campo de velocidade no tubo central do combustor e na distribuição de temperatura na zona de diluição. O modelo de turbulência de ordem superior, representado pelo tensor de Reynolds, apresentou uma solução intermediária entre as condições obtidas com os pares  $k-\varepsilon$ /SST e  $k-\omega/k-\varepsilon$  RNG, mas com temperaturas na saída ainda bastante elevadas e a um custo computacional consideravelmente superior.

A figura 5.11 apresenta o perfil de temperatura obtido para cada modelo analisado na saída do combustor ao longo da linha pertencente ao plano central  $x=0$ . O modelo  $k-\varepsilon$  apresenta o perfil de temperatura na saída mais homogêneo, com o menor valor máximo, devido a um processo de mistura na zona de diluição mais acentuado. Essa característica, associada a uma região de chama menos extensa ao longo do combustor e ao baixo custo computacional, já indicava a seleção do modelo  $k-\varepsilon$  como uma boa alternativa. Além disso, a diferença encontrada entre os valores obtidos e os valores experimentais (na faixa de 930 a 1180 K) pesou a favor da escolha do modelo  $k-\varepsilon$ , cujo resultado se mostrou menos distante do valor medido – ainda que, pelos resultados das simulações, a dimensão do sensor e o seu posicionamento são fatores capazes de promover grande variação no valor medido. Por fim, como esses resultados preliminares indicavam que seriam necessárias muitas alterações para ajuste do modelo de simulação do combustor, de modo a obter uma operação mais próxima às condições esperadas para um combustor LPP (como por exemplo, temperatura bem mais baixa) e previsões também mais próximas aos resultados experimentais, as conhecidas características de robustez e estabilidade do modelo  $k-\varepsilon$  foram fundamentais para sua escolha.

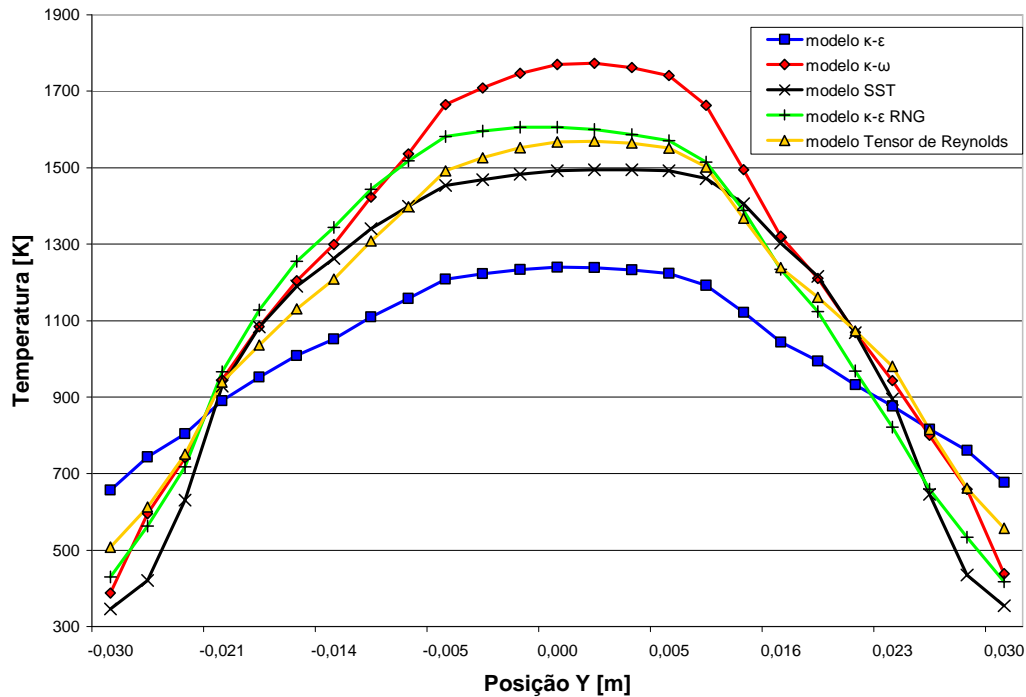


Figura 5.11 – Perfil de temperatura na saída do combustor para diferentes modelos de turbulência.

A disponibilidade de informações experimentais a respeito dos detalhes das condições do escoamento dentro do combustor poderia conduzir a uma revisão do modelo com a escolha de outro modelo de turbulência, sobretudo entre o modelo SST e o  $k-\varepsilon$  quanto ao escoamento próximo às paredes. Mas devido ao amplo campo de condições de escoamento, incluindo processos de combustão, em que o modelo  $k-\varepsilon$  já foi utilizado e validado com sucesso, essa ausência de detalhes conduziu ao uso nessa investigação inicial, do modelo mais difundido, robusto, estável e de menor esforço computacional.

## 5.2 - EDDY DISSIPATION MODEL

Depois de selecionado o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$ , as simulações do combustor LPP com o modelo de combustão *eddy dissipation* foram aprofundadas de modo a verificar o nível de emissões esperado para o  $CO$  e principalmente para os óxidos de nitrogênio,  $NO_x$ . Tal consideração se deve ao fato que a condição *eddy dissipation* não é propícia para mecanismos de reação a passos e, portanto, não descreve bem a formação do monóxido de carbono,  $CO$ . Antes de prosseguir com a análise dos resultados de

emissões, é oportuno um comentário sobre o modelo para predição de  $NO_x$  disponível no programa utilizado.

O modelo presente no programa *Fluent* para a formação de  $NO_x$  não adota a solução do escoamento com as reações químicas principais envolvendo a formação dos óxidos de nitrogênio e os compostos intermediários. Esse modo, que se traduz em um grande aumento da complexidade do sistema, é substituído pelo emprego de um modelo de predição realizado em pós-processamento. Ou seja, depois de resolvido o escoamento, em base aos campos de temperatura, densidade e frações mássicas das espécies principais, o campo com as frações mássicas dos óxidos de nitrogênio é calculado por meio da solução de equações de transporte para o  $NO$  e outras espécies, se envolvidas ( $HCN$ ,  $NH_3$  e  $N_2O$ ) juntamente com o uso de aproximações de equilíbrio químico para os radicais. No programa *Fluent*, é possível habilitar os seguintes mecanismos:  $NO$  térmico,  $NO$  *prompt*,  $NO$  combustível e óxido nitroso. Computacionalmente isso representa uma grande vantagem pois essa separação reduz consideravelmente a dimensão do sistema e conseqüentemente o tempo de cálculo, mas em contrapartida exige uma precisa solução do escoamento em termos dos campos de temperatura, densidade e frações das espécies químicas para fornecer bons resultados. Com relação à temperatura, a referência [23] esclarece que acima de 2200 K a taxa de produção do  $NO$  térmico dobra a cada 90 K. Essa separação do problema é possível apenas porque os óxidos de nitrogênio estão presentes em baixa concentração e têm pouco impacto sobre os campos de densidade, temperatura e outras espécies químicas. A interação com os fenômenos turbulentos nos modelos de formação de poluentes pode ser feita levando-se em consideração as flutuações de temperatura e composição química do escoamento por meio de funções de densidade de probabilidade que são utilizadas na obtenção dos valores médios.

Como resultados obtidos das simulações, o campo de temperatura no plano médio é apresentado na figura 5.12, semelhante ao apresentado quando realizados os testes com os modelos de turbulência, situação em que a zona primária do combustor foi mantida no comprimento mínimo (passível de encurtamento mediante movimentação dos cilindros radiais, central e respectivos injetores). Na figura 5.13 pode-se ver a distribuição de  $NO_x$  em ppm (partes por milhão). A tabela 5.2 apresenta os resultados obtidos em termos de emissões na saída do combustor, comparados aos resultados experimentais obtidos por Ferreira [1].

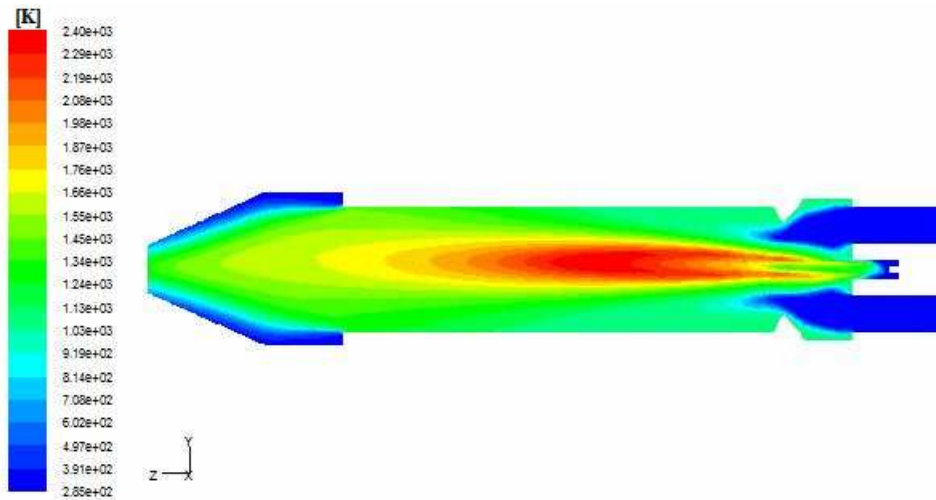


Figura 5.12 – Campo de temperatura obtido com o modelo *eddy dissipation*.

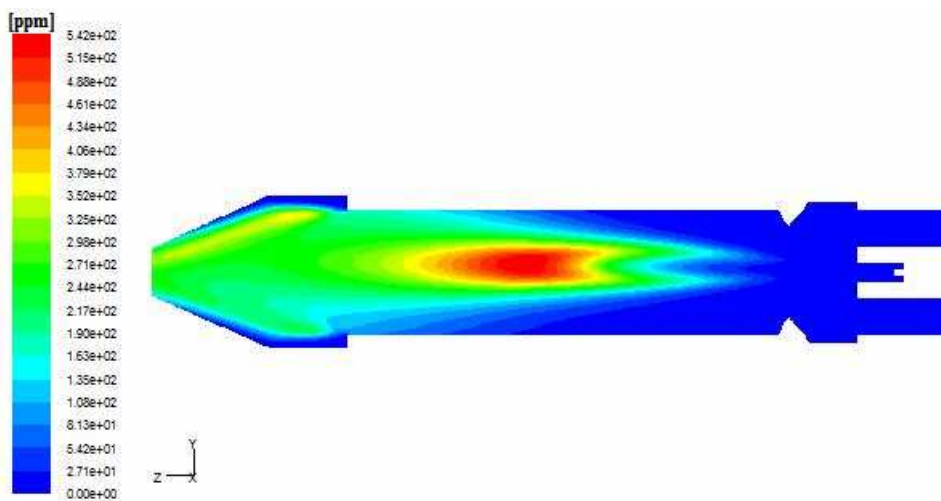


Figura 5.13 – Concentração de  $NO_x$  em ppm presente no plano médio do combustor com o modelo *eddy dissipation*.

A figura 5.14 apresenta o resultado para a presença de  $CO$  ao longo do plano médio do combustor quantificada em ppm, onde se pode visualizar como a velocidade de oxidação do  $CO$  a  $CO_2$  é superestimada com o modelo *eddy dissipation*, por não aplicar taxas de reações diferentes para os processos de produção e consumo de  $CO$ . Devido a esse fato, o monóxido de carbono tão logo é formado já vem a ser consumido numa zona de pequena dimensão dentro do combustor. Esse processo contribui para o aumento da temperatura máxima obtida no combustor, uma vez que a oxidação do monóxido de carbono é o processo responsável pela maior parte da energia liberada na combustão de hidrocarbonetos, e ocorre com o modelo *eddy dissipation* de forma bastante concentrada.

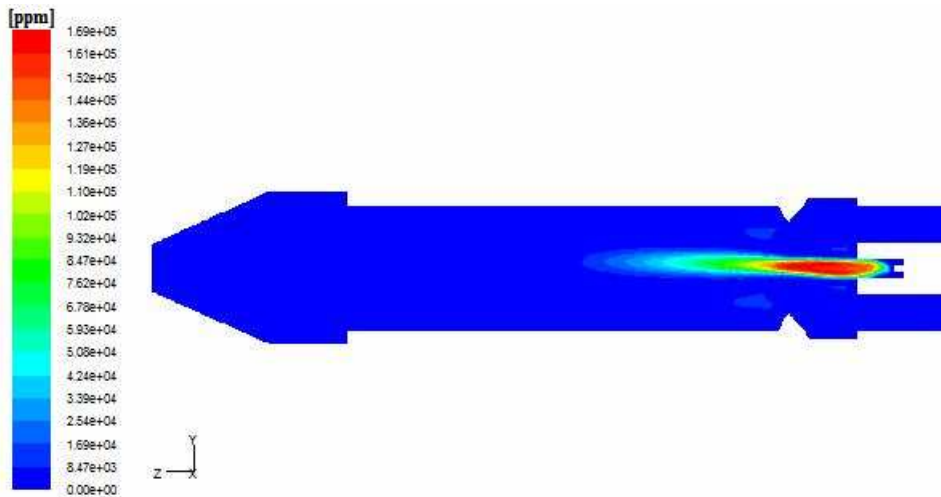


Figura 5.14 – Concentração de  $CO$  em ppm presente no plano médio do combustor com o modelo *eddy dissipation*.

Com base nessas limitações, os resultados confirmam uma condição já esperada com o modelo: emissão de  $NO_x$  superestimada pela elevada temperatura; acompanhada pelas emissão de  $CO$  e de  $CO_2$ , acima dos valores obtidos experimentalmente em virtude da taxa de oxidação excessiva do monóxido de carbono.

Tabela 5.2 – Emissões obtidas para o combustor com o modelo *eddy dissipation*.

Condição	$CO$ [ppm] <sup>i</sup>	$CO_2$ [%]	$HC$ [ppm]	$NO_x$ [ppm]	$O_2$ [%]
Modelo computacional	0	2,47	0	205	16,6
Resultado experimental [1]	435	1,35	- <sup>ii</sup>	17	18,6

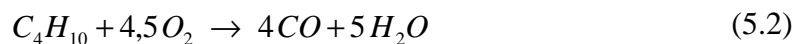
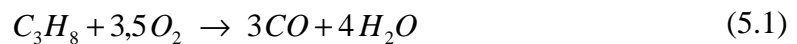
Além das limitações já mencionadas, outra forte limitação do modelo se refere ao início do processo reativo, que se principia já na entrada do combustor somente com o contato entre o combustível e o ar. Tal condição se afasta da realidade e, em busca de um aprimoramento do modelo, um modelo de combustão capaz de limitar a taxa de reação a baixa temperatura deveria ser adotado.

<sup>i</sup> Emissões em ppm sempre em base seca.

<sup>ii</sup> Resultado não disponível.

### 5.3 - FINITE RATE/EDDY DISSIPATION MODEL

As primeiras simulações com o modelo misto de taxa de reação finita e determinada pelo processo de mistura turbulenta segundo os mecanismos de reação para propano e butano originais do programa *Fluent* não forneceram bons resultados, pois o nível de convergência não era satisfatório, com uma grande oscilação, em função que – durante o processo iterativo –, em muitas regiões, em um instante uma condição era utilizada e alternadamente, no instante seguinte, se aplicava a outra condição do modelo. Tal fato talvez tenha tido origem no uso concomitante de um mecanismo global para o butano e um mecanismo de dois passos para o propano, uma vez que no programa *Fluent*, na versão 6.3 utilizada, apenas o mecanismo global era disponível na biblioteca-padrão para o butano. Devido a esse problema, os mecanismos de reação para o propano e butano foram alterados, sendo inicialmente utilizados os mecanismos de dois passos propostos por Westbrook e Dryer [5]:



Com esse modelo, foram superados os problemas de convergência, alcançando-se um resultado, mas observando o andamento do campo de temperatura, o processo reativo se iniciava muito tardiamente, praticamente na metade da zona secundária de combustão. Uma maneira de contornar esse problema consistiu em reduzir a energia de ativação do passo de oxidação do combustível – reações (5.1) e (5.2) –, o que foi efetuado por sucessivas tentativas até que uma posição coerente para a chama-piloto na zona primária de combustão fosse obtida (figura 5.15).

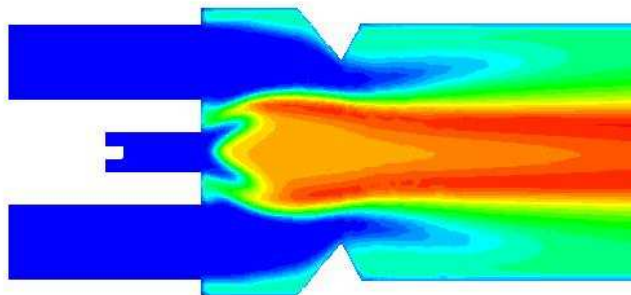


Figura 5.15 – Posição da região de chama com o mecanismo de oxidação do propano e butano modificados, observando-se o campo de temperatura.

As modificações na reações (5.1) e (5.2) interferiram também no campo das frações mássicas de  $CO$ , o tamanho da região onde ocorre a produção e consumo dessa espécie foi ampliado, reduzindo-se, um pouco, o aspecto altamente concentrado do processo de oxidação do monóxido de carbono no modelo *eddy dissipation* (figura 5.16 em comparação à figura 5.14). Porém, a concentração de  $CO$  na saída do combustor se situava a um nível muito baixo, da ordem de 6 ppm, e por esse motivo, foi cogitada a possibilidade de alterar também a energia de ativação do passo referente ao surgimento de  $CO_2$ . Aumentando-se a energia de ativação da reação (5.3), a concentração de  $CO$  aumenta na parte inicial da zona de combustão, mas à medida que a taxa de reação passa a ser controlada pelo processo de mistura turbulenta, a diferença se reduz e a concentração de  $CO$  tende ao mesmo valor original. A figura 5.17 oferece uma comparação entre os resultados da quantidade de  $CO$  presente em planos ao longo do combustor (partindo-se do final dos combustores radiais) ao variar o valor da energia de ativação do passo reativo (5.3), deixando evidente a redução da velocidade do processo com o aumento da energia de ativação – na fase limitada pela cinética química – e a parte final substancialmente inalterada.

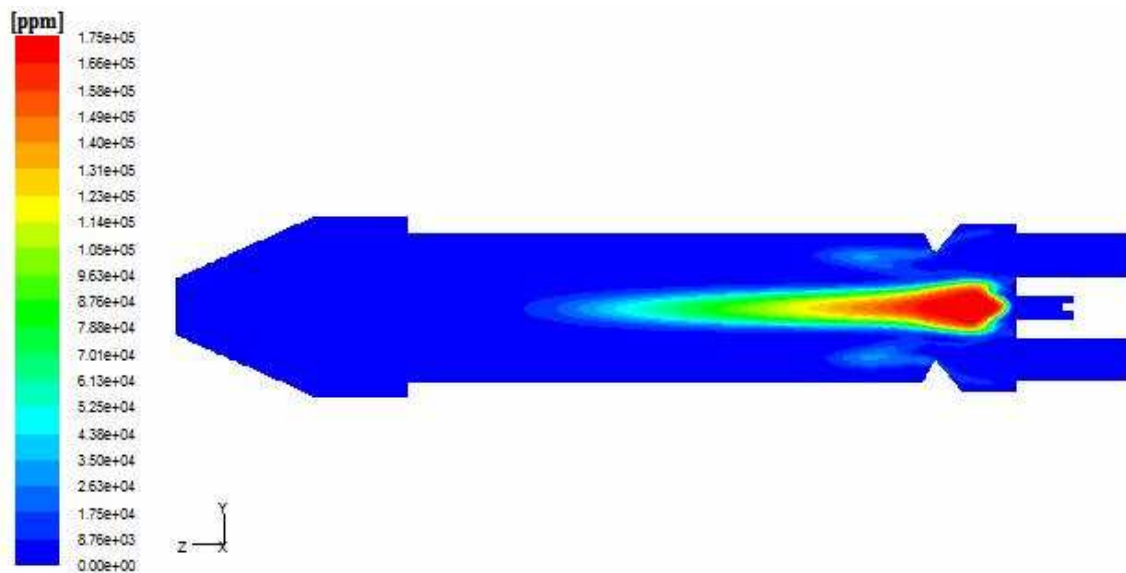


Figura 5.16 – Concentração de  $CO$  em ppm presente no plano médio do combustor com a energia de ativação dos passos (5.1) e (5.2) modificada.



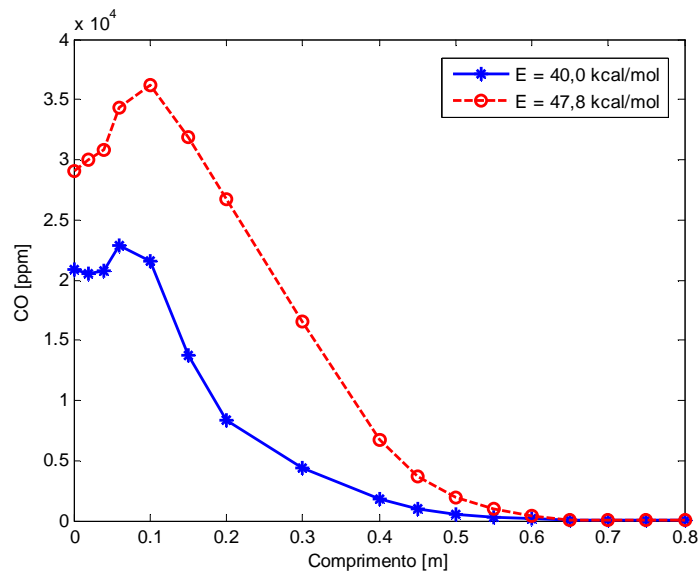


Figura 5.17 – Quantidade de  $CO$  em planos verticais ao longo do combustor.

Como resultado, a energia de ativação da oxidação do propano e butano foi reduzida de 30,0 kcal/mol a 21,7 kcal/mol, enquanto a energia de ativação da oxidação do monóxido de carbono foi mantida em 40,0 kcal/mol, resultando no mecanismo de reação descrito segundo o modelo de Arrhenius pelas propriedades indicadas na tabela 5.3:

Tabela 5.3 – Propriedades do mecanismo de reação empregado.

Reação	Fator Pré-exponencial, $a$	Expoente da Temperatura, $n$	Energia de Ativação, $E$	Espécies e Ordens de Dependência
(5.1)	$1,0 \cdot 10^{12}$ [ $s^{-1} mol^{-0,75} cm^{2,25}$ ]	0	21,74 [kcal/mol]*	$C_3H_8$ – 0,10 $O_2$ – 1,65
(5.2)	$8,8 \cdot 10^{11}$ [ $s^{-1} mol^{-0,75} cm^{2,25}$ ]	0	21,74 [kcal/mol]*	$C_4H_{10}$ – 0,15
(5.3)	$1,0 \cdot 10^{14,6}$ [ $s^{-1} mol^{-0,75} cm^{2,25}$ ]	0	40,00 [kcal/mol]	$CO$ – 1,00 $O_2$ – 0,25 $H_2O$ – 0,50

Realizadas essas modificações, os resultados obtidos com o modelo são apresentados na figura 5.18 e figura 5.19, respectivamente quanto ao campo de temperatura e concentração de  $NO_x$ . Pode-se observar que houve uma ligeira diminuição

\* Únicos parâmetros alterados em relação ao mecanismo original da referência [5].

da temperatura máxima no combustor (cerca de 30 K), com o aumento da área de oxidação do  $CO$  a  $CO_2$  – além do deslocamento à frente da região de chama –, comparativamente às condições observadas com o modelo *eddy dissipation*. Em relação aos óxidos de nitrogênio, a concentração máxima se elevou, mas a zona de formação se torna mais central, principalmente na zona de diluição, reduzindo a emissão na saída a cerca de 78% do valor obtido com o modelo *eddy dissipation*.

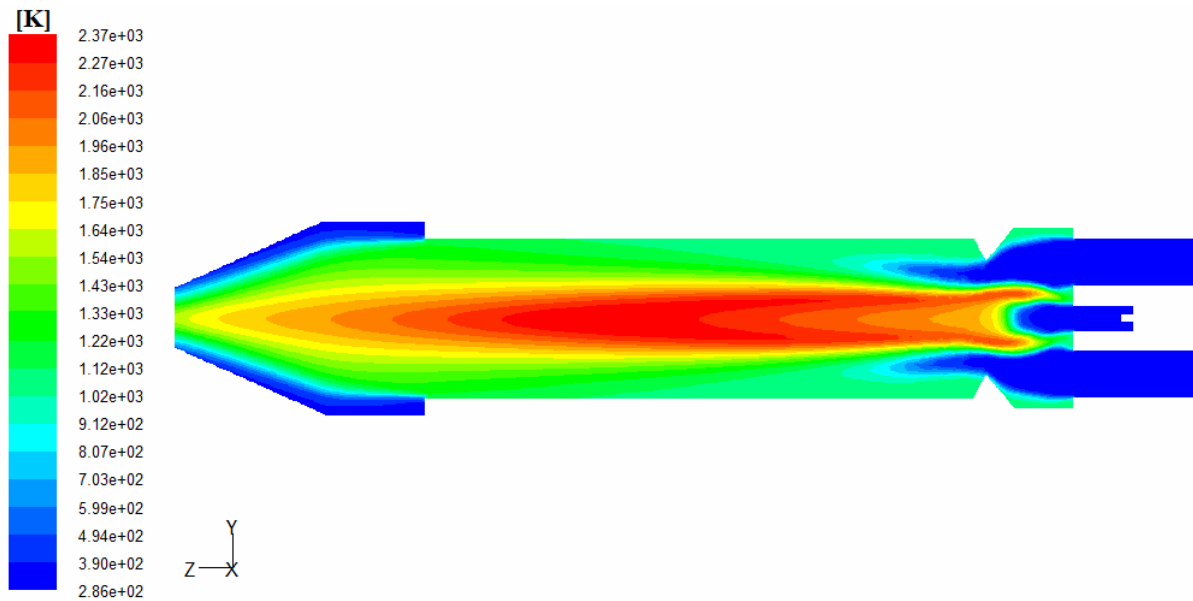


Figura 5.18 – Campo de temperatura obtido com o modelo *finite rate/eddy dissipation*.

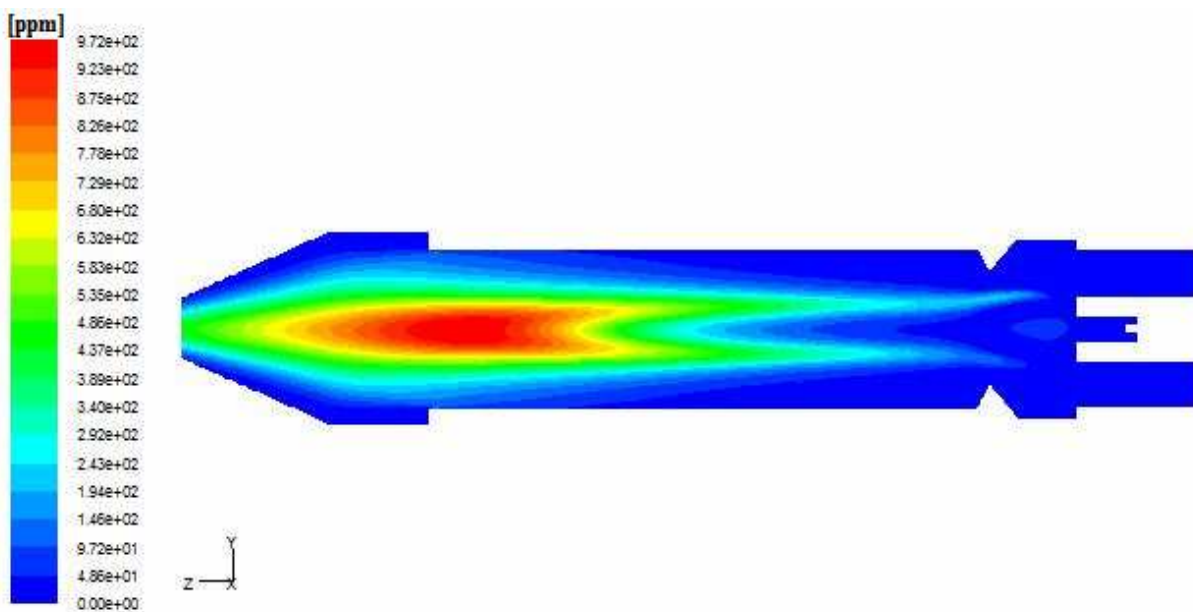


Figura 5.19 – Concentração de  $NO_x$  em ppm presente no plano médio do combustor com o modelo *finite rate/eddy dissipation*.

Os resultados das emissões se encontram resumidos na tabela 5.4, comparativamente aos correspondentes resultados experimentais.

Tabela 5.4 – Emissões obtidas para o combustor com o modelo *finite rate/eddy dissipation*.

Condição	CO [ppm]	CO <sub>2</sub> [%]	HC [ppm]	NO <sub>x</sub> [ppm]	O <sub>2</sub> [%]
Modelo computacional	5,8	2,47	0,1	159	16,6
Resultado experimental [1]	435	1,35	-	17	18,6

Os níveis de emissões de CO<sub>2</sub> e O<sub>2</sub> foram mantidos em relação à condição anterior, ao passo que uma tímida presença de CO e hidrocarbonetos não-queimados na saída do combustor indicaram uma evolução do modelo. Além disso, a emissão NO<sub>x</sub> diminuiu, em virtude de que o efeito de redução da temperatura máxima alcançada prevaleceu sobre o aumento da zona de alta temperatura.

As diferenças observadas entre os resultados experimentais e os resultados das simulações quanto às emissões de CO, CO<sub>2</sub> e NO<sub>x</sub> demonstravam que a temperatura prevista no interior do combustor ainda se encontrava elevada e, como consequência, se observava uma alta produção de NO térmico e uma acentuada conversão de CO a CO<sub>2</sub>, que implica numa baixa emissão de CO e uma presença de CO<sub>2</sub> superior à esperada.

Considerando que ao início do processo reativo, devido à condição de baixa temperatura, a cinética química é que limita o processo reativo, e que com o acréscimo de temperatura o modelo cinético fornece taxas reativas muito superiores, de forma que o processo passa a ser limitado pela condição de mistura, ficou evidente que as taxas de reação estavam superestimadas também para o processo turbulento. Analisando as taxas reativas ao longo do combustor, foi constatado o aspecto altamente concentrado da zona de reação, como apresentado na figura 5.20 para a conversão do propano a CO.

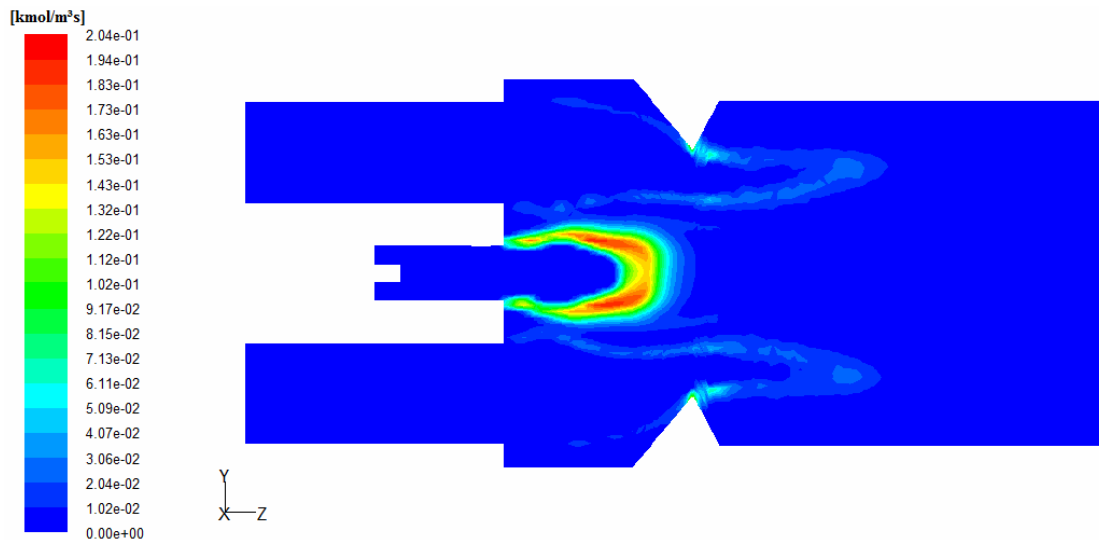


Figura 5.20 – Taxa da reação (5.1) em  $\text{kmol/m}^3\text{s}$  em detalhe no plano médio do combustor com o modelo *finite rate/eddy dissipation*.

Essa situação indicava que as taxas de reação previstas com o modelo *eddy dissipation* deveriam ser reduzidas, de forma a tornar a liberação de calor mais gradual. Outro aspecto considerado que poderia modificar essa condição altamente concentrada da zona de reação poderia ser a introdução no modelo do processo de transferência de calor, uma vez que até então as paredes do combustor eram consideradas adiabáticas.

### 5.3.1 Modelo com transferência de calor e *eddy dissipation* modificado

Uma das simplificações adotadas na construção do modelo geométrico do combustor DLN-LPP foi a retirada da região periférica que serve de passagem ao ar de diluição até a entrada na zona de mistura de combustor (figura 4.1). Tal simplificação permitiu uma redução no tamanho do modelo e, conseqüentemente, da malha, além de evitar uma região onde, devido à proximidade das paredes, as condições do escoamento fogem às hipóteses simplificativas do modelo  $k-\varepsilon$  pela importância dos efeitos viscosos. E mesmo que fosse empregado um modelo com esse nível de detalhe, haveria o obstáculo de fornecer as informações necessárias para representar o processo de transferência de calor da região de combustão ao fluxo periférico de ar de diluição através da parede interna. Deve-se considerar ainda que numa condição de regime permanente, o calor transferido da zona de combustão ao ar de diluição retorna quase que totalmente na entrada do ar de diluição na zona de mistura. Isso significa que numa condição de parede com menor resistência térmica e escoamento do ar de diluição bastante turbulento e com uma elevada componente de velocidade de rotação

em torno ao eixo do combustor (observar que a entrada tangencial do ar de diluição no combustor é feita exatamente para estabelecer um movimento rotatório, o que intensifica a transferência de calor), a quantidade de calor removida da zona de reação aumenta, mas a temperatura de entrada do ar na zona de diluição será também proporcionalmente maior.

A representação no modelo do fluxo de calor convectivo da zona de combustão para o ar de diluição foi realizada de modo estimado, de acordo com o procedimento descrito a seguir:

- No modo de pré-mistura não se observa a presença de chama nos combustores radiais e no queimador primário, de modo que as paredes desses elementos permanecem a uma temperatura baixa, devido à distância da região de combustão e ao contato direto com o fluxo de reagentes (Ferreira [1] faz uma breve referência a um valor inferior a 120°C nas condições de pré-mistura), enquanto que se observa maior temperatura da parede na região de chama até a zona de diluição, pelo calor liberado do processo de combustão. Em virtude dessa condição, no modelo foram criadas três diferentes regiões de parede: uma com os combustores radiais e queimador central; outra com a região cilíndrica antes do venturi, o próprio venturi e região cilíndrica até a entrada de ar da zona de diluição; e a última para a zona de mistura;
- No modelo adiabático, foi observada a temperatura da parede na região de combustão e calculado seu valor médio, além da área dessa região (figura 5.21);
- Em base à vazão de ar de diluição e à área da seção transversal do canal para o ar de diluição, foi obtida uma velocidade média para estimativa do coeficiente médio de transferência de calor convectivo da parede ao ar de diluição;
- Um modelo computacional com um volume composto de toda parte referente ao ar de diluição do modelo e zona de mistura foi criado, subtraindo-se internamente o volume das zonas primária e secundária de combustão (figura 5.22). Nesse modelo foi simulado um fluxo de ar a partir da entrada tangencial do ar de diluição, sendo aplicada uma condição adiabática às paredes dos combustores radiais, do queimador central e da zona de diluição, ao passo que na parede da região de

chama foi aplicado o valor médio de temperatura obtido anteriormente. Para a parede externa, foi aplicado o valor da temperatura do ar de entrada;

- Como resultado da simulação foi obtido um novo coeficiente convectivo médio para a transferência de calor ao ar de excesso ao longo do seu canal até a zona de diluição. Tal valor foi utilizado no modelo original, nas paredes da zona de reação, para simular a transferência de calor por convecção e estimativa da temperatura média do ar de diluição na entrada da zona de mistura (figura 5.23). Além disso, a simulação do ar de diluição permitiu obter o valor médio da velocidade de rotação do fluxo em torno ao eixo do combustor, também aplicada como condição de contorno na entrada da zona de diluição no modelo original (figura 5.24).

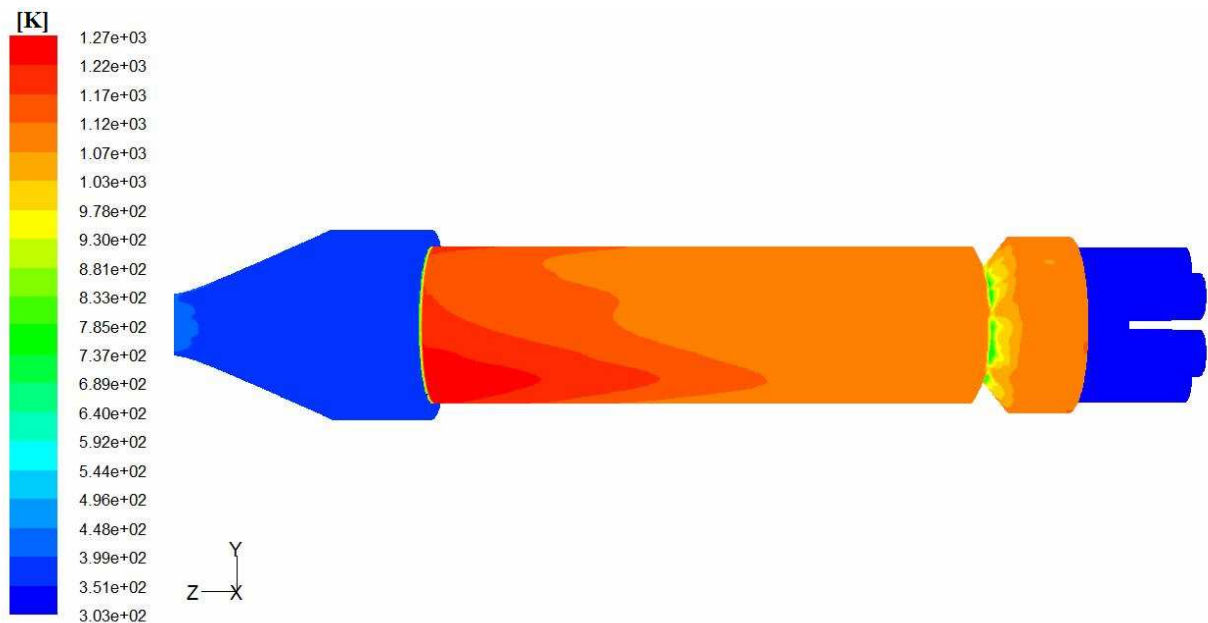


Figura 5.21 – Temperatura de parede do modelo considerado adiabático.

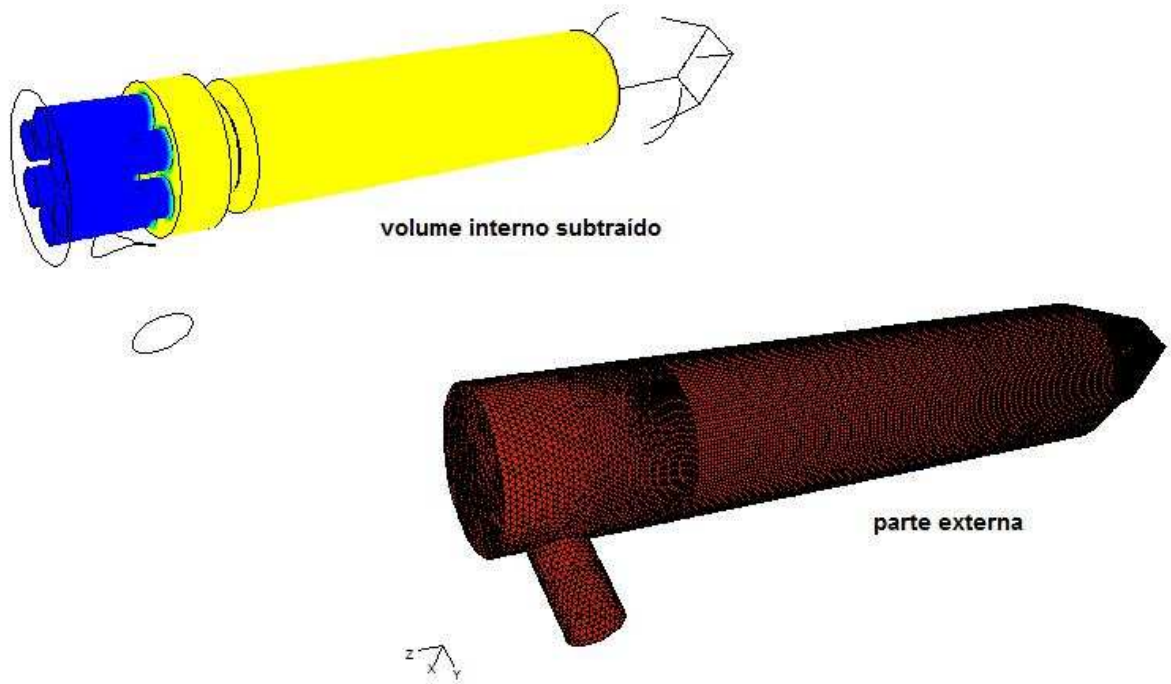


Figura 5.22 – Volume utilizado para simulação do fluxo de ar de diluição.

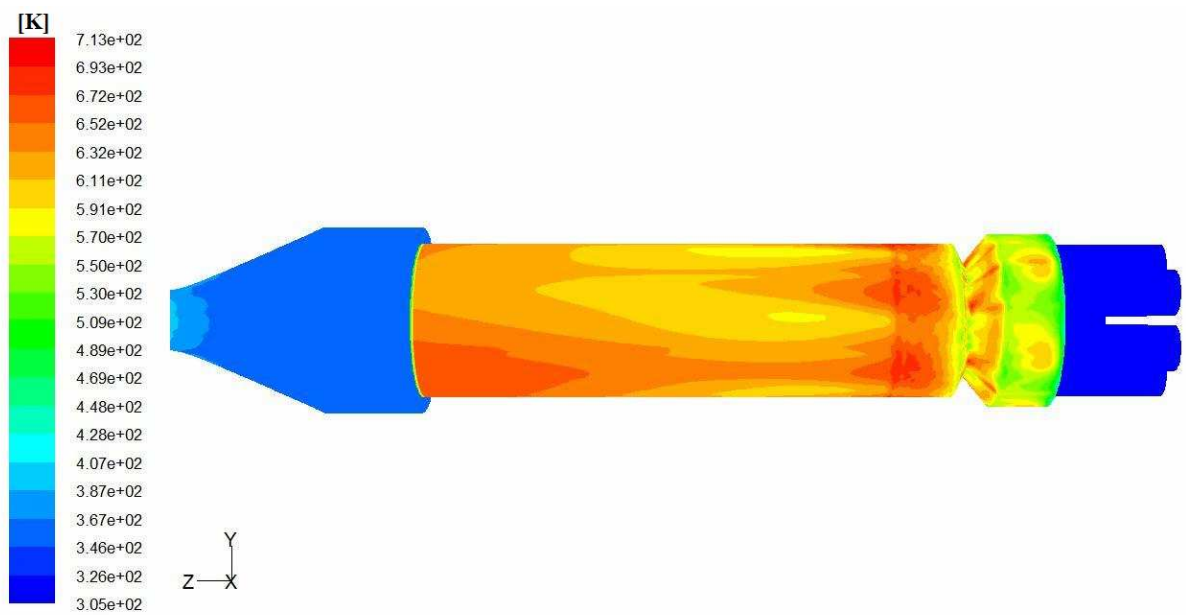


Figura 5.23 – Temperatura de parede do modelo com fluxo de calor convectivo.

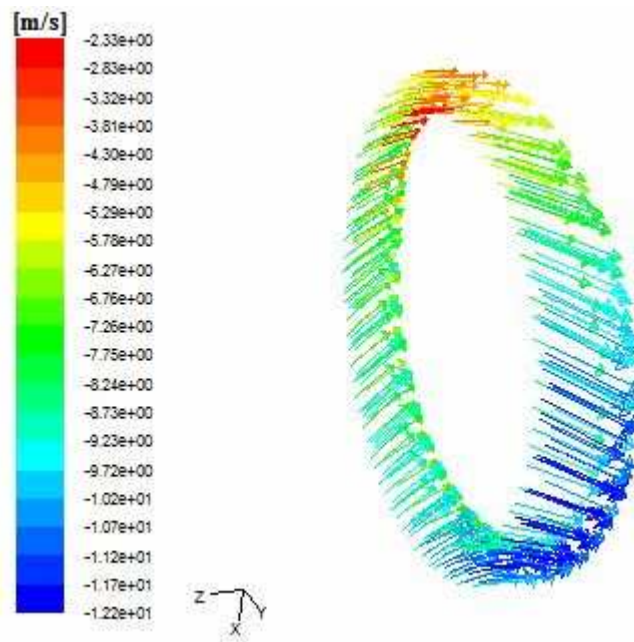


Figura 5.24 – Campo de velocidade em uma secção do canal de diluição, indicando o valor da componente tangencial ao longo do eixo do combustor.

Depois de inseridas no modelo as condições relativas à troca térmica nas paredes do combustor, os valores para a concentração de  $CO$  ao longo do aparelho permaneceram quase inalterados em relação ao modelo adiabático. Tomando como referência os resultados experimentais disponíveis, as constantes do modelo *eddy dissipation* foram reduzidas. Tais modificações permitiram tornar mais lentos os processos de consumo do combustível e de oxidação do  $CO$  a  $CO_2$ , e após realizar várias simulações envolvendo o modelo, decidiu-se por tratar separadamente a taxa do processo de oxidação do monóxido de carbono, de forma a haver um grau de liberdade a mais na modelagem do sistema. Assim, para as reações (5.1) e (5.2), pelas semelhança reativa e das condições de temperatura envolvidas, as constantes originais seriam alteradas, mas utilizando os mesmos valores de  $A$  e  $B$  do modelo *eddy dissipation* para as duas reações, enquanto que para a reação (5.3) foram testados outros valores para essas constantes. Uma justificativa simples para esse procedimento é que no modelo para a taxa de reação proporcional à taxa de mistura turbulenta, não existe nenhuma influência da temperatura, como pode ser observado nas expressões (3.80) e (3.81). Dessa forma, o uso de constantes diferentes possibilita – por meio dessa diferenciação – ajustar diferentes condições do escoamento, por exemplo temperatura, para o processo reativo. A indicação dos valores a serem empregados foi fornecida sobretudo pelo valor máximo de temperatura alcançado no combustor LPP, uma vez que a condição para reduzir em grande escala o mecanismo do  $NO$  térmico é um princípio fundamental para os



combustores desse tipo. Estudos experimentais complementares com informações das condições do escoamento reativo ao longo do combustor deveriam ser utilizados para validar definitivamente essas modificações propostas.

Depois de realizadas várias simulações para ajuste das constantes do modelo, observando o comportamento da temperatura seguida do nível de emissões de monóxido de carbono, constatou-se que o parâmetro mais influente é a constante  $A$  dos passos de reação (5.1) e (5.2), relativos ao consumo do combustível, e ao final foram selecionados os seguintes valores:

Tabela 5.5 – Constantes do modelo *eddy dissipation* empregadas no mecanismo de reação.

Reação	Constante $A$	Constante $B$
(5.1)	2,00	0,25
(5.2)	2,00	0,25
(5.3)	3,20	0,40

Realizadas mais essas modificações, as previsões obtidas com o modelo, considerando o campo de temperatura, a concentração de  $CO$  e de  $NO_x$  ao longo do plano médio do combustor são apresentadas na figura 5.25 até a figura 5.27. Pode-se perceber uma redução superior a 350 K no valor máximo de temperatura (em relação aos resultados do modelo *finite rate/eddy dissipation* padrão – figura 5.18) e o aumento da região com a presença de  $CO$  ao reduzir a velocidade de reação dos passos iniciais.

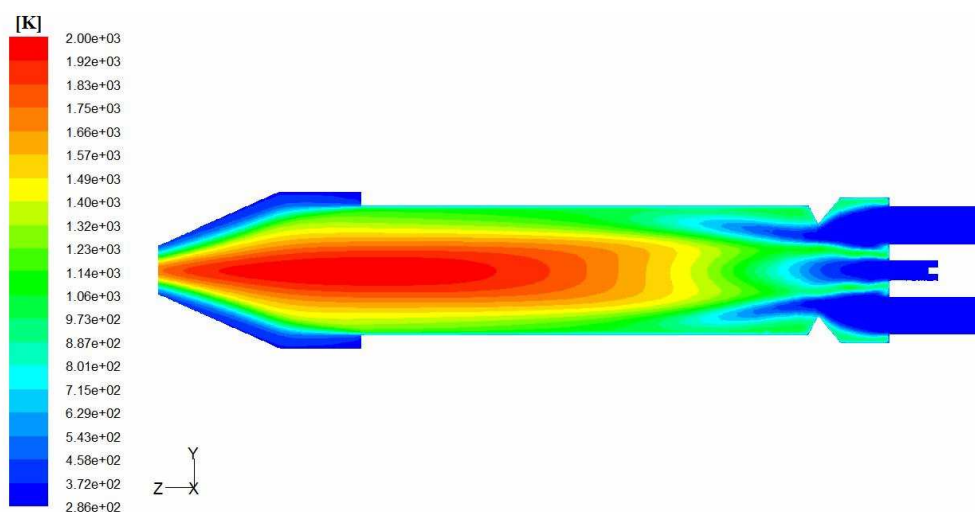


Figura 5.25 – Campo de temperatura obtido com o modelo *finite rate/eddy dissipation* modificado.

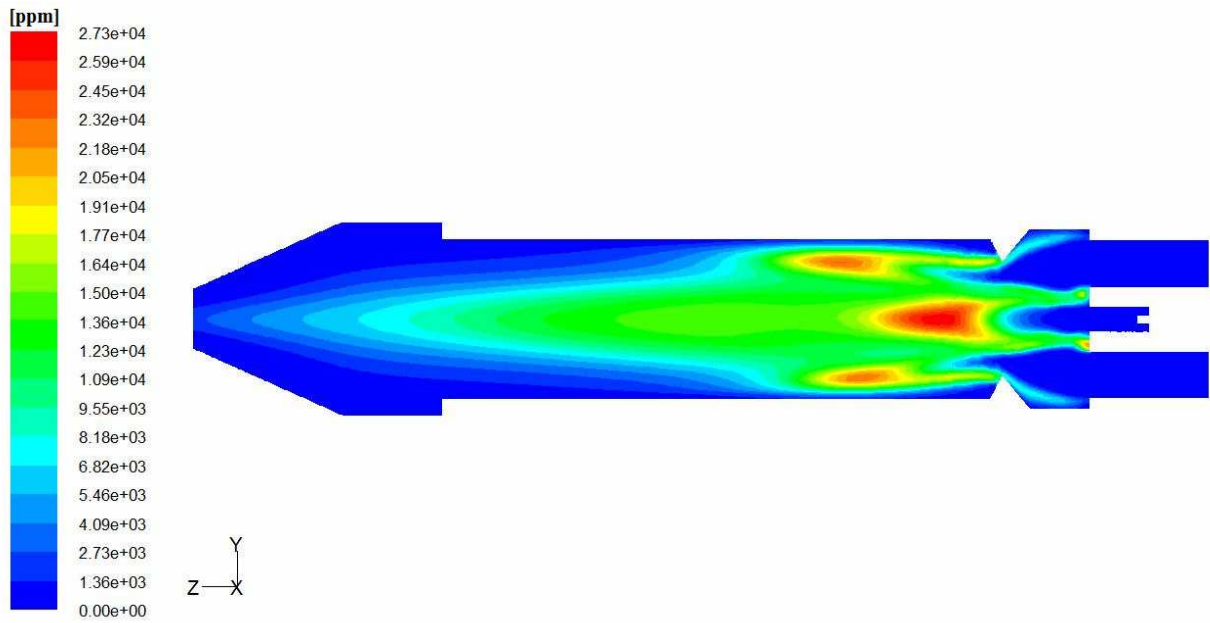


Figura 5.26 – Concentração de  $CO$  em ppm presente no plano médio do combustor com o modelo *finite rate/eddy dissipation* modificado.

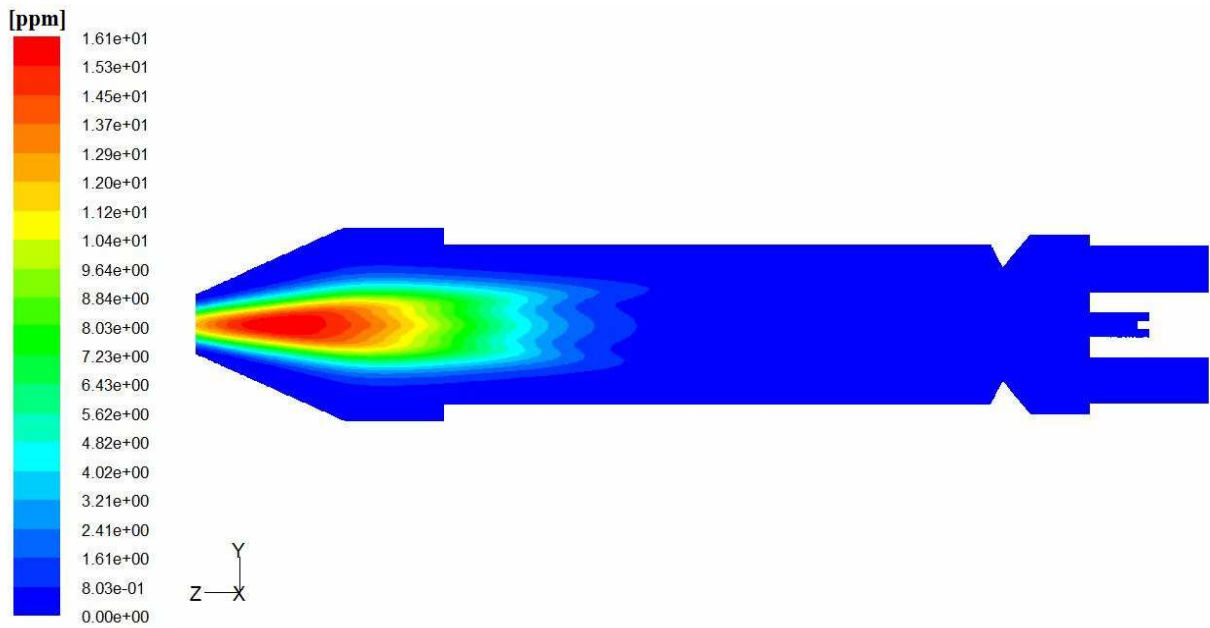


Figura 5.27 – Concentração de  $NO_x$  em ppm presente no plano médio do combustor com o modelo *finite rate/eddy dissipation* modificado.

Os resultados das emissões são resumidos na tabela 5.6, comparativamente aos correspondentes resultados experimentais.

Tabela 5.6 – Emissões obtidas para o combustor com o modelo *finite rate/eddy dissipation* modificado.

Condição	CO [ppm]	CO <sub>2</sub> [%]	HC [ppm]	NO <sub>x</sub> [ppm]	O <sub>2</sub> [%]
Modelo computacional	408	2,40	74	2,2	16,7
Resultado experimental [1]	435	1,35	-	17	18,6

Os níveis de emissões de CO<sub>2</sub> e O<sub>2</sub> foram mantidos em relação à condição anterior, com uma leve aproximação em relação aos resultados experimentais, enquanto a emissão de CO, empregada na calibração das constantes, é muito próxima à medição experimental. As emissões de NO<sub>x</sub> foram amplamente reduzidas com a redução de temperatura (de 2370 K a 2000 K). A emissão de NO<sub>x</sub> prevista é menor que o resultado experimental, mas da mesma ordem de grandeza. Nota-se ainda um considerável acréscimo nas emissões de hidrocarbonetos não queimados, que pode ser explicada pelo aumento da zona de reação no combustor e diminuição da temperatura, de modo que parte do combustível vai de encontro à saída junto às paredes, na parte mais fria do reator, e não é completamente convertida.

### 5.3.2 Simulação das demais condições experimentais

Uma vez obtido o modelo com as constantes da taxa de reação finita para o CO e da taxa de reação de mistura turbulenta de todas as espécies alteradas, a simulação foi aplicada às demais condições de operação com baixa razão de equivalência, apresentadas no trabalho experimental [1]. Tais condições correspondem a três regimes de rotação do turbocompressor da microturbina: 38.160, 51.300 e 66.000 rpm. Para cada uma dessas rotações existem duas condições com diferentes razões de equivalência: na condição 1, a razão de equivalência nos combustores radiais e da chama piloto são mais baixas; enquanto na condição 2, basicamente a quantidade de ar para a chama piloto e para os combustores radiais é reduzida, o que aumenta ambas razões de equivalência (tabela 5.7). As previsões obtidas, quanto às emissões de CO estão agrupadas na tabela 5.8, comparativamente aos resultados experimentais.

Tabela 5.7 – Vazões de ar, combustível e razões de equivalência das condições experimentais anteriores.

Condição	Número de Reynolds	Rotação	Razão de equivalência, $\phi$			Fluxo de combustível [g/s]		Fluxo de ar [g/s]	
			Global	Piloto	Radial	Radial	Piloto	Radial	Piloto
1	$4,78 \cdot 10^4$	38.160	0,48	1,62	0,29	1,3235	1,2405	68,610	11,830
2	$3,98 \cdot 10^4$	38.160	0,57	1,93	0,34	1,3223	1,2477	57,702	9,988
1	$6,07 \cdot 10^4$	51.300	0,60	1,40	0,47	2,7568	1,3782	87,910	15,210
2	$5,04 \cdot 10^4$	51.300	0,73	1,71	0,57	2,7581	1,3789	72,570	12,458
1	$8,46 \cdot 10^4$	66.000	0,62	0,91	0,57	4,6740	1,2470	122,428	21,171
2	$6,86 \cdot 10^4$	66.000	0,77	1,14	0,71	4,6575	1,2455	98,488	16,880

Percebe-se que, sem qualquer alteração no modelo, a tendência relativa às emissões de  $CO$  foi acompanhada ao passar da condição 2 à outra condição 2 em vazões diferentes, com uma tendência crescente com o acréscimo de vazão; e ao passar da condição 1 a  $Re = 4,78 \cdot 10^4$  à condição 1 a  $Re = 6,07 \cdot 10^4$ , onde também se observa um pequeno comportamento crescente para as previsões do modelo. No entanto, o comportamento nas demais situações é invertido, sendo, dentre eles, a condição mais nítida a tendência do modelo a um aumento nas emissões de  $CO$  ao passar da condição 1 à condição 2 reduzindo-se o número de Reynolds, enquanto os resultados experimentais apresentam um comportamento decrescente. Observando as razões de equivalência e os quantitativos de ar e combustível correspondentes a essas condições experimentais (tabela 5.7), percebe-se que na condição 2, conforme mencionado, a massa de combustível praticamente permanece constante e o aumento da razão de equivalência é devido à redução na massa de ar nos combustores radiais e na entrada para a chama-piloto.

Tabela 5.8 – Emissões de  $CO$  com o modelo *finite rate/eddy dissipation* modificado nas demais condições operativas, segundo o modelo apresentado na tabela 5.3 e tabela 5.5.

Número de Reynolds	Condição	Previsão [ppm]	Resultado experimental [ppm]
$4,78 \cdot 10^4$	1	408	435
$3,98 \cdot 10^4$	2	436	167
$6,07 \cdot 10^4$	1	434	580
$5,04 \cdot 10^4$	2	715	312
$8,46 \cdot 10^4$	1	249	642
$6,86 \cdot 10^4$	2	419	250

Isso significa que na condição 2 há sempre menos ar disponível comparativamente à correspondente condição 1, para a mesma quantidade de combustível e, ainda assim, observa-se uma menor emissão de monóxido de carbono. Isso indica que, nessa condição, a taxa de conversão do GLP a  $CO_2$  deve aumentar. No modelo de 2 passos utilizado, mantidas as constantes fixas, esse comportamento não pode ser observado e as previsões para as emissões de  $CO$  aumentam.

Dessa forma, para superar essa limitação do modelo de 2 passos, verificou-se ser necessário alterá-lo de uma condição a outra, de forma a buscar o ajuste aos dados experimentais. Novamente, devida à maior influência, os parâmetros escolhidos foram as constantes  $A$  e  $B$  do modelo de taxa de mistura dos passos de oxidação do combustível, reações (5.1) e (5.2). Confrontando os dados da tabela 5.7 e tabela 5.8, verifica-se que, em termos matemáticos, a emissão  $CO$  pode ser descrita como uma função da razão de equivalência da chama-piloto, além disso, em termos físicos a chama-piloto é a responsável por iniciar e alterar as condições do processo de queima de combustível das entradas radiais. Por tais motivos, a razão de equivalência foi a variável adotada para a revisão do modelo.

Um ajuste aos dados experimentais de  $Re = 3,98.10^4$  a  $Re = 6,07.10^4$  pode ser obtido facilmente utilizando um maior valor para a constante  $A$  do modelo de taxa de mistura, referente aos passos de oxidação do combustível, para maiores valores da razão de equivalência da chama-piloto, de forma que na condição 2 tais passos são mais velozes que a respectiva condição 1, e a temperatura alcançada mais elevada – o que está de acordo com os dados experimentais. No entanto, a emissão  $CO$  prevista para a condição 2 a  $Re = 6,86.10^4$  será maior que a previsão da condição 2 a  $Re = 5,04.10^4$ , de forma que para cobrir a tendência observada em todo o conjunto de dados experimentais, a função de ajuste assume um comportamento mais complexo (figura 5.28). O melhor ajuste encontrado para os dados experimentais, sem modificações no passo de reação do  $CO$  (5.3), é dado pela seguinte expressão, onde  $\phi_p$  é a razão de equivalência da chama-piloto e  $\phi_{ref}$  é a razão de equivalência para a condição de referência, igual a 1,62:

$$A = -11,8005(\phi_p - \phi_{ref})^4 - 6,1902(\phi_p - \phi_{ref})^3 + 2,8957(\phi_p - \phi_{ref})^2 + 1,3162(\phi_p - \phi_{ref}) + 2,0077 \quad (5.4)$$

$$0,91 \leq \phi_p \leq 1,93 \quad (5.5)$$

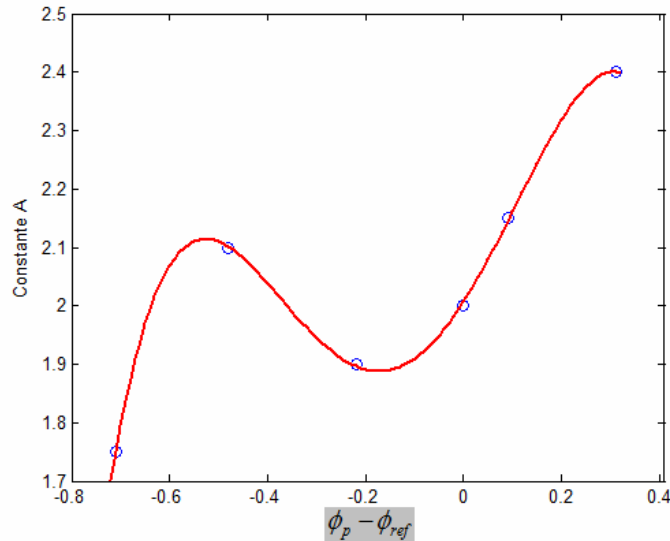


Figura 5.28 – Ajuste da constante A em função da razão de equivalência da chama-piloto.

Alterando o modelo dessa forma – em função da razão de equivalência da chama-piloto – os resultados das simulações para as emissões de  $CO$ , comparativamente aos resultados experimentais, são apresentados na tabela 5.9.

Tabela 5.9 – Emissões de  $CO$  com o modelo *finite rate/eddy dissipation* modificado nas demais condições operativas em função de  $\phi_p$ .

Número de Reynolds	Condição	Previsão [ppm]	Resultado experimental [ppm]
$4,78 \cdot 10^4$	1	408	435
$3,98 \cdot 10^4$	2	240	167
$6,07 \cdot 10^4$	1	625	580
$5,04 \cdot 10^4$	2	425	312
$8,46 \cdot 10^4$	1	703	642
$6,86 \cdot 10^4$	2	276	250

Em relação às emissões de  $NO_x$ , os resultados obtidos são apresentados na tabela 5.10. Os valores absolutos se afastam consideravelmente dos resultados experimentais, sempre com previsões inferiores ao observado nas condições de operação do tipo 1 e previsões superiores nas condições do tipo 2. Basicamente isso significa que os valores de temperatura previstos no caso 2 estão acima das condições reais e, possivelmente inferiores nas condições do caso 1. No entanto, o próprio manual do programa *Fluent* [23] afirma que os resultados do modelo para emissões de  $NO_x$  devem ser tomados no sentido indicativo e não

em valores absolutos. Desse modo, as simulações foram capazes de indicar que as emissões de  $NO_x$  tendem a diminuir ao aumentar da vazão entre as condições do tipo 1. Considerando as condições do tipo 2, essa tendência foi mantida nas simulações, enquanto experimentalmente não foi observada essa condição ao passar do regime de  $Re = 5,04.10^4$  ao de  $Re = 6,86.10^4$ , quando as emissões de  $NO_x$  aumentaram. Outra condição que escapou do comportamento determinado experimentalmente foi a passagem da condição 1 e  $Re = 4,78.10^4$  à condição 2 e  $Re = 3,98.10^4$ , onde o modelo prevê um aumento nas emissões de  $NO_x$ , enquanto as medidas demonstraram um comportamento estável.

Tabela 5.10 – Emissões de  $NO_x$  com o modelo *finite rate/eddy dissipation* modificado nas demais condições operativas em função de  $\phi_p$ .

Número de Reynolds	Condição	Previsão [ppm]	Resultado experimental [ppm]
$4,78.10^4$	1	2,2	17
$3,98.10^4$	2	274	16
$6,07.10^4$	1	1,2	12
$5,04.10^4$	2	149	14
$8,46.10^4$	1	0,2	9
$6,86.10^4$	2	47	17

### 5.3.3 Análise de sensibilidade do modelo

A todo trabalho experimental estão associadas incertezas, devido a fontes diversas: associadas aos métodos de medição, aos instrumentos de medição, condições ambientais, materiais empregados e mão-de-obra. Com isso, seja na reprodução ou simulação de um trabalho experimental, considerar as incertezas associadas é extremamente importante, pois delimita com segurança o possível intervalo de valores e possibilita analisar e compreender melhor se o comportamento de um determinado modelo se afasta das condições reais.

Com esse intuito, algumas das variáveis de maior influência do modelo apresentado foram escolhidas para análise de sensibilidade dos resultados dentro de uma faixa de variação de  $\pm 20\%$ , uma vez que, das condições experimentais, os limites de variação não eram conhecidos. Além disso, tais informações são úteis para validação do modelo no caso de

investigação complementar, com resultados experimentais mais detalhados para confronto. As variáveis selecionadas para essa análise foram:

1. vazão de ar central,
2. vazão de combustível da chama-piloto,
3. vazão de mistura dos combustores radiais,
4. vazão de ar de diluição,
5. composição do GLP,
6. comprimento da zona de diluição,
7. comprimento da zona secundária de combustão e
8. comprimento da zona primária de combustão.

### 5.3.3.1 Influência da vazão de ar central

A razão de equivalência da chama-piloto foi tomada como um ponto-chave na definição do modelo, que utiliza alguns parâmetros em função dessa variável. Assim, as vazões de ar e de combustível são cruciais no comportamento dos resultados previstos. Considerando as condições da simulação de referência e alterando apenas a vazão de ar da chama central para avaliar a faixa de variação possível dos resultados devido a uma incerteza associada a tal variável, os resultados apresentados na figura 5.29 foram obtidos para a temperatura máxima no combustor e emissões de  $NO_x$ .

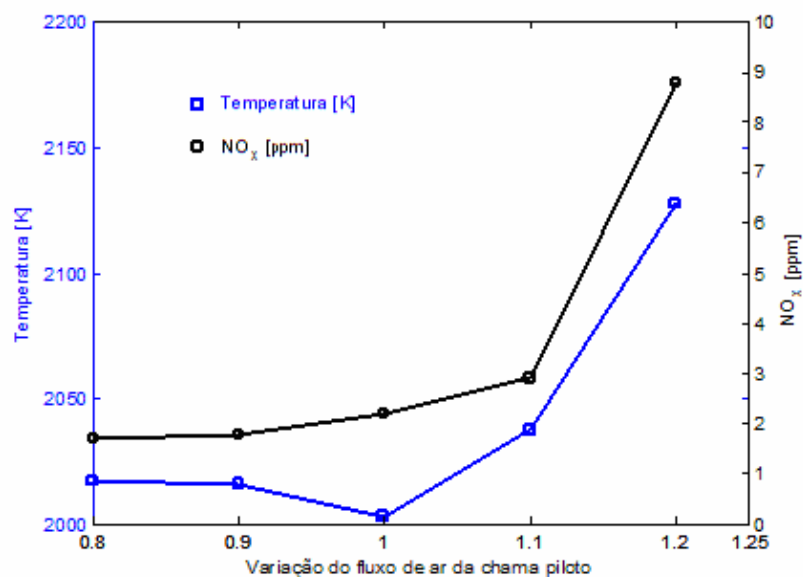


Figura 5.29 – Influência da vazão de ar da chama-piloto sobre a temperatura máxima e emissão de  $NO_x$ .



Percebe-se que, em relação à temperatura, as condições definidas para o modelo funcionam muito próximo a uma situação de mínimo, e ao variar a vazão de ar da chama-piloto se observa um aumento da temperatura máxima do combustor. Esse aumento é mais acentuado quando a vazão de ar aumenta, ou seja,  $\phi_p$  diminui, e se atinge uma variação em torno a +6% com um acréscimo de 20% na vazão mássica de ar. Ao reduzir a vazão de ar, o aumento observado no valor da temperatura é inferior a 1%, assumindo um caráter praticamente independente em relação a essa variável. As emissões de  $NO_x$ , que pelo mecanismo térmico são fortemente ligadas ao acréscimo de temperatura, acompanham o mesmo comportamento da temperatura máxima no combustor, obviamente com uma variação percentual amplificada, muito importante em relação ao acréscimo da vazão de ar, mas ainda desprezível em relação à redução dessa variável.

Em se tratando das emissões de  $CO$  e hidrocarbonetos não queimados, o comportamento é basicamente linear, muito semelhante para os dois poluentes, com um coeficiente angular negativo em relação à vazão mássica de ar da chama-piloto (figura 5.30).

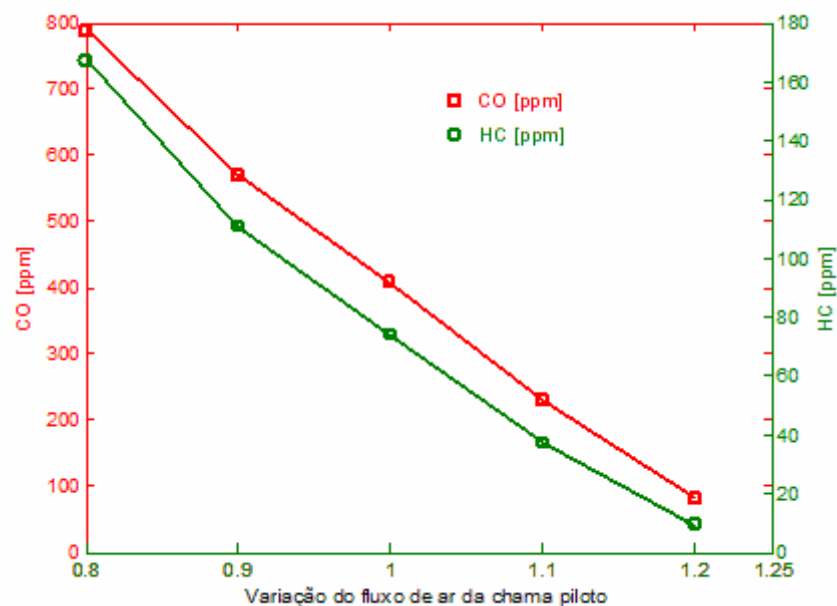


Figura 5.30 – Influência da vazão de ar da chama-piloto sobre as emissões de  $CO$  e  $HC$  .

### 5.3.3.2 Influência da vazão de combustível da chama piloto

Em relação à vazão mássica central de combustível, o comportamento observado com o modelo é um pouco diferente. Os resultados de temperatura máxima,

emissões de  $NO_x$ , de  $CO$  e hidrocarbonetos não queimados apresentam um comportamento em proporção direta com a vazão de combustível (figura 5.31 e figura 5.32). Pode-se observar que a temperatura e as emissões de  $NO_x$  são mais fortemente influenciadas que no caso anterior – para pequenas reduções na vazão de combustível – pois um comportamento assintótico se inicia mais tardiamente.

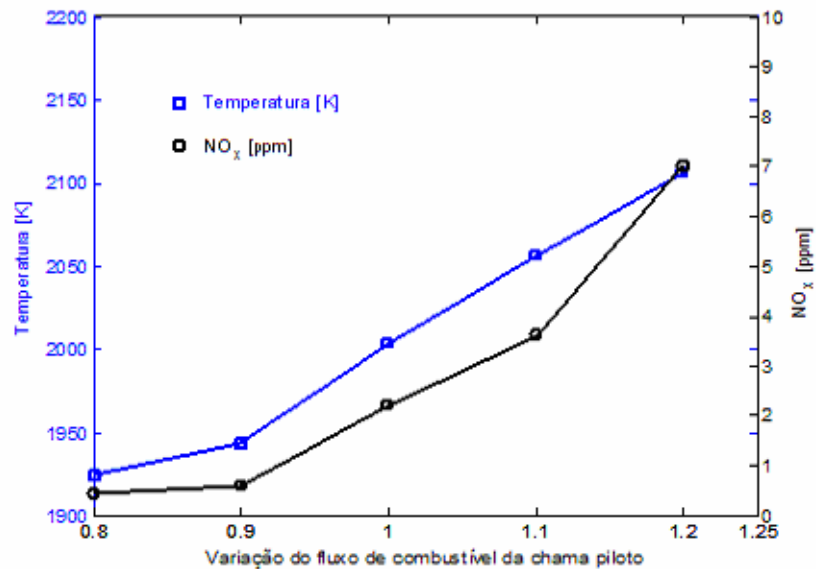


Figura 5.31 – Influência da vazão de combustível da chama-piloto sobre a temperatura máxima e emissão de  $NO_x$ .

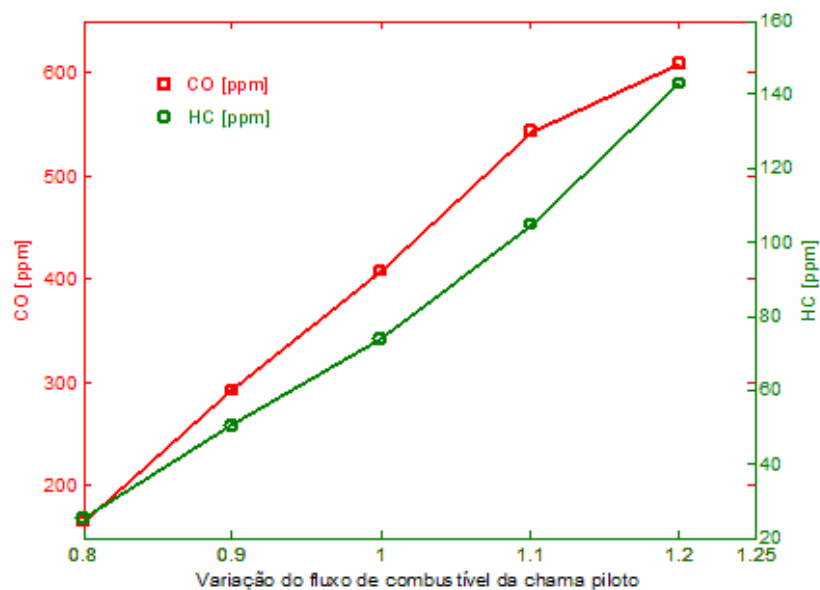


Figura 5.32 – Influência da vazão de combustível da chama-piloto sobre as emissões de  $CO$  e  $HC$ .

As emissões de *CO* e *HC* são fortemente influenciadas por esse parâmetro, uma variação de  $\pm 10\%$  na vazão de combustível provoca no modelo uma variação aproximada na emissão de monóxido de carbono de  $\pm 30\%$ , enquanto que para os hidrocarbonetos não queimadas essa variação atinge a faixa de  $\pm 35\%$ .

### 5.3.3.3 Influência da vazão de mistura dos combustores radiais

Ao considerar a vazão mássica de mistura presente nos combustores radiais, a influência sobre o modelo apresenta o comportamento apresentados na figura 5.33, referente à temperatura e emissão de  $NO_x$ , e figura 5.34, referente às emissões de *CO* e hidrocarbonetos.

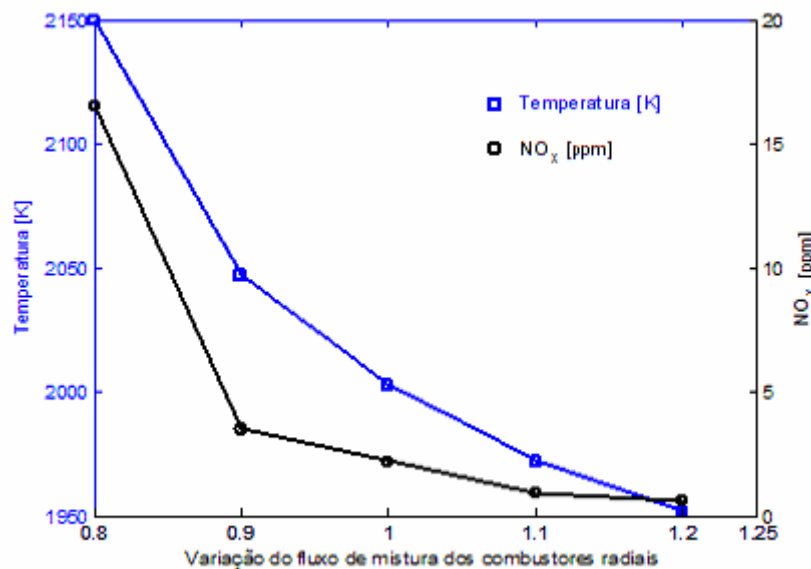


Figura 5.33 – Influência da vazão de mistura dos combustores radiais sobre a temperatura máxima e emissão de  $NO_x$ .

O comportamento da temperatura e emissão de  $NO_x$  com a vazão de mistura dos combustores radiais é de relação inversa, ao reduzir a vazão se observa um aumento na temperatura máxima no combustor e, conseqüentemente na emissão de óxidos de nitrogênio. O aumento de temperatura chega a um valor percentual de 7,5% no caso de redução de 20% na vazão. Esse aumento de temperatura implica um forte aumento nas emissões de  $NO_x$ , ao passo que, no sentido de aumento da vazão de mistura, a redução nas emissões de  $NO_x$  apresenta um comportamento muito mais suave, tendente a assintótico, muito provavelmente

porque enquanto o mecanismo térmico se reduz, a importância relativa dos mecanismos *prompt* e de óxido nitroso se apresenta mais intensamente na emissão total.

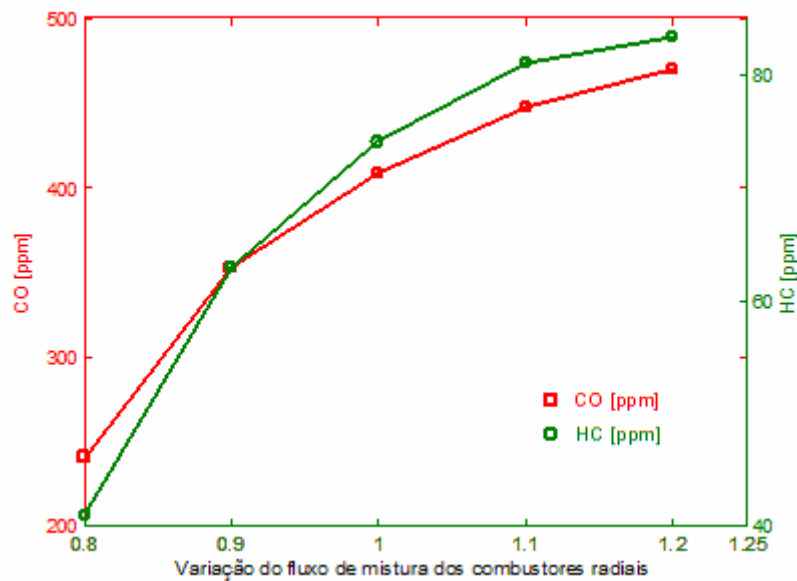


Figura 5.34 – Influência da vazão mistura dos combustores radiais sobre as emissões de *CO* e *HC* .

Em relação ao *CO* e hidrocarbonetos não queimados, o comportamento se inverte, as emissões crescem com o aumento da vazão de mistura. No entanto, ainda nessa condição, o efeito de reduzir a vazão atua de maneira mais intensa que o seu aumento (uma redução de 20% na vazão provoca uma redução nas emissões de *CO* e *HC* da ordem de 40%).

#### 5.3.3.4 Influência da vazão de ar de diluição

O fluxo de ingresso de ar no combustor na zona de diluição, que tem por objetivo reduzir a temperatura dos gases a um nível de acordo com o suportado pelos materiais empregados na turbina, se mostrou a variável de menor influência sobre o modelo, em relação à temperatura máxima e emissão  $NO_x$  (figura 5.35). A temperatura máxima, que é atingida antes dessa zona, não sofre alteração, e as variações nas emissões de  $NO_x$  são tão pequenas em valores absolutos que não deveriam ser consideradas. Em relação ao *CO* e *HC* , foi obtido um comportamento linear, demonstrando que, no modelo, esse fluxo contribui ainda de maneira considerável para completar a oxidação completa dessas espécies (figura 5.36).

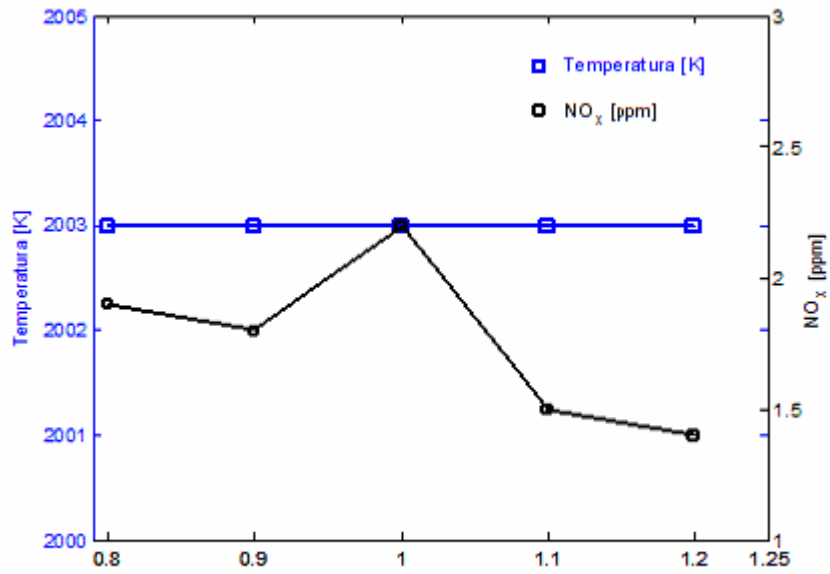


Figura 5.35 – Influência da vazão do ar de diluição sobre a temperatura máxima e emissão de  $NO_x$ .

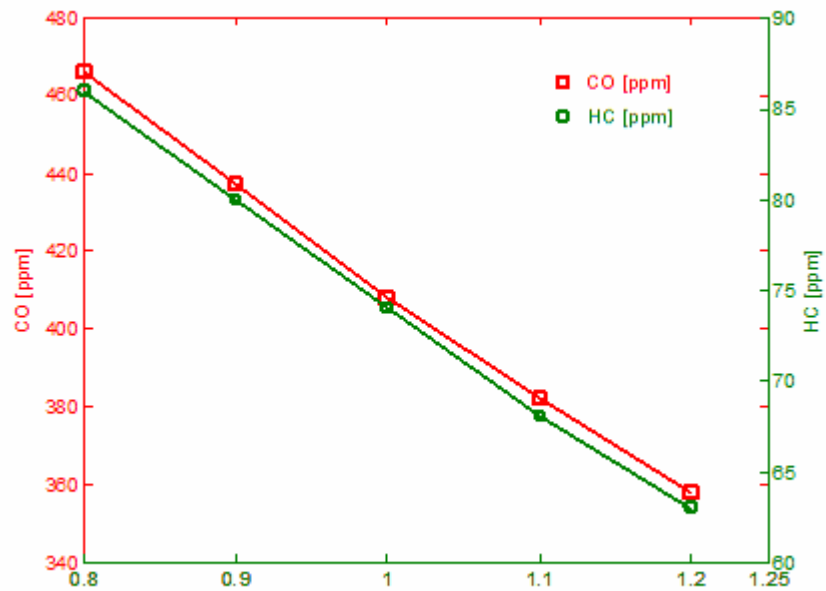


Figura 5.36 – Influência da vazão de ar de diluição sobre as emissões de  $CO$  e  $HC$ .

### 5.3.3.5 Influência da composição do GLP

Ao considerar a variação máxima na composição do gás GLP, entre os percentuais de propano e butano de 30/70 a 60/40 – mantendo as demais condições inalteradas, inclusive o fluxo mássico de combustível – os resultados fornecidos pelo modelo indicam uma menor temperatura com um maior percentual de propano, conseqüentemente com maior emissão de *CO* e hidrocarbonetos não queimados (tabela 5.11).

Tabela 5.11 – Condições previstas ao variar a composição do gás GLP.

Percentual entre propano e butano	Temperatura máxima [K]	Emissão de <i>CO</i> [ppm]	Emissão de HC [ppm]	Emissão de <i>NO<sub>x</sub></i> [ppm]
30/70	1948	512	90	0,7
60/40	2014	411	76	1,9

Com um maior percentual de butano em relação à composição normal (estabelecida em 50% de propano e 50% de butano) os resultados não apresentam uma variação significativa, seja em relação à temperatura máxima, emissões de monóxido de carbono ou hidrocarbonetos não queimados. No entanto, ao reduzir o percentual de propano, devido ao menor poder calorífico desse gás combustível por unidade de volume, a temperatura pode sofrer uma variação de -3,3%; as emissões de monóxido de carbono +24,6%; hidrocarbonetos não queimados de +18,4%, enquanto se observa uma ligeira tendência na redução das emissões dos óxidos de nitrogênio, atrelada à redução de temperatura.

### 5.3.3.6 Influência do comprimento da zona de diluição

Com o objetivo de utilizar o modelo para verificar como seria possível reduzir as emissões de poluentes do combustor, as condições da simulação de referência foram empregadas sobre algumas variantes geométricas da câmara de combustão. A primeira modificação realizada foi o aumento do comprimento da zona de diluição do modelo, alongada de 60 mm, situação da qual foram obtidos os resultados apresentados na figura 5.37 e figura 5.38, além da tabela 5.12.

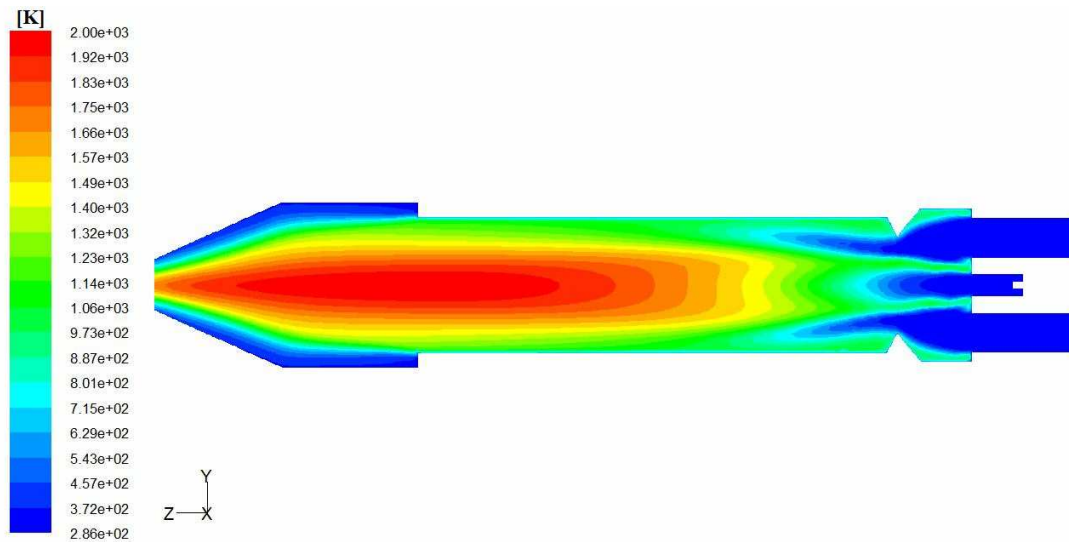


Figura 5.37 – Campo de temperatura no plano médio do combustor com a zona de diluição alongada de 60 mm.

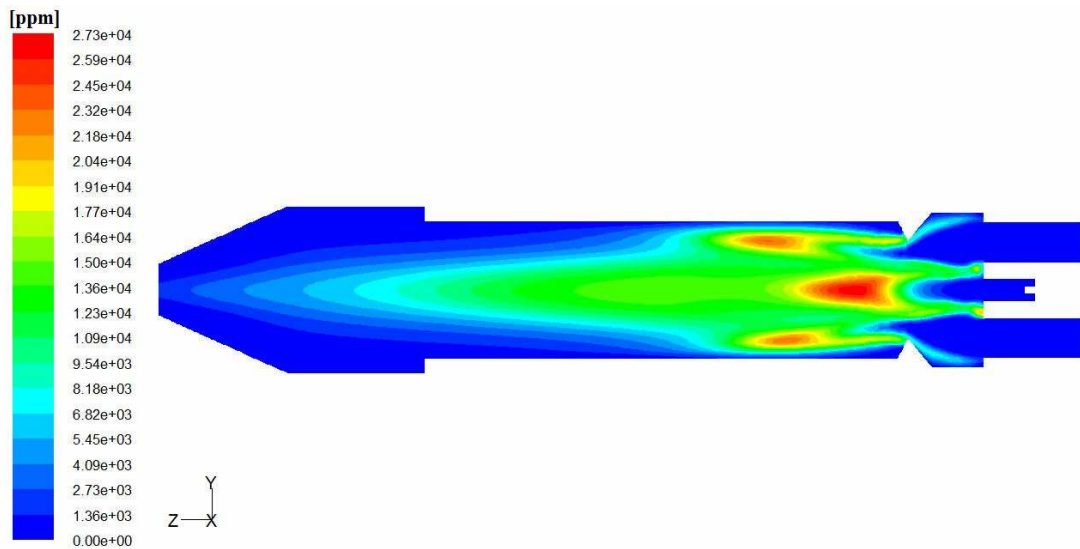


Figura 5.38 – Concentração de  $CO$  em ppm presente no plano médio do combustor com a zona de diluição alongada de 60 mm.

Tabela 5.12 – Comparativo entre as emissões previstas pelo modelo com a zona de diluição atual e alongada em 60 mm.

Comprimento da zona de diluição	Temperatura máxima [K]	Emissão de $CO$ [ppm]	Emissão de HC [ppm]	Emissão de $NO_x$ [ppm]
250 mm	2003	408	74	2,2
310 mm	2003	334	58	1,8

Percebe-se que o efeito de aumentar o comprimento da zona de diluição é benéfico em termos de todos os poluentes, pois como se prevê naquela região uma zona de alta temperatura e, conseqüentemente, onde o processo químico pode ainda se desenvolver, o aumento do tempo de residência contribui para a oxidação do monóxido de carbono e dos hidrocarbonetos não queimados. Já a ligeira redução no quantitativo de  $NO_x$  emitido talvez esteja relacionada à menor disponibilidade de  $N_2$  atmosférico – proveniente do ar de diluição – na parte central do combustor, uma vez que com o alongamento, o trato convergente de saída se inicia mais tardiamente.

### 5.3.3.7 Influência do comprimento da zona secundária de combustão

Da mesma forma de realização para a condição anterior, o combustor foi alongado de 60 mm na zona secundária de combustão, ou seja, antes da entrada de ar da zona de diluição. O campo de temperatura e a concentração de  $CO$  ao longo do plano médio do combustor são muito semelhantes à situação com o alongamento na zona de diluição (figura 5.39 e figura 5.40). O aumento do tempo de residência para o escoamento e o processo reativo promoveu novamente um benefício em termos das emissões de hidrocarbonetos e monóxido de carbono, com uma redução prevista muito semelhante àquela conseguida com o aumento da zona de diluição, e ligeiramente menor em relação à emissão de  $NO_x$  (tabela 5.13).

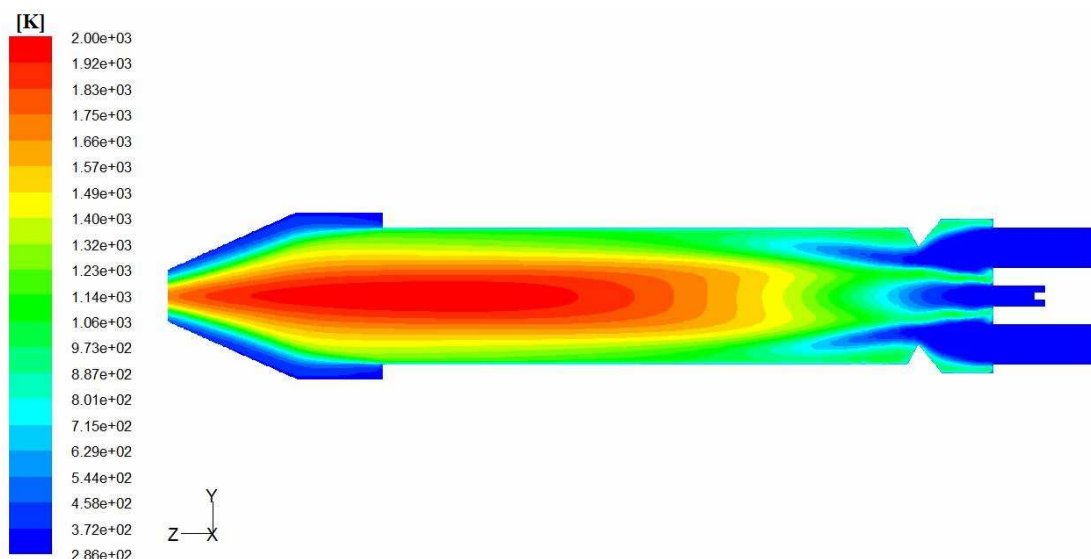


Figura 5.39 – Campo de temperatura no plano médio do combustor com a zona secundária de reação alongada de 60 mm.



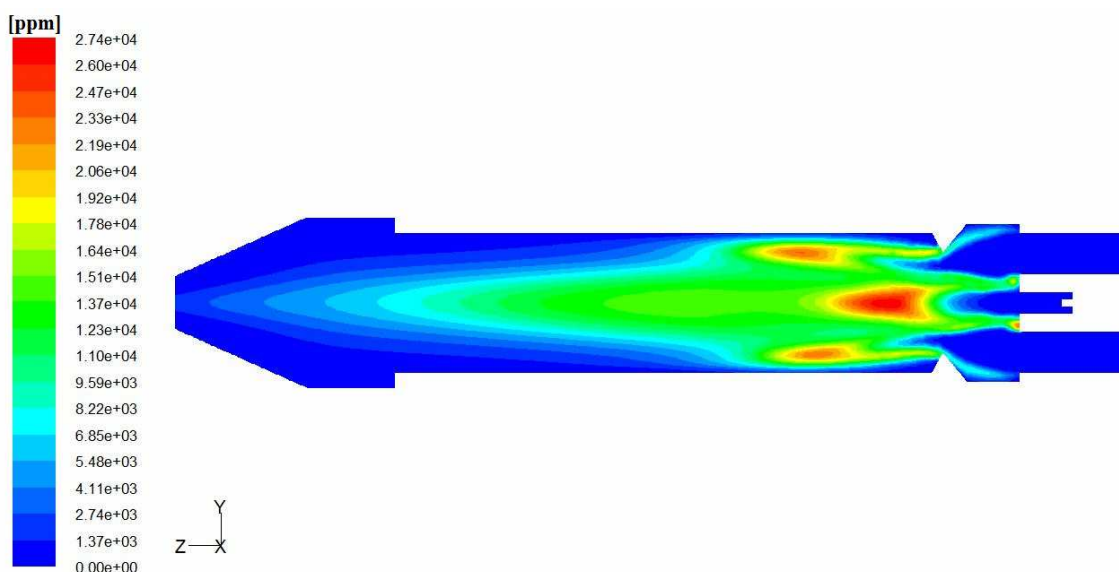


Figura 5.40 – Concentração de  $CO$  em ppm presente no plano médio do combustor com a zona secundária de reação alongada de 60 mm.

Tabela 5.13 – Comparativo entre as emissões previstas pelo modelo com a zona secundária de reação atual e alongada em 60 mm.

Comprimento da zona secundária de reação	Temperatura máxima [K]	Emissão de $CO$ [ppm]	Emissão de HC [ppm]	Emissão de $NO_x$ [ppm]
550 mm	2003	408	74	2,2
610 mm	2005	328	58	1,9

### 5.3.3.8 Influência do comprimento da zona primária de combustão

O combustor DLN-LPP do Laboratório de Energia e Ambiente possibilita a regulação do comprimento da zona primária de combustão dentro de uma faixa estabelecida de 60 mm. Dos resultados experimentais, o menor nível de emissões é obtido ao operar o combustor na configuração de máximo comprimento, condição que foi simulada neste trabalho. Como a posição da chama-piloto formada na zona primária em relação ao difusor é de fundamental importância para estabilização da chama, a alteração desse parâmetro modifica a faixa de operação possível do combustor. Conforme relatado por Ferreira [1], ao reduzir o comprimento da zona primária um funcionamento estável só era obtido a um regime de rotação do grupo turbocompressor mais elevado. Mas foi observado que ao operar o combustor com o comprimento mínimo, havia uma tendência ao aumento do nível de

emissões de monóxido de carbono, mesmo considerando que as demais condições de funcionamento não eram exatamente as mesmas estabelecidas com a operação no comprimento máximo. Ao realizar a simulação dessa condição, a de comprimento mínimo mais próxima à tomada como referência, foram obtidos os resultados apresentados na figura 5.41 e figura 5.42, referentes ao campo de temperatura e concentração de  $CO$ . A tabela 5.14 reúne um comparativo entre os resultados experimentais e as previsões da simulação, que para os poluentes se manteve sempre superior ao observado.

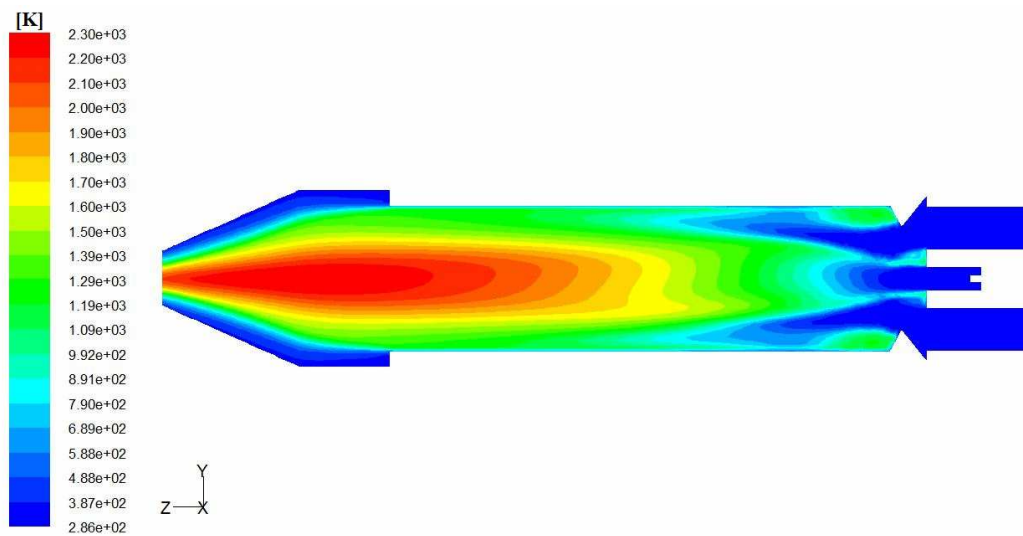


Figura 5.41 – Campo de temperatura no plano médio do combustor com a zona primária de combustão reduzida de 60 mm.

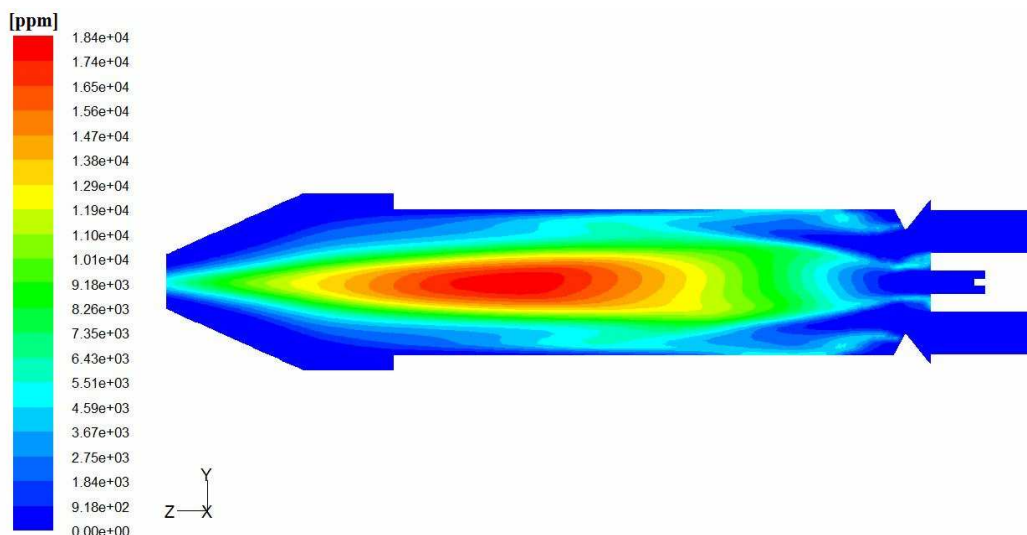


Figura 5.42 – Concentração de  $CO$  em ppm presente no plano médio do combustor com a zona primária de combustão reduzida de 60 mm.

Tabela 5.14 – Comparativo entre as emissões previstas pelo modelo e os resultados experimentais com a zona primária de combustão reduzida em 60 mm.

Condição	CO [ppm]	CO <sub>2</sub> [%]	HC [ppm]	NO <sub>x</sub> [ppm]	O <sub>2</sub> [%]
Modelo computacional	601	2,64	118	49	16,2
Resultado experimental	385	1,09	-	8	18,9

O principal efeito observado nas simulações foi um aumento da temperatura máxima no combustor ao reduzir o comprimento da zona primária, com isso, o nível de emissões de NO<sub>x</sub> previsto se eleva consideravelmente, enquanto as emissões de CO se mantêm elevadas pela redução do tempo de residência do escoamento.

Por fim, foi realizada uma simulação, sob as mesmas condições da condição de referência, mas com a zona primária alongada em 25 mm, para verificar quais seriam os efeitos esperados dessa alteração. Os resultados dessa simulação são apresentados na tabela 5.15.

Tabela 5.15 – Comparativo entre as emissões previstas pelo modelo com a zona primária de reação atual e alongada em 25 mm.

Comprimento da zona primária de reação	Temperatura máxima [K]	Emissão de CO [ppm]	Emissão de HC [ppm]	Emissão de NO <sub>x</sub> [ppm]
87 mm	2003	408	74	2,20
112 mm	1880	436	86	0,24

Assim como ao reduzir o comprimento o principal efeito observado foi o aumento da temperatura máxima, ao alongar essa região o efeito preponderante foi a redução de temperatura, que prejudicou levemente a oxidação de hidrocarbonetos e de monóxido de carbono, mesmo com o tempo de residência mais elevado. O único benefício obtido com essa modificação foi uma queda na emissão de NO<sub>x</sub>, devido à redução de temperatura.

## 5.4 - O MODELO EDC

O modelo *eddy-dissipation concept* emprega, no cálculo das taxas de produção e consumo das espécies químicas, os valores definidos pela cinética química segundo o modelo de Arrhenius ou Arrhenius modificado. Como com o uso do modelo *finite rate/eddy dissipation* foi observada uma necessidade de diminuir a velocidade do processo reativo para melhor simular as condições experimentais, já era evidente que o uso do modelo EDC não seria aplicável com o mesmo mecanismo reativo. Isso porque o modelo *finite rate/eddy dissipation* toma sempre a menor taxa de reação dentre aquelas calculadas pela cinética química e pelo processo de mistura turbulenta – sendo que a baixa temperatura o modelo relativo à cinética química oferece a menor taxa e, acima de uma certa temperatura, a menor taxa de reação é dada pelo processo de mistura turbulenta. Como essa taxa obtida pelo processo de mistura já se mostrava acima do esperado, a taxa calculada segundo o modelo da cinética química resulta ainda mais elevada. Dessa forma, mantidos os mecanismos de reação de dois passos e os parâmetros utilizados com o modelo *finite rate/eddy dissipation*, os resultados obtidos indicam uma elevada temperatura na zona de reação (figura 5.43) com um rápido consumo de  $CO$ , o que corresponde, em termos de emissões, a um quantitativo exagerado de  $NO_x$  e a um baixo quantitativo de  $CO$ . O nível de hidrocarbonetos não queimados também se reduz sensivelmente, em função da maior temperatura observada (tabela 5.16).

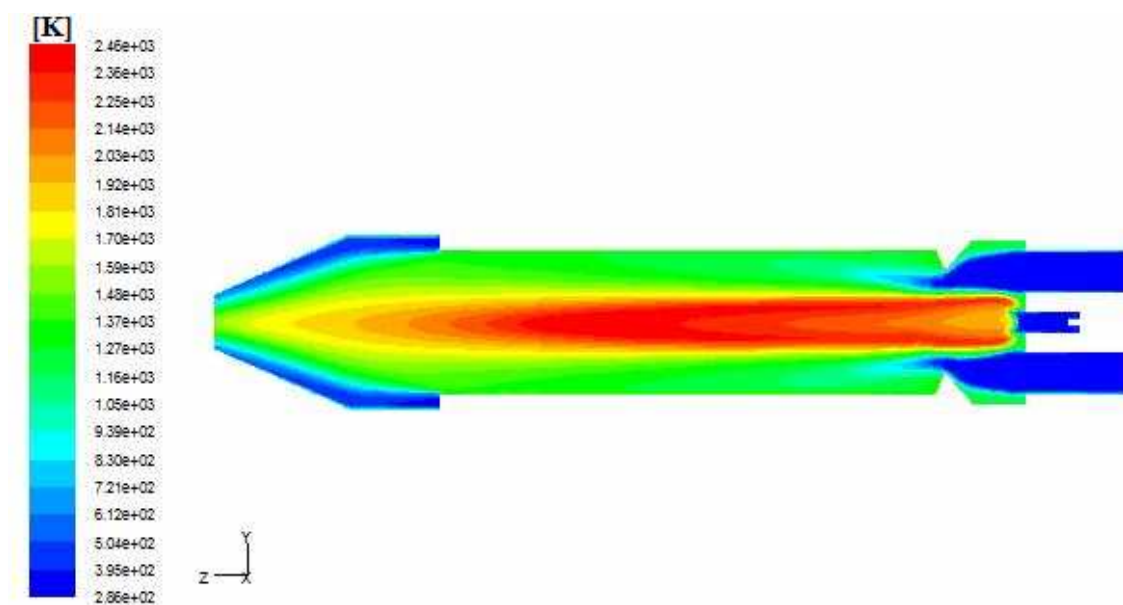


Figura 5.43 – Campo de temperatura obtido com o modelo EDC.

Tabela 5.16 – Emissões obtidas para o combustor com o modelo EDC.

Condição	<i>CO</i> [ppm]	<i>CO</i> <sub>2</sub> [%]	<i>HC</i> [ppm]	<i>NO</i> <sub>x</sub> [ppm]	<i>O</i> <sub>2</sub> [%]
Modelo computacional	27	2,55	0,3	358	16,5
Resultado experimental [1]	435	2,54	-	17	18,6

Dessas previsões conclui-se que para aplicação do modelo EDC seria necessário o emprego de um mecanismo de cinética química mais detalhado, com um maior número de passos e espécies intermediárias, possivelmente com o emprego de reações reversíveis, de forma que a redução da velocidade de conversão do combustível aos produtos finais ocorreria de forma natural na interação dos diversos caminhos do modelo químico.

## 6 CONCLUSÕES

Com este trabalho foi obtido um modelo computacional para o combustor DLN-LPP do Laboratório de Energia e Ambiente da Universidade de Brasília, com o qual é possível obter resultados próximos às condições de funcionamento no modo *lean-lean*, quanto às emissões de monóxido de carbono. As previsões referentes às emissões dos óxidos de nitrogênio servem em modo indicativo quanto a reduções ou aumentos ao se modificar as condições de funcionamento.

É importante ressaltar que o modelo desenvolvido serve para utilização com o modelo de turbulência  $k - \varepsilon$ . O uso de outros modelos de turbulência implica numa revisão dos parâmetros e novo ajuste das constantes das taxas de reação referentes ao modelo proporcional à taxa de mistura turbulenta, segundo o procedimento adotado para ajuste com o modelo  $k - \varepsilon$ .

Apesar de que na maior parte do combustor se verifica a hipótese que o processo reativo seja limitado pela mistura turbulenta, o uso de mecanismos de reação segundo os modelos de cinética química gasosa faz-se necessário para a região onde se estabelece a chama-piloto e o início do processo reativo. Apesar de utilizar um mecanismo de reação com apenas dois passos para descrição da cinética química, as alterações promovidas nas constantes dos modelos de taxa de reação finita e proporcional ao processo de mistura turbulenta (esse último com a taxa de formação de monóxido de carbono em função da razão de equivalência da chama-piloto) possibilitaram contornar algumas limitações da descrição do processo reativo em somente duas etapas.

Seguramente restam outras limitações do modelo, como por exemplo, prever a extinção da chama, determinada pelo limite de flamabilidade, para uma mistura muito pobre. No entanto, antes de se utilizar uma descrição mais detalhada da cinética química, o caminho mais indicado seria a coleta de um maior número de dados experimentais para confronto qualitativo e em valores absolutos com as condições estabelecidas pelo modelo, de modo a determinar com maior precisão os pontos fracos e fatores limitantes. Nesse sentido, seria aconselhável a reprodução do combustor em quartzo, de modo a permitir o acesso ótico de equipamentos de interferometria laser para levantamento dos campos de temperatura, velocidade e concentração de espécies químicas principais ao longo de todo o volume de reação.

Se tal confronto indicar a utilização de um mecanismo de reação mais detalhado, a tendência seria o uso do modelo de combustão EDC pois, no modelo de taxa de reação proporcional à mistura turbulenta, diversas etapas acabam assumindo taxas de reação próximas, o que significa que são reunidas num único passo.

Das informações fornecidas pelo modelo desenvolvido, o nível de emissões do combustor poderia ser melhorado basicamente promovendo algumas modificações geométricas para aumentar o tempo de residência do escoamento – o que, em contrapartida, significa um aumento de dimensão do equipamento – ou para intensificar o processo de mistura na zona de diluição.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] FERREIRA, M. C.; “Desenvolvimento e Caracterização de Uma Câmara de Combustão DLN – *Dry Low NO<sub>x</sub>* com Tecnologia LPP – *Lean Premixed Prevaporized*”, Dissertação de Mestrado em Ciências Mecânicas, Universidade de Brasília, 2007.
- [2] NEIVA, R. Q.; “Simulação Numérica de Câmara de Combustão Tipo LPP”, Projeto de Graduação, Universidade de Brasília, 2007.
- [3] BREWSTER, B. S.; CANNON, S. M.; FARMER, J. R. and MENG, F.; “Modeling of Lean Premixed Combustion in Stationary Gas Turbines”, *Progress in Energy and Combustion Science*, 25, p. 353-385, (1999).
- [4] JAZBEC, M.; FLETCHER, D. F. and HAYNES, B. S.; “Simulation of the Ignition of Lean Methane Mixtures Using CFD Modeling and a Reduced Chemistry Mechanism”, *Applied Mathematical Modeling*, 24, p. 689-696, (2000).
- [5] WESTBROOK, C. K. and DRYER, F. L.; “Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion”, *Progress in Energy and Combustion Science*, 10, 1 (1984).
- [6] TURRELL, M. D.; STOPFORD, P. J.; SYED, K. J. and BUCHANAN, E., “CFD Simulation of the Flow Within and Downstream of a High-Swirl Lean Premixed Gas Turbine Combustor”, *Proceedings of ASME Turbo Expo 2004, Austria*, 2004.
- [7] KIM, H. S.; ARGHODE, V. K. and GUPTA, A. K., “Combustion Characteristics of a Lean Premixed LPG-Air Combustor”, *International Journal of Hydrogen Energy*, 34, p. 1045-1053, 2009.
- [8] LEFEBVRE, A. H.; “Gas Turbine Combustion”, 2<sup>nd</sup> edition, Edwards Brothers. EUA, 1998.
- [9] TURNS, S.R.; “An Introduction to Combustion – Concepts and Applications”, 2<sup>nd</sup> edition, McGraw-Hill, EUA, 1996.



- [10] ETEMAD, S., KARIM, H., SMITH, L. L. and PFEFFERLE, W. C., “Advanced Technology Catalytic Combustor for High Temperature Ground Power Gas Turbine Applications”, *Catalysis Today*, 47, p. 305-313, (1999).
- [11] De JAGER, B., KOK, J. B. W. and SKEVIS, G., “The Effects of Water Addition on Pollutant Formation from LPP Gas Turbine Combustors”, *Proceedings of the Combustion Institute*, 31, p. 3123-3130, (2007).
- [12] MALISKA, C. R.; “Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional”, 2ª edição, LTC, Brasil, 2004.
- [13] PILLING, M. J. and SEAKINS, P. W.; “Reaction Kinetics”, Oxford Science Publications, Oxford University Press Inc., New York, 1999.
- [14] STEINFELD, J. I.; FRANCISCO, J. S. and HASE, W. L.; “Chemical Kinetics and Dynamics”, Prentice Hall, 1999.
- [15] LEVENSPIEL, O.; “Chemical Reaction Engineering”, John Wiley & Sons Inc., Tirth Edition, 1999.
- [16] SCHLICHTING, H.; “Boundary-Layer Theory”, McGraw-Hill Book Company, Sixth Edition, 1968.
- [17] HANJALIĆ, K.; “Closure Models for Incompressible Turbulent Flows”, Von Karman Institute, Lecture series, 2004.
- [18] JONES, W.P. and LAUNDER, B.E.; “The Prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 15, 1972, p.301-314
- [19] Menter, F. R., “Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications”, *AIAA Journal*, Vol. 32, No. 8, August 1994, p. 1598-1605.
- [20] SBRT, “Composição e Poder Calorífico do GLP”, Instituto Tecnológico do Paraná, 11 de Outubro de 2006. <<http://www.sbrt.ibict.br>>

[21] Fluent User's Guide, "Modeling Turbulence", RNG  $k - \varepsilon$  Model, Fluent Inc., 2006.

[22] Borghi, R., "On the Structure of Turbulent Premixed Flame", Recent Advances in Aeronautical Science, Pergamon Press, 1984.

[23] Fluent User's Guide, "Modeling Pollutant Formation", NO<sub>x</sub> Modeling in Fluent, Fluent Inc., 2006.