

ANDERSON DALL'AGNOL

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE COMBUSTÃO DE METANO
EM UM QUEIMADOR CILÍNDRICO

Monografia apresentada ao Departamento de Engenharia Mecânica da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para obtenção do diploma de Engenheiro Mecânico.

Orientador: Prof. Dr. Horácio Antonio Vielmo

Porto Alegre
2010



Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Escola de Engenharia
Departamento de Engenharia Mecânica

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE COMBUSTÃO DE METANO EM UM
QUEIMADOR CILÍNDRICO**

ANDERSON DALL'AGNOL

ESTA MONOGRAFIA FOI JULGADA ADEQUADA COMO PARTE DOS
REQUISITOS PARA A OBTENÇÃO DO DIPLOMA DE
ENGENHEIRO MECÂNICO
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELA BANCA EXAMINADORA DO
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

Prof. Walter Jesus Paucar Casas
Coordenador do Curso de Engenharia Mecânica

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. Paulo Otto Beyer
UFRGS / DEMEC

Profa. Dr. Adriane Prisco Petry
UFRGS / DEMEC

Prof. Dr. Sergio Luiz Frey
UFRGS / DEMEC

Porto Alegre
2010

AGRADECIMENTOS

Em especial agradeço aos meus pais, Gabriel e Neiri, pelo apoio incondicional durante todo o curso de graduação e por tornarem este sonho possível.

ao meu orientador, Horácio Antonio Vielmo, pela excelente orientação, por toda atenção, paciência, esclarecimentos valiosos e conhecimento compartilhado ao longo deste trabalho.

ao meu irmão e tios pela compreensão.

aos meus colegas pela amizade.

Muito obrigado.

Aquele que luta com monstros deve acautelar-se; para não tornar-se também um monstro. Quando se olha muito tempo para um abismo, o abismo olha para você.

Friedrich Nietzsche

DALL'AGNOL, A. **Simulação Numérica do Processo de Combustão de Metano em um Queimador Cilíndrico**. 2010. 20f. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso de Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2010.

RESUMO

Este trabalho consiste na simulação numérica da combustão em uma câmara cilíndrica (queimador) para um jato concêntrico de combustível e ar, usando um software comercial baseado no Método dos Volumes Finitos. O combustível em análise é metano. As reações de formação de compostos NO_x não são consideradas, assim como fenômenos de radiação. O objetivo é analisar a dinâmica dos fluidos do sistema, os perfis de temperatura e a concentração de alguns compostos como gás carbônico, oxigênio, monóxido de carbono e metano em seções estratégicas do queimador, assim como sobre seu eixo e comparar estes resultados com os obtidos experimentalmente, disponíveis na literatura. O ar entra na câmara a 36,29 m/s e o metano a 7,76 m/s. Todas as paredes do queimador estão a 393,15K. Este trabalho também discute a obtenção da independência de malha. A independência de malha é avaliada em linhas radiais localizadas sobre dois planos diferentes, que são perpendiculares ao eixo do combustor. Estes planos estão situados a 20% e a 80% do comprimento do queimador. O modelo de combustão sem pré-mistura para gás-gás é utilizado para modelar a combustão e a turbulência é resolvida através do modelo $k-\omega$ SST.

PALAVRAS-CHAVE: Câmara cilíndrica, Combustão, Método dos Volumes Finitos, Mecânica dos Fluidos Computacional (MFC).

DALL'AGNOL, A. **Numerical Simulation of Combustion of Methane in Cylindrical Burner**. 2010. 20f. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso de Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2010.

ABSTRACT

This work consists in a numerical simulation of combustion in a cylindrical chamber (burner) for a concentric jet of fuel and air using a commercial software based on Finite Volumes Method. The fuel under analysis is methane. Reactions of formation of NO_x compounds are not considered just as well as the radiation phenomena. The goal is to analyze the fluid dynamics of the system, the profiles of temperature and concentrations of some compounds such as carbon dioxide, oxygen, carbon monoxide and methane in strategic sections of the burner, as well as on its axis comparing this results with those experimentally obtained, available in the literature. The considered inlet air velocity is 36.29 m/s and 7.76 m/s for methane. All walls of the burner are at 393.15 K. This work also discusses the achieving of mesh independency. The mesh independency is evaluated on radial lines situated on two different planes which are perpendicular to the burner's axis. These plans are situated at 20% and 80% of the burner's length. The Non-Premixed Gas-Gas Combustion model is applied for modeling combustion and turbulence is solved by $k-\omega$ SST model.

KEYWORDS: Cylindrical Chamber, Combustion, Finite Volumes Method, Computational Fluid Dynamics (CFD).

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Representação esquemática em corte da câmara de combustão (Fonte: GARRÉTON; SIMONIN, 1994).....	2
Figura 2- Domínio simulado	3
Figura 3 - Independência de malha – seção situada a 20% (esquerda) e a 80% do comprimento do combustor (direita)	8
Figura 4 – Campos de velocidade axial em uma seção longitudinal para malhas de: (a) 891.721 volumes; (b) 1.454.434 volumes e (c) 1.737.436 volumes	9
Figura 5 – Campos de velocidade axial em uma seção transversal localizada a 20% do comprimento do queimador para malhas de: (a) 891.721 volumes; (b) 1.454.434 volumes e (c) 1.737.436 volumes.....	9
Figura 6 – Campos de velocidade axial em uma seção transversal localizada a 50% do comprimento do queimador para malhas de: (a) 891.721 volumes; (b) 1.454.434 volumes e (c) 1.737.436 volumes.....	9
Figura 7 – Campos de velocidade axial em uma seção transversal localizada a 80% do comprimento do queimador para malhas de: (a) 891.721 volumes; (b) 1.454.434 volumes e (c) 1.737.436 volumes.....	10
Figura 8 – Resultados de y^+ para as paredes da câmara	10
Figura 9 – (a) Temperatura ao longo do eixo; (b) Concentração de metano ao longo do eixo; (c) Concentração de oxigênio ao longo do eixo.	11
Figura 10 – (a) Concentração de dióxido de carbono ao longo do eixo; (b) Concentração de monóxido de carbono ao longo do eixo; (c) Concentração de monóxido de carbono ao longo do raio a 1,312 m da entrada.	12
Figura 11 – Distribuição de temperatura ao longo do raio a: (a) 0,312 m; (b) 0,912 m e (c) 1,312 m da entrada da câmara.	13
Figura 12 – Concentração de oxigênio ao longo do raio a: (a) 0,312 m; (b) 0,912 m e (c) 1,312 m da entrada da câmara.	14
Figura 13 – Concentração de dióxido de carbono ao longo do raio a: (a) 0,312 m; (b) 0,912 m e (c) 1,312 m da entrada da câmara.	14
Figura 14 – Vista Isométrica de uma malha representativa (15.158 volumes)	18
Figura 15 – Vista da lateral de uma malha representativa (15.158 volumes)	18
Figura 16 – Distribuição de temperatura em uma seção longitudinal da câmara de combustão: (a) Presente trabalho com swirl; (b) Presente trabalho sem swirl; (c) Nieckele et al. (2001) –	

modelo E-A com duas etapas de reação química; (d) Silva (2005) - modelo E-A com duas etapas de reação química	19
---	----

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	1
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	1
3. DESCRIÇÃO FÍSICA DO PROBLEMA.....	2
4. METODOLOGIA.....	3
5. MODELAMENTO MATEMÁTICO.....	3
5.1 Equação da Conservação de Massa.....	3
5.2 Equações da Conservação de Movimento em Coordenadas Retangulares.....	4
5.3 Equação da Energia para o Modelo de Combustão sem Pré-Mistura.....	4
5.4 O Modelo de Turbulência $k-\omega$ SST.....	5
5.5 A Função de Parede Yplus (y^+).....	6
5.6 Modelo de Combustão sem Pré-Mistura.....	7
6. TESTE DE INDEPENDÊNCIA DE MALHA.....	8
7. RESULTADOS.....	10
8. CONCLUSÕES.....	15
REFERÊNCIAS.....	16
BIBLIOGRAFIA CONSULTADA.....	16
APÊNDICE A – Malhas.....	18
APÊNDICE B – Comparativo de campos de temperatura.....	19

1. INTRODUÇÃO

O estudo do fenômeno da combustão é uma área em constante expansão devido à importância desse fenômeno para a sociedade atual. Tal fenômeno está presente em todos os setores da sociedade e é responsável, direta ou indiretamente, por grande parte da movimentação econômica mundial visto que a partir desse fenômeno pode-se gerar energia elétrica, calor para aquecimento distrital ou mesmo potência de eixo em motores. Inclusive, a matriz energética da maioria dos países do mundo é baseada na combustão através da queima de combustíveis fósseis em usinas termoelétricas, permitindo ainda a possibilidade de aquecimento distrital em regiões frias do globo e mais, o transporte de pessoas e cargas ainda utiliza essencialmente motores de combustão interna.

Em vista da ampla utilização de combustíveis fósseis não-renováveis, da importância dos processos de combustão e da poluição gerada na queima, surge a necessidade da utilização racional desses recursos. Deve-se evitar que o equipamento opere em condições inadequadas, nas quais se deixa de aproveitar uma quantidade significativa de energia (seja por recirculação do fluido ou mesmo por combustível que deixa o equipamento sem ser aproveitado). Nessas condições ocorre combustão incompleta e a formação de substâncias tóxicas e poluentes (óxidos de nitrogênio, monóxido de carbono, etc.) que prejudicam termicamente o processo. Essa racionalização de recursos pode ser feita através da utilização de modelamento computacional, que ajuda a reduzir a quantidade de combustível necessária, aumentando a eficiência dos processos de combustão. Neste contexto, a modelagem numérica computacional já é amplamente utilizada para o projeto de motores, combustores industriais, geradores de vapor e outros equipamentos que utilizam a queima de matéria orgânica para geração de energia.

Este trabalho foca-se no estudo da combustão em um queimador cilíndrico comercial de 400 kW que utiliza metano como combustível. Este tipo de equipamento é utilizado para geração de vapor em caldeiras, para fornecimento de calor para processos químicos em indústrias como a de alimentos, para tratamentos térmicos de peças metálicas e vidros, em indústrias de materiais cerâmicos, etc.

A principal justificativa para a escolha deste tema é o estudo da turbulência e da combustão associado ao uso de técnicas de modelagem numérica computacional, que vêm abrindo grande espaço para pesquisa e permitindo análises e comparações mais detalhadas de fenômenos que ainda não são totalmente compreendidos.

A intenção deste trabalho é avaliar a dinâmica dos fluidos, a transferência de calor e a concentração de alguns compostos como gás carbônico, monóxido de carbono, oxigênio e metano em seções estratégicas do queimador e comparar esses resultados com os obtidos experimentalmente, disponíveis na literatura.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Segundo Silva (2005) há modelagens que são boas para determinados casos e para outros não. Há modelagens que enfocam a cinética química envolvida no processo de combustão, mas resolvem de forma muito simplificada a mecânica do escoamento, a turbulência, a convecção de calor e a radiação térmica. Outras resolvem bem o escoamento (turbulência e convecção), além razoável atenção à cinética química do processo de combustão, mas não resolvem a transferência de calor por radiação. Há, ainda, as que apresentam pouco detalhamento tanto para a mecânica do escoamento (incluindo turbulência e convecção) e cinética química quanto para a radiação térmica no processo de combustão (SILVA, 2005).

Garréton e Simonin (1994) obtiveram resultados experimentais para um queimador cilíndrico de jatos concêntricos de ar e metano. Tais resultados são analisados em posições de interesse dentro da câmara de combustão e incluem perfil de temperatura e concentração de espécies químicas como monóxido de carbono, dióxido de carbono, oxigênio e metano.

Magel et al. (1996a) simularam numericamente o processo de combustão a gás natural em uma câmara cilíndrica axissimétrica. Seus resultados foram comparados com os experimentais obtidos por Garréton e Simonin (1994).

Magel et al. (1996b) melhoraram o detalhamento das reações químicas para processos de combustão turbulenta sem pré-mistura para a mesma geometria do seu trabalho anterior. Os resultados analisados (perfil de temperatura, concentração de monóxido de carbono, dióxido de carbono e oxigênio) concordam bem com os dados experimentais de Garréton e Simonin (1994).

Gomes et al. (1997) trabalharam no desenvolvimento de um procedimento numérico para simular combustão em fornalhas cilíndricas. Os resultados apresentados concordam bem com os disponibilizados por Garréton e Simonin (1994).

Nieckele et al. (2001) analisam a combustão em uma câmara cilíndrica utilizando o software FLUENT e comparam os resultados obtidos com os apresentados por Magel et al. (1996a). No seu trabalho, o modelo que mais se aproximou dos dados experimentais foi o de Arrhenius e Magnussen combinado com E-A (*Eddy-Breakup Arrhenius*). Os resultados obtidos são muito próximos dos experimentais.

Silva (2005) resolve a combustão em uma câmara cilíndrica e compara os dados obtidos com os experimentais de Garréton e Simonin (1994). Os dados concordam razoavelmente bem com os dados obtidos experimentalmente.

3. DESCRIÇÃO FÍSICA DO PROBLEMA

A figura 1 ilustra o combustor.

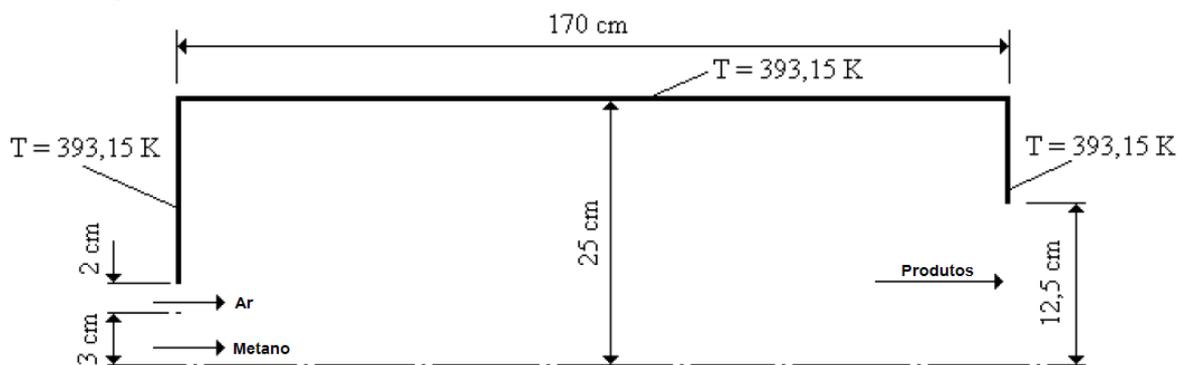


Figura 1 - Representação esquemática em corte da câmara de combustão (Fonte: GARRÉTON; SIMONIN, 1994)

Basicamente a geometria consiste em uma câmara de combustão cilíndrica onde jatos concêntricos de ar e metano são misturados e queimados para produzir calor para algum tipo de processo.

O ar é insuflado na câmara a 36,29 m/s e a 323,15 K, enquanto o combustível (metano) adentra na câmara a 7,76 m/s e a 313,15 K. O equipamento trabalha com 5% de excesso de combustível. As paredes do equipamento encontram-se a 393,15 K. As características geométricas da câmara podem ser visualizadas na figura 1. Assume-se condição de não-deslizamento nas paredes.

A geometria é a mesma que a estudada por Garréton e Simonin (1994) em seu trabalho.

4. METODOLOGIA

O problema é resolvido através do uso do Método dos Volumes Finitos, com o auxílio de um software comercial (FLUENT).

Para diminuir o esforço computacional somente parte do domínio tridimensional é simulado (condição de simetria), essa porção do domínio possui ângulo de um radiano e é representado pela figura 2. A formação de compostos NO_x e fenômenos de radiação não são considerados, por simplificação. Os parâmetros são analisados no regime permanente.

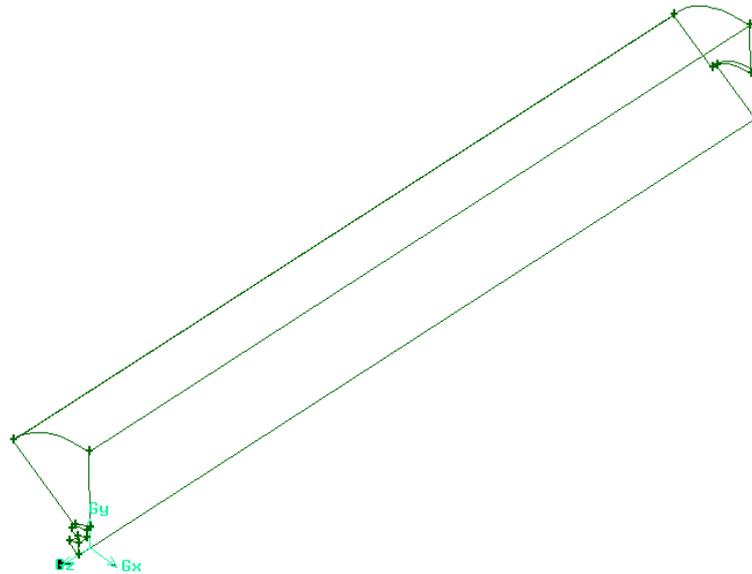


Figura 2- Domínio simulado

A turbulência é resolvida utilizando o modelo $k-\omega$ SST (*Shear-Stress Transport*). Utiliza-se *SIMPLE* como acoplamento pressão-velocidade. A discretização da pressão é feita utilizando-se o sistema *Standard*. A discretização do momentum, da energia cinética turbulenta e da taxa de dissipação específica é feita através do modelo *First Order Upwind*.

O resíduo máximo aceitável é 1×10^{-06} .

O modelamento da combustão é feito através do modelo de combustão sem pré-mistura (*Non-Premixed Combustion Model*). A composição do ar consiste de 79% de nitrogênio (N₂) e 21% de oxigênio (O₂) e a composição do gás natural é tomada como sendo 90% de metano (CH₄) e 10% de Nitrogênio (N₂). O fluido é modelado como sendo um gás perfeito incompressível. Assume-se que a viscosidade absoluta da mistura e a condutividade térmica da mistura valem $2,97 \times 10^{-5}$ N.s/m² e 0,0454 W/(m.K), respectivamente.

5. MODELAMENTO MATEMÁTICO

5.1 Equação da Conservação de Massa

O software resolve a equação abaixo (FLUENT USER'S GUIDE, 1997).

$$\nabla \cdot \rho \vec{V} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = S_m \quad (1)$$

sendo que S_m é a massa adicionada à fase contínua pela fase dispersa (devido à vaporização de gotas de líquido, por exemplo). Este termo também age como termo-fonte definido pelo usuário.

Lembrando que

$$\nabla = \hat{i} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{j} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{k} \frac{\partial}{\partial z} \quad (2)$$

onde ρ é a massa específica [kg/m³]; \vec{V} é o vetor velocidade [m/s].

5.2 Equações da Conservação de Movimento em Coordenadas Retangulares

O software resolve as equações abaixo para a conservação da quantidade de movimento, sendo que essas equações são resolvidas independentemente para cada direção (X, Y e Z) da geometria (FLUENT USER'S GUIDE, 1997).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (3)$$

onde p é a pressão estática, $\bar{\tau}$ é o tensor de tensões, $\rho \vec{g}$ e \vec{F} são a força gravitacional e forças de campo externas, respectivamente. \vec{F} também engloba outros termos-fonte dependentes do modelo, como porosidade média e termos-fonte definidos pelo usuário.

$$\bar{\tau} = \mu \left[\left(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T \right) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I \right] \quad (4)$$

onde μ é a viscosidade molecular e I é o tensor unitário. O segundo termo do lado direito representa o efeito da dilatação do volume.

5.3 Equação da Energia para o Modelo de Combustão sem Pré-Mistura

Quando o modelo de combustão sem pré-mistura não-adiabático é ativado, FLUENT resolve a forma de entalpia total da equação da energia (FLUENT USER'S GUIDE, 1997).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} H) = \nabla \cdot \left(\frac{k_t}{c_p} \nabla H \right) + S_h \quad (5)$$

Assume-se que o número de Lewis (Le) é unitário. A entalpia total é dada por:

$$H = \sum_j Y_j H_j \quad (6)$$

Y_j é a fração de massa da espécie j .

$$H_j = \int_{T_{ref,j}}^T c_{p,j} dT + h_j^0(T_{ref,j}) \quad (7)$$

onde $h_j^0(T_{ref,j})$ é a entalpia de formação da espécie j na temperatura de referência, $T_{ref,j}$.

5.4 O Modelo de Turbulência k- ω SST

Não há consenso na aceitação de uma definição para a turbulência de forma a abranger todas as suas características, entretanto escoamentos turbulentos são caracterizados por apresentarem flutuações de pressão e velocidade superpostas ao escoamento principal (MÖLLER; SILVESTRINI, 2004).

O modelo de turbulência k- ω SST (*Shear-Stress Transport*) é um modelo híbrido que é mais preciso que o modelo k- ϵ nas proximidades da parede e possui bom comportamento para gradientes moderados de pressão adversa (MENTER; KUNTZ; LANGTRY, 2003). A principal complexidade adicional na formulação deste modelo quando comparado com os modelos padrões é a necessidade de computar a distância da parede, necessária nas funções de mistura (MENTER; KUNTZ; LANGTRY, 2003). As equações resolvidas pelo software são listadas abaixo (FLUENT USER'S GUIDE, 1997).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \widetilde{G}_k - \beta^* \rho k \omega + S_k \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \omega) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + G_\omega - \beta \rho \omega^2 + 2(1 - F_1) \rho \sigma_{\omega,2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} + S_\omega \quad (9)$$

onde S_k e S_ω são termos-fontes definidos pelo usuário e a função de mistura F_1 é dada por:

$$F_1 = \tanh \left\{ \left\{ \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500 \mu}{\rho y^2 \omega} \right), \frac{4 \rho k}{\sigma_{\omega,2} D_\omega^+ y^2} \right] \right\}^4 \right\} \quad (10)$$

sendo que y é a distância até a parede mais próxima.

Neste modelo, F_1 é igual a zero afastado da superfície, tornando-se o modelo k- ϵ no interior da geometria, e seu valor muda e fica maior que um dentro da camada limite tornando-se o modelo k- ω (MENTER; KUNTZ; LANGTRY, 2003).

$$D_\omega^+ = \max \left(2 \rho \frac{1}{\sigma_{\omega,2}} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 10^{-10} \right) \quad (11)$$

A viscosidade turbulenta é definida por:

$$\mu_t = \frac{\rho k}{\omega} \frac{1}{\max \left[\frac{1}{\alpha^*}, \frac{S F_2}{a_1 \omega} \right]} \quad (12)$$

$$\alpha^* = \alpha_\infty^* \left(\frac{0.024 + \frac{\rho k}{6 \mu \omega}}{1 + \frac{\rho k}{6 \mu \omega}} \right) \quad (13)$$

onde S é a magnitude da taxa de deformação e F_2 é a segunda função de mistura.

$$F_2 = \tanh \left[\left[\max \left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500\mu}{\rho y^2 \omega} \right) \right]^2 \right] \quad (14)$$

Os números de Prandtl turbulento para k e para ω são dados respectivamente por:

$$\sigma_k = \frac{1}{\frac{F_1}{\sigma_{k,1}} + \frac{1-F_1}{\sigma_{k,2}}} \quad (15)$$

$$\sigma_\omega = \frac{1}{\frac{F_1}{\sigma_{\omega,1}} + \frac{1-F_1}{\sigma_{\omega,2}}} \quad (16)$$

O modelo SST utiliza um limitador de produto para prevenir o desenvolvimento de turbulência em regiões de estagnação:

$$G_k = \mu_t \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \rightarrow \widetilde{G}_k = \min(G_k, 10 \cdot \beta^* \rho k \omega) \quad (17)$$

$$G_\omega = \frac{\alpha}{\nu t} G_k \quad (18)$$

onde \widetilde{G}_k representa a geração de energia cinética devido a gradientes de velocidade média. E G_ω representa a geração de ω .

As constantes adotadas neste modelo valem: $\beta^* = 0,09$; $a_1 = 0,31$; $\sigma_{k,1} = 1.176$; $\sigma_{\omega,1} = 2,0$; $\alpha_2 = 0,44$; $\beta_2 = 0,0828$; $\sigma_{k,2} = 1$ e $\sigma_{\omega,2} = 1.168$.

5.5 A Função de Parede Yplus (y^+)

O escoamento do fluido junto à região de parede é analisado através do parâmetro adimensional **yplus** (y^+) que é definido como (FLUENT USER'S GUIDE, 1997):

$$y^+ = \frac{\rho u_\tau y_p}{\mu} \quad (19)$$

onde y_p é a distância do ponto P até a parede, ρ é a densidade do fluido e μ é a viscosidade do fluido no ponto P.

Sendo que a velocidade de fricção é calculada por:

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho_w}} \quad (20)$$

Segundo Freire¹ (2002, apud SILVA, 2005) espera-se que o valor deste adimensional fique na faixa de valores entre trinta e duzentos ($30 < y^+ < 200$). É sabido que se o valor de y^+ é inferior a trinta ($y^+ < 30$), os efeitos viscosos e turbulentos são de mesma ordem de magnitude e o perfil de velocidades deve ser ajustado, agora, se o seu valor é superior a duzentos ($y^+ > 200$), a variação de velocidades não depende mais somente dos parâmetros ligados à parede sólida, mas também de efeitos dinâmicos da camada limite como um todo (FREIRE et al., 2002).

O Fluent User's Guide (1997) recomenda que o adimensional y^+ não seja inferior a trinta e nem superior a trezentos ($30 < y^+ < 300$), sendo que valores mais próximos ao limite inferior são mais desejáveis.

5.6 Modelo de Combustão sem Pré-Mistura

O modelo de combustão sem pré-mistura (*Non-Premixed Combustion Model*) foi adotado, pois possui um acoplamento rigoroso entre turbulência e reações químicas através de uma função de densidade de probabilidade (PDF). Este modelo foi desenvolvido para a simulação de chamas onde as reações químicas ocorrem rapidamente.

Neste modelo a combustão é simplificada para um problema de mistura, evitando a necessidade da resolução de equações não-lineares. Uma vez misturada, a parte química pode ser modelada como estando em equilíbrio. O método considera que concentrações de espécies químicas são derivadas de campos previstos de fração de mistura.

Como hipótese, o método assume que as difusividades são iguais, então as equações de espécies químicas podem ser reduzidas a uma única equação para a fração de mistura. A hipótese de difusividades iguais é aceitável para escoamentos turbulentos onde a convecção turbulenta se sobrepõe à difusão molecular. As equações seguintes são resolvidas e são, respectivamente, a equação de Favre para a fração de mistura média e a equação de conservação para a variância da fração de mistura (FLUENT USER'S GUIDE, 1997):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{f}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \bar{f}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \bar{f} \right) + S_m + S_{user} \quad (21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \overline{f'^2}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \overline{f'^2}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \overline{f'^2} \right) + C_g \mu_t (\nabla \bar{f})^2 - C_d \rho \frac{\epsilon}{k} \overline{f'^2} + S_{user} \quad (22)$$

onde $\sigma_t = 0,85$; $C_g = 2,86$; $C_d = 2,0$ e ainda:

$$f' = f - \bar{f} \quad (23)$$

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,OX}}{Z_{i,FUEL} - Z_{i,OX}} \quad (24)$$

onde Z_i é a fração de massa elementar para o elemento i . Os subíndices OX e FUEL representam, respectivamente, o comburente e o combustível. f é a fração de mistura.

¹ FREIRE, A. P. S., MENUT, P. P. M. e Su, J. **Turbulência**. Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Ciências Mecânicas - ABCM – Vol. 1, 2002 apud SILVA, C. V. da. Simulação Numérica da Combustão Turbulenta de Gás Natural em Câmara Cilíndrica. Tese para obtenção de título de doutor em Engenharia Mecânica. Porto Alegre, Brasil, 2005.

A função densidade de probabilidade é calculada segundo a equação abaixo (FLUENT USER'S GUIDE, 1997).

$$p(f) \Delta f = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_i \tau_i \quad (25)$$

sendo T a escala de tempo e τ_i o tempo que f gasta na faixa de Δf .

6. TESTE DE INDEPENDÊNCIA DE MALHA

As malhas analisadas são uniformes e os volumes são exclusivamente hexaédricos. A independência de malha é analisada com o jato de ar entrando paralelamente ao eixo da geometria e sem componentes tangenciais de velocidade (*swirl*).

A independência de malha é analisada sobre duas linhas distintas. Uma das linhas fica sobre uma seção transversal localizada a 20% do comprimento da câmara (em relação ao plano de entrada dos gases) e a outra linha fica sobre uma seção localizada a 80% do comprimento do queimador. Essas linhas possuem direção radial. Comparam-se os perfis de velocidade axial de diferentes malhas na direção radial para a obtenção da malha independente. Também são comparados os campos de velocidade em uma seção longitudinal e em seções transversais a 20%, 50% e 80% do comprimento do equipamento.

Os valores de velocidade são negativos próximo ao eixo do combustor ($y=0$) porque o eixo Z do mesmo possui orientação negativa desenvolvendo-se ao longo do seu comprimento. Áreas que apresentam velocidade com sinal positivo representam recirculação da mistura de fluidos.

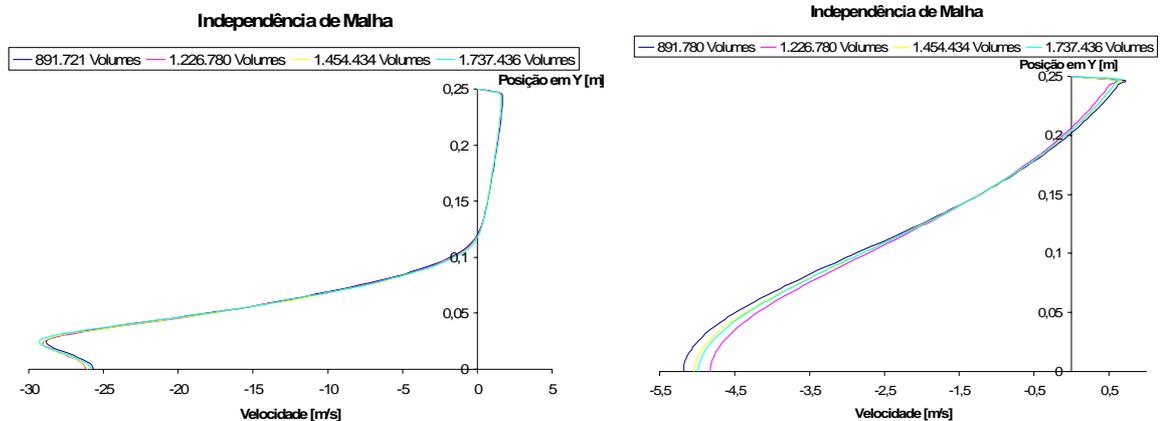


Figura 3 - Independência de malha – seção situada a 20% (esquerda) e a 80% do comprimento do combustor (direita)

Os resultados da independência de malha discordam em menos de 1,6% para as malhas de 1.454.434 volumes e 1.737.436 volumes, portanto pode-se considerar que a malha de 1.454.434 volumes é independente de refino de malha, admitindo-se que se pode tolerar o percentual de diferença de velocidades apresentado.

A comparação dos perfis de velocidade ao longo do eixo Z é representada nas figuras abaixo.

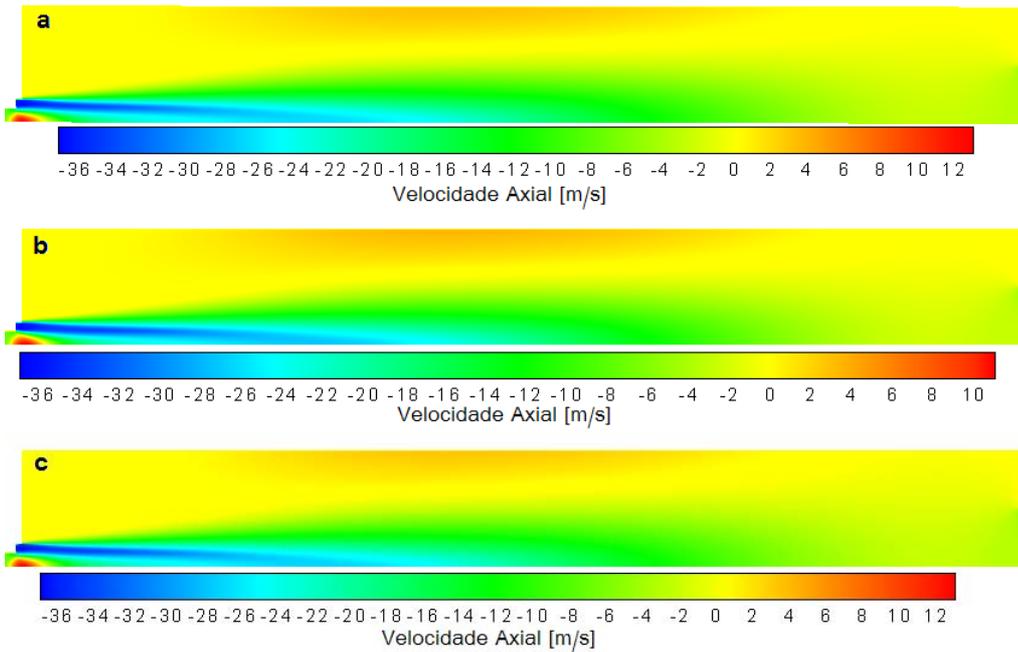


Figura 4 – Campos de velocidade axial em uma seção longitudinal para malhas de: (a) 891.721 volumes; (b) 1.454.434 volumes e (c) 1.737.436 volumes

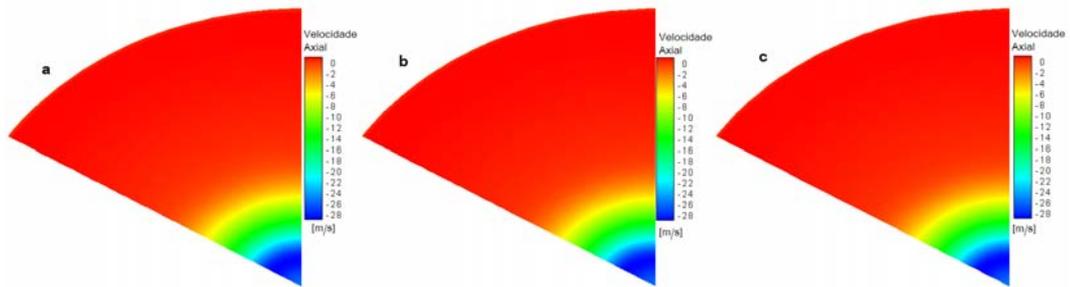


Figura 5 – Campos de velocidade axial em uma seção transversal localizada a 20% do comprimento do queimador para malhas de: (a) 891.721 volumes; (b) 1.454.434 volumes e (c) 1.737.436 volumes

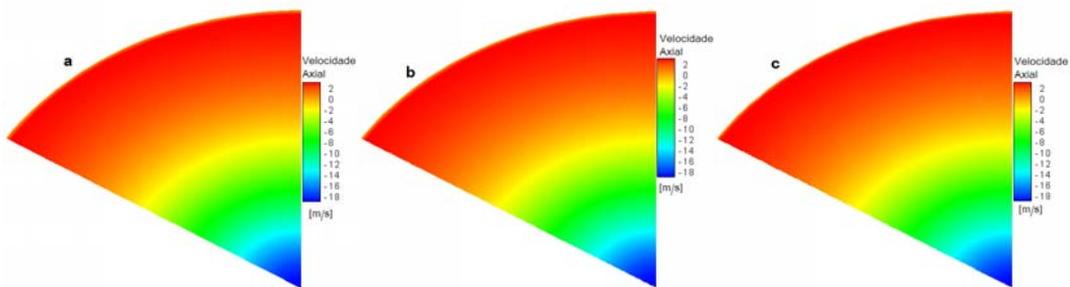


Figura 6 – Campos de velocidade axial em uma seção transversal localizada a 50% do comprimento do queimador para malhas de: (a) 891.721 volumes; (b) 1.454.434 volumes e (c) 1.737.436 volumes

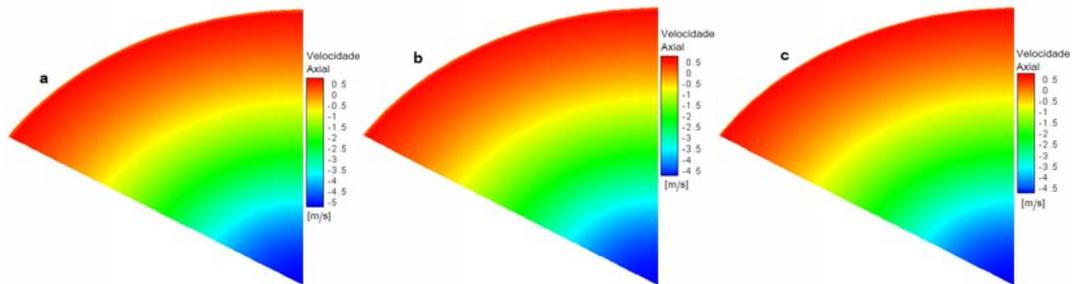


Figura 7 – Campos de velocidade axial em uma seção transversal localizada a 80% do comprimento do queimador para malhas de: (a) 891.721 volumes; (b) 1.454.434 volumes e (c) 1.737.436 volumes

Visualmente, pode-se considerar que os campos de velocidade axial das figuras acima não diferem.

Os valores de y^+ analisados nas paredes da câmara para a malha independente variaram de um mínimo de 1,252 para a entrada da câmara e um máximo de 53,558 para uma seção localizada a 0,548 m da entrada da mesma. A média do parâmetro adimensional Y_{plus} é 39,484.

A figura abaixo mostra os valores de y^+ para uma linha paralela ao eixo e situada ao longo da parede do combustor.

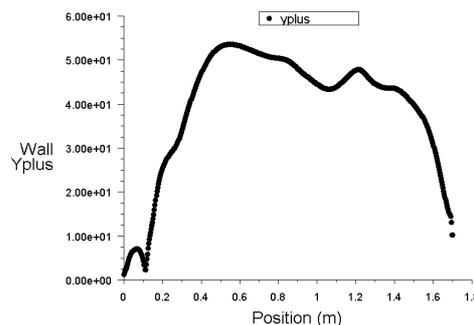


Figura 8 – Resultados de y^+ para as paredes da câmara

Observa-se, pela figura acima que os valores de y^+ inferiores a trinta ($y^+ < 30$) localizam-se nas proximidades da entrada ($Z=0$) e saída ($Z=1,7$) da câmara, onde ocorre recirculação. Assume-se que os valores alcançados são satisfatórios visto que valores de y^+ inferiores a trinta ocorrerem em regiões onde há recirculação e pouca turbulência.

7. RESULTADOS

São analisadas a concentração de metano, oxigênio, monóxido de carbono e dióxido de carbono, assim como a distribuição de temperatura ao longo do eixo do combustor e ao longo do raio em seções localizadas a 0,312 m, a 0,912 m e a 1,312 m da entrada da câmara. São analisadas duas situações para a entrada de ar:

- Entrada de ar com direção paralela ao eixo;
- Entrada de ar com Swirl – neste caso o ar entra rotacionando na câmara sendo que o ar entra com uma velocidade tangencial correspondente a 20% da velocidade axial. Este tipo de escoamento pode ser obtido industrialmente através da utilização de estatores que otimizam a mistura ar-combustível.

Os dados obtidos através da simulação são comparados com os dados experimentais disponibilizados por Garréton e Simonin (1994) e com os resultados obtidos numericamente por Silva (2005) utilizando o modelo E-A (*Eddy-Breakup Arrhenius*) com duas etapas globais de reação química.

Percebe-se pela figura 9-a, que o ponto de ignição obtido neste trabalho ocorre antes do real, ensaiado por Garréton e Simonin (1994). Como consequência toda a predição de formação de espécies químicas fica prejudicada (combustão inicia em um ponto diferente da câmara, portanto há formação de compostos, como dióxido de carbono e outros, em regiões onde não haveria originalmente). Este “adiantamento” do ponto de ignição é resultado da utilização do modelo de combustão escolhido que assume reação química instantânea e inicia a combustão tão logo os fluidos penetrem na câmara, ocasionando temperaturas elevadas nas proximidades da entrada da câmara. Deve-se perceber que diferenças entre os campos de temperatura real e simulada eram esperadas devido ao fato de o modelamento não levar em consideração efeitos de radiação, entretanto diferenças dessa magnitude não são causadas apenas pela inexistência de modelamento de radiação.

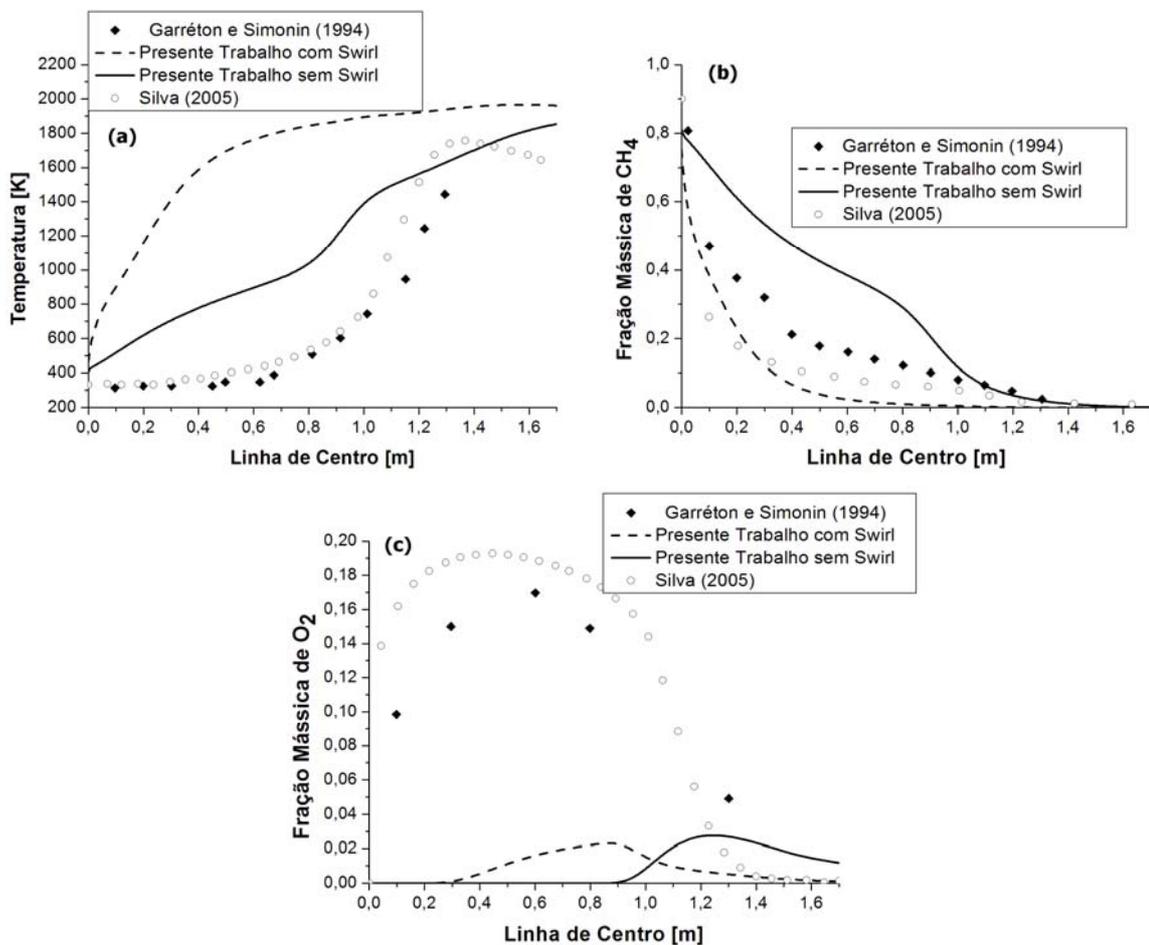


Figura 9 – (a) Temperatura ao longo do eixo; (b) Concentração de metano ao longo do eixo; (c) Concentração de oxigênio ao longo do eixo.

A figura 9-b compara a concentração de metano ao longo do eixo. Os dados obtidos através da simulação com swirl concordam quantitativamente bem com os resultados experimentais e com os apresentados por Silva (2005). A simulação que não apresenta swirl não apresenta dados concordantes com a literatura.

A figura 9-c mostra a concentração de oxigênio ao longo do eixo da câmara. Os resultados obtidos em ambos os casos estudados não concordam bem com os disponíveis na literatura e o principal motivo é o início precoce da combustão.

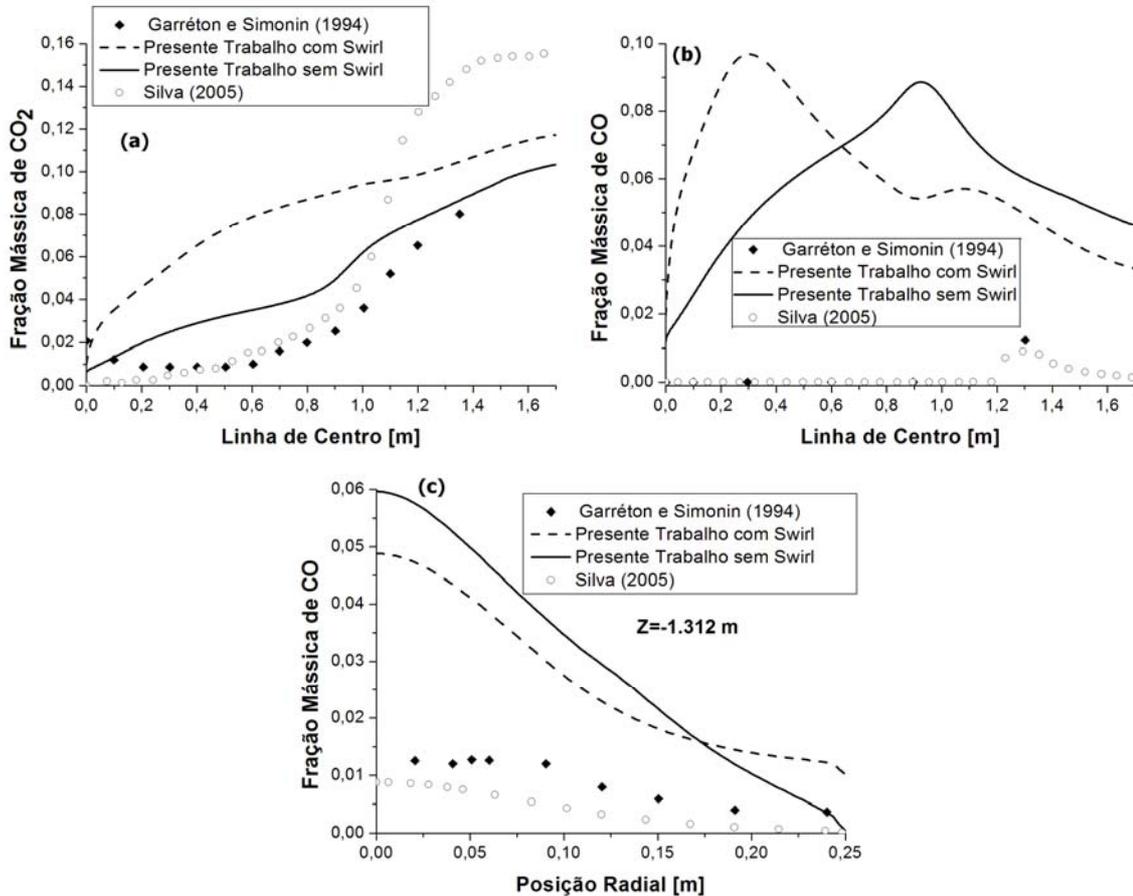


Figura 10 – (a) Concentração de dióxido de carbono ao longo do eixo; (b) Concentração de monóxido de carbono ao longo do eixo; (c) Concentração de monóxido de carbono ao longo do raio a 1,312 m da entrada.

Conforme as figuras 10-a, 10-b e 10-c, os dados obtidos neste trabalho não concordam bem com os disponíveis na literatura, entretanto Silva (2005) consegue concordância razoável com os dados experimentais.

As concentrações elevadas de CO₂ no início da câmara (figura 10-a) podem ser explicadas pelo adiantamento do ponto de combustão. O mesmo ocorre na figura 10-b para o monóxido de carbono ao longo do eixo, entretanto o modelamento químico superestima a concentração e a formação de CO na câmara, como pode ser visto nas figuras 10-b e 10-c. A figura 10-c ilustra a concentração de monóxido de carbono ao longo do raio em uma seção localizada a 1,312 m da entrada do combustor.

A figura 11-a representa a temperatura ao longo do raio em uma seção localizada a 0,312 m da entrada do queimador, devido ao adiantamento da combustão pode-se perceber um pico de temperatura localizado nas proximidades do eixo do equipamento. Este pico é a chama formada na combustão. Percebe-se que para Garréton e Simonin não existe este pico e a temperatura sobe em regiões um pouco mais afastadas do eixo, indicando uma “cápsula” de metano envolta por ar. A combustão ocorre exatamente na interface entre ar e metano. A existência desta interface denuncia uma carência de mistura entre combustível e comburente

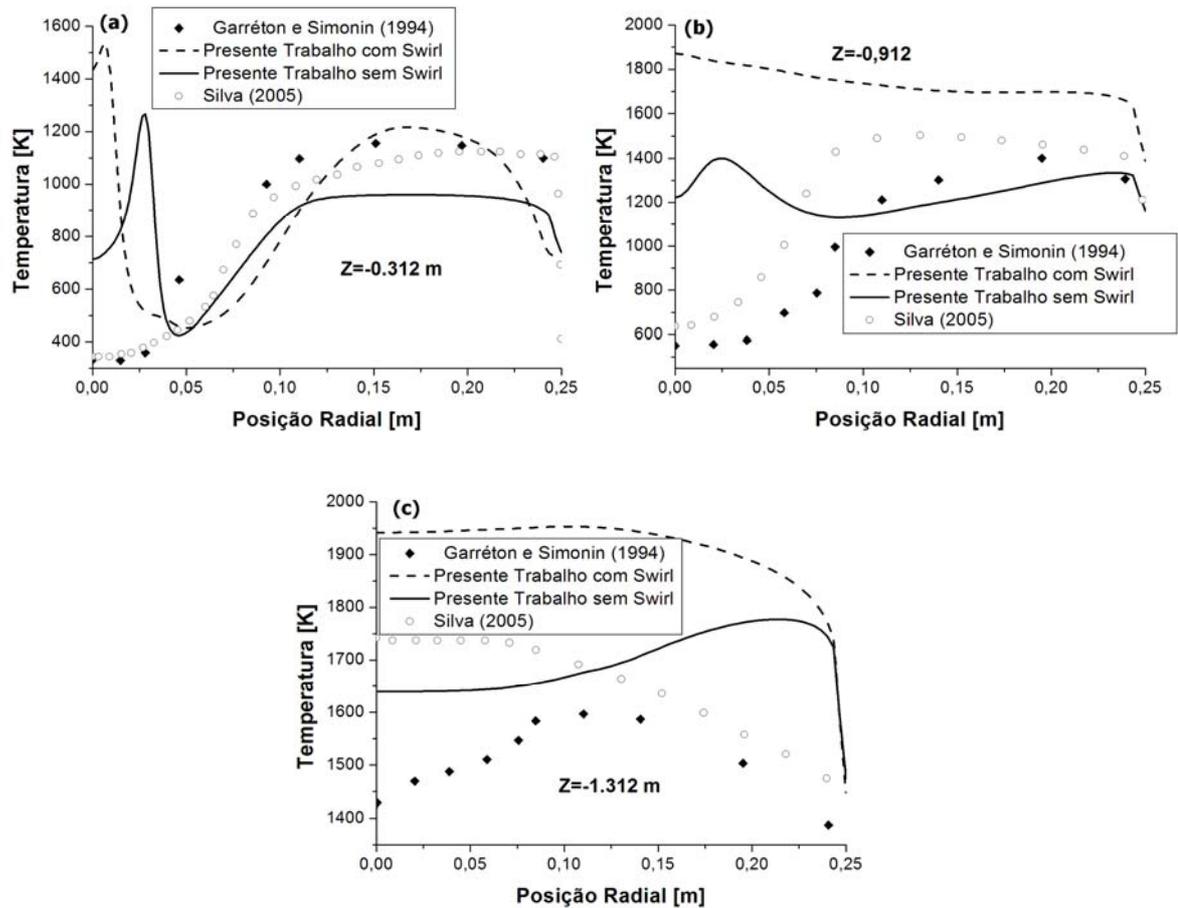
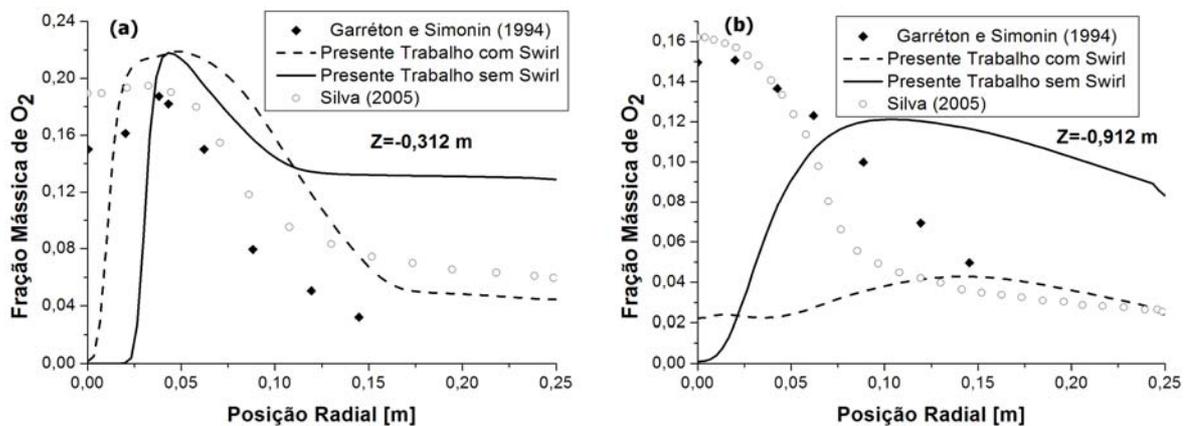


Figura 11 – Distribuição de temperatura ao longo do raio a: (a) 0,312 m; (b) 0,912 m e (c) 1,312 m da entrada da câmara.

no interior da câmara. O mesmo fenômeno pode ser observado com menor intensidade a 0,912 m da entrada do equipamento, como demonstra a figura 11-b. A 1,312 m da admissão dos gases, as temperaturas encontram-se mais homogeneizadas tanto para o presente trabalho quanto para os dados experimentais – figura 11-c. Os dados apresentados por Silva (2005) conseguem captar a tendência do campo de temperatura, mas falham ao representá-lo adequadamente.



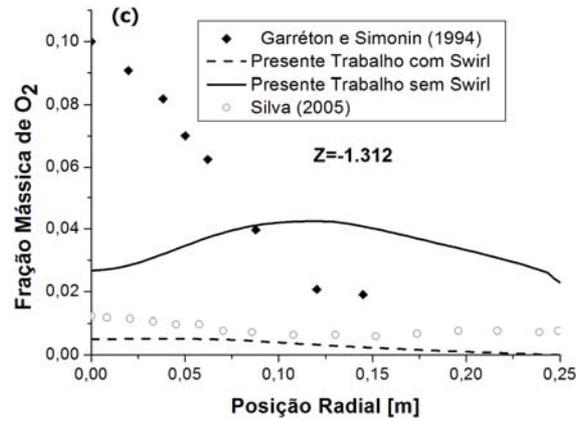


Figura 12 – Concentração de oxigênio ao longo do raio a: (a) 0,312 m; (b) 0,912 m e (c) 1,312 m da entrada da câmara.

A concentração de oxigênio não apresenta bons resultados, como pode ser visto nas figuras 12 (a, b e c). Silva (2005) apresenta resultados aceitáveis para distribuição de oxigênio ao longo da direção radial em seções localizadas a 0,312 e 0,912 m da entrada da câmara (figuras 12-a e 12-b, respectivamente), contudo os resultados para 1,312 m da admissão fica bastante distante dos dados experimentais de Garréton e Simonin (1994), porém concordam razoavelmente com os obtidos neste trabalho com a utilização de swirl para o ar – figura 12-c.

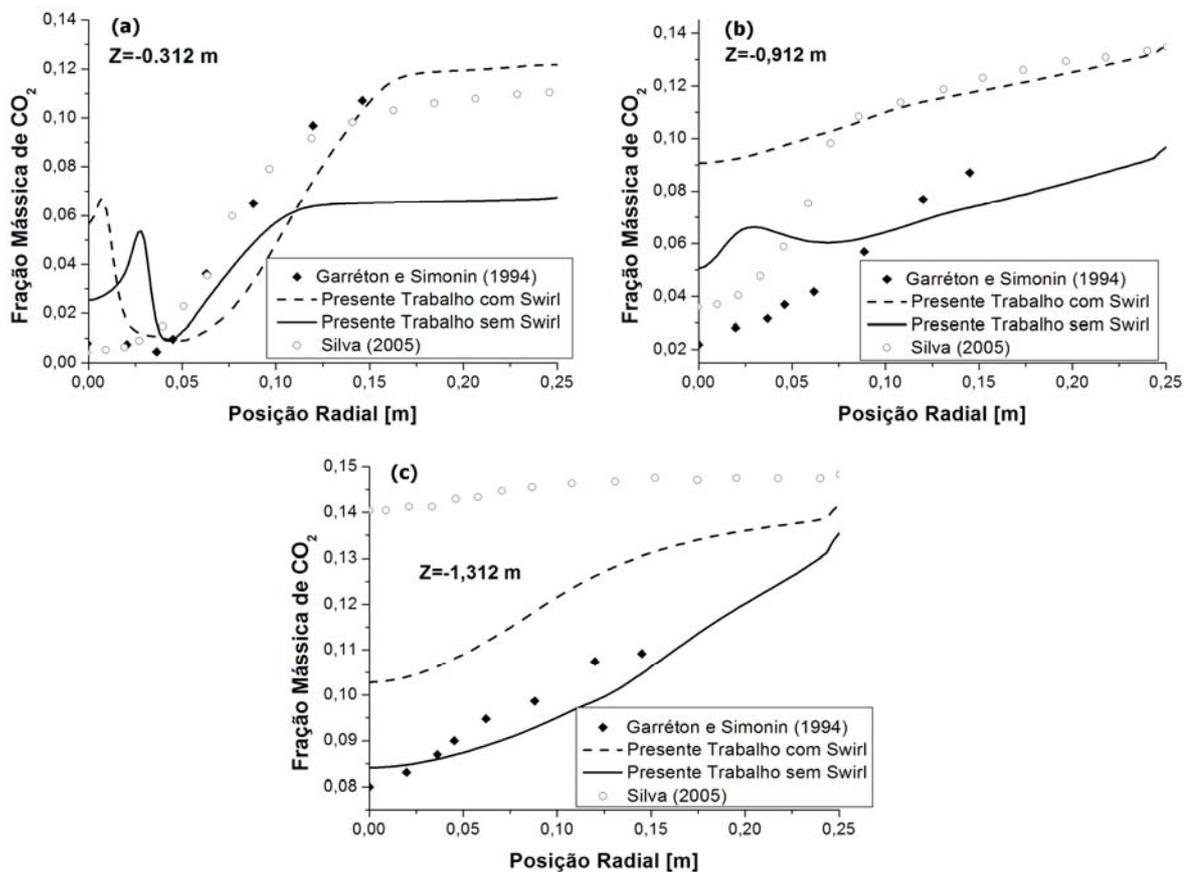


Figura 13 – Concentração de dióxido de carbono ao longo do raio a: (a) 0,312 m; (b) 0,912 m e (c) 1,312 m da entrada da câmara.

A figura 13-a denuncia o que foi anteriormente dito, mostrando que para Garréton e Simonin ocorre o encapsulamento do metano, que somente queima na interface com o ar para a formação de dióxido de carbono, evidenciando falta de mistura ar-combustível. Já no presente trabalho há um aumento na concentração de metano nas proximidades do eixo, deixando evidente que esse fenômeno de encapsulamento não pôde ser reproduzido adequadamente. Na figura 13-b, para Garréton e Simonin, percebe-se que já há um aumento na concentração de CO_2 denunciando combustão nas proximidades do eixo e uma mistura entre ar e combustível melhor. Ainda nesta figura, os resultados obtidos não concordam bem com os experimentais, mas a situação que considera swirl concorda bem com os valores de Silva (2005) para distâncias do eixo superiores a 0,10 m e pode-se dizer que esta curva segue a tendência dos dados experimentais, entretanto superestimando a formação de CO_2 .

8. CONCLUSÕES

Este estudo foi desenvolvido com objetivo de modelar a combustão no interior de uma câmara cilíndrica, com a finalidade de compreender melhor os fenômenos de combustão e turbulência. Para a modelagem da turbulência e da combustão foram utilizados, respectivamente, os modelos $k-\omega$ SST e de combustão sem pré-mistura, cujo acoplamento entre reações químicas e turbulência é baseado em uma função densidade de probabilidade (PDF). O fenômeno de radiação, assim como a formação de compostos NO_x não foram levados em consideração. As equações foram resolvidas através do Método dos Volumes Finitos. A independência de malha apresentou variação de no máximo 1,6% na comparação dos campos de velocidade.

Os resultados obtidos não concordam bem com os dados experimentais de Garréton e Simonin (1994) e concordam razoavelmente bem com os dados obtidos numericamente por Silva (2005). A discrepância dos resultados deve-se principalmente ao modelo de combustão adotado que assume reações químicas instantâneas, dessa forma a combustão ocorre em um ponto do eixo mais próximo da admissão do que ela realmente deveria acontecer. Quando o ponto de início de combustão é adiantado, todos os campos de concentração de espécies químicas são alterados, gerando as discrepâncias observadas. Por não levar em consideração fenômenos de radiação, os campos de algumas espécies e principalmente o campo de temperaturas podem apresentar desvios dos perfis reais.

Conforme Silva (2005, p. vi), quando a radiação térmica é considerada em um combustor cilíndrico queimando metano, efeitos de extinção local da chama são verificados nas regiões de temperatura mais elevada, diminuindo o consumo de oxigênio e aumentando a produção de monóxido de carbono, caracterizando assim uma combustão incompleta. Em algumas situações tem-se uma variação de temperatura de até 500K, a montante da chama. A radiação térmica também aumenta a taxa de transferência de calor dos gases quentes para as paredes da câmara e desta para o seu exterior. Esse fenômeno também causa uma homogeneização da temperatura dos gases no interior da câmara.

No caso real ocorre o fenômeno de encapsulamento de metano. Este encapsulamento é fruto de uma deficiência na capacidade de mistura entre o combustível e o comburente. Disto decorre que a combustão somente é verificada na interface entre ar e metano até que não ocorra a dispersão do fenômeno. Isto faz com que a temperatura ao longo do eixo conserve-se menor pois não ocorrem reações químicas nesta região enquanto persistir o encapsulamento.

Trabalhos futuros podem utilizar um modelo de combustão e cinética química diferente, onde não ocorram reações químicas instantâneas e a utilização de um pacote de cinética química, como CHEMKIN, por exemplo. Pode-se inserir na análise o fenômeno de radiação e formação de compostos NO_x .

REFERÊNCIAS

FLUENT. **Fluent User's Guide**. Fluent Incorporated, New Hampshire, 1997.

FREIRE, A. P. S., MENUT, P. P. M. e SU, J. **Turbulência**. Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Ciências Mecânicas - ABCM – Vol. 1, 2002.

GARRÉTON, D. e SIMONIN, O. **Final results**. First Workshop of Aerodynamics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces, Vol. 25, pp 29-35, EDF-ERCOFTAC. 1994.

GOMES, M. S. P., NIECKELE, A. O., NACCACHE, M. F. e KOBAYASHI, W. T. **Numerical investigation of the oxygen enriched combustion process in a cylindrical furnace**. IV International Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment. Lisboa, Portugal, 1997.

MAGEL, H. C., SCHNELL, U. e HEIN, K. R. G. **Modeling of hydrocarbon and nitrogen chemistry in turbulent combustor flows using detailed reaction mechanisms**. 3rd Workshop on Modeling of Chemical Reaction Systems. Heidelberg, 1996a.

MAGEL, H. C., SCHNELL, U. e HEIN, K. R. G. **Simulation of detailed chemistry in a turbulent combustor flow**. Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute pp. 67–74, 1996b.

MENTER, F.R., KUNTZ, M., LANGTRY, R. **Ten years of industrial experience with the SST Turbulence Model**. Turbulence, Heat and Mass Transfer 4. Otterfing, Germany, 2003.

MÖLLER, S. V. e SILVESTRINI, J. H. **Turbulência**. Vol.4. Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Engenharia e Ciências Mecânicas, 2004.

NIECKELE, A. O., NACCACHE, M. F., GOMES, M. S. P., CARNEIRO, J. E. e SERFATY, R. **Evaluation of models for combustion processes in a cylindrical furnace**. ASME-IMECE, International Conference of Mechanical Engineering, New York, 2001.

SILVA, C. V. da. **Simulação Numérica da Combustão Turbulenta de Gás Natural em Câmara Cilíndrica**. Tese para obtenção de título de doutor em Engenharia Mecânica. Porto Alegre, Brasil, 2005.

BIBLIOGRAFIA CONSULTADA

FOX, W. R. e MCDONALD, A. T. **Introdução à Mecânica dos Fluidos**. 4.ed. Rio de Janeiro: LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 1998.

GARRÉTON, D. e SIMONIN. **Report of activities, in ERCOFTAC (ed.)**. Aerodynamics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces, Vol. 25, pp 29-35. Lausanne, France, 1995.

INCROPERA, F. P. e DEWITT, D. P. **Fundamentals of Heat and Mass Transfer**. 5.ed. New York: John Willey & Sons, 2002.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. Rio de Janeiro: LTC: Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 1995.

MENTER, F. R. **Zonal two equation k - ω turbulence models for aerodynamic flows**. AIAA Paper 1993-2906, 1993.

MENTER, F. R. **Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications**. AIAA Journal, 32(8), pp. 1598-1605. 1994.

MENTER, F.R. **Influence of freestream values on k - ω turbulence model predictions**. AIAA Journal, 30(6), technical notes, pp.1657-1659.

NIECKELE, A. O., NACCACHE, M. F., GOMES, M. S. P., CARNEIRO, J. E. e SERFATY, R. **Evaluation of models for combustion processes in a cylindrical furnace**. ASME-IMECE, International Conference of Mechanical Engineering, New York, 1996b.

PATANKAR, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. New York: Hemisphere, 1980.

VAN WYLEN, G. J., SONNTAG, E. R. e BORNAKE, C. **Fundamentos da Termodinâmica**. 5.ed. Editora Edgard Blücher Ltda, 1998.

VERSTEEG, H. e MALALASEKERA. **Introduction to Computational Fluid Dynamics**. Longman Scientific & Technical, 1995.

WILCOX, D. C. **Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models**. AIAA Journal, 26(11), pp. 1299-1310, 1988.

WILCOX, D. C. **Comparison of two-equation turbulence models for boundary layers with pressure gradient**. AIAA Journal, 31(8), pp. 1414-1421, 1993.

APÊNDICE A – Malhas

As oito malhas estudadas na obtenção da independência de malha são formadas de volumes hexaédricos uniformes. As malhas possuem:

- 6.930 volumes;
- 59.482 volumes;
- 418.564 volumes;
- 704.730 volumes;
- 891.721 volumes;
- 1.224.780 volumes;
- 1.454.434 volumes;
- 1.737.436 volumes.

Os resultados das menores malhas não são apresentados no texto a fim de evitar a poluição visual dos gráficos.

As figuras abaixo representam o tipo de malha utilizada. Cabe salientar que a malha mostrada abaixo não foi testada. Essa malha possui 15.158 volumes e serve somente para a visualização do tipo de malha.

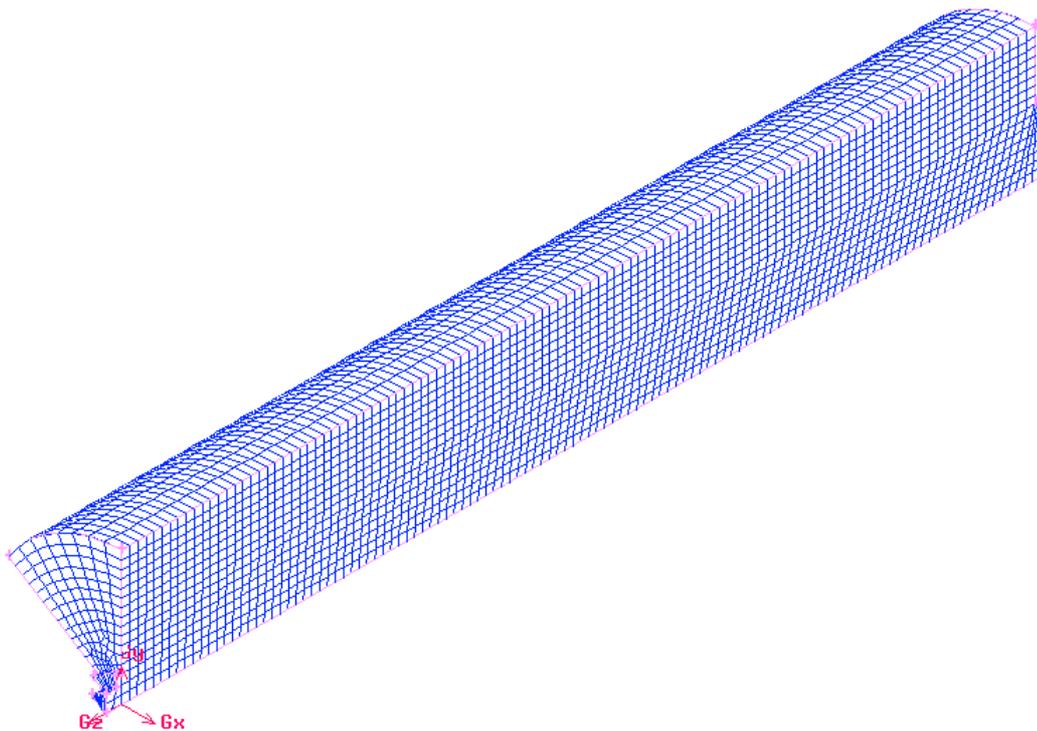


Figura 14 – Vista Isométrica de uma malha representativa (15.158 volumes)

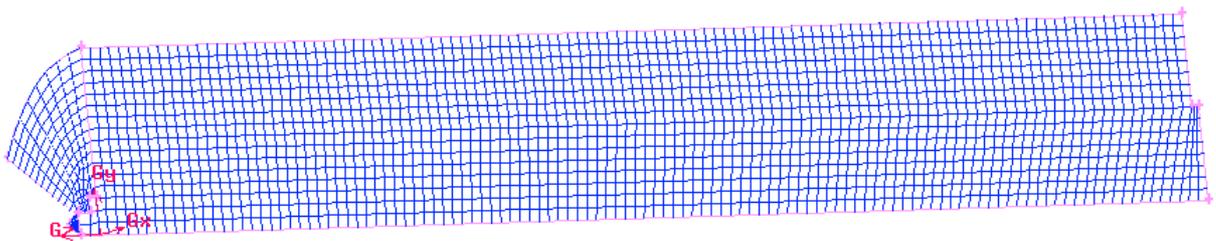


Figura 15 – Vista da lateral de uma malha representativa (15.158 volumes)

APÊNDICE B – Comparativo de campos de temperatura

A figura abaixo faz um comparativo entre os campos de temperatura obtidos neste trabalho e os disponibilizados por Nieckele et al. (2001) e Silva (2005).

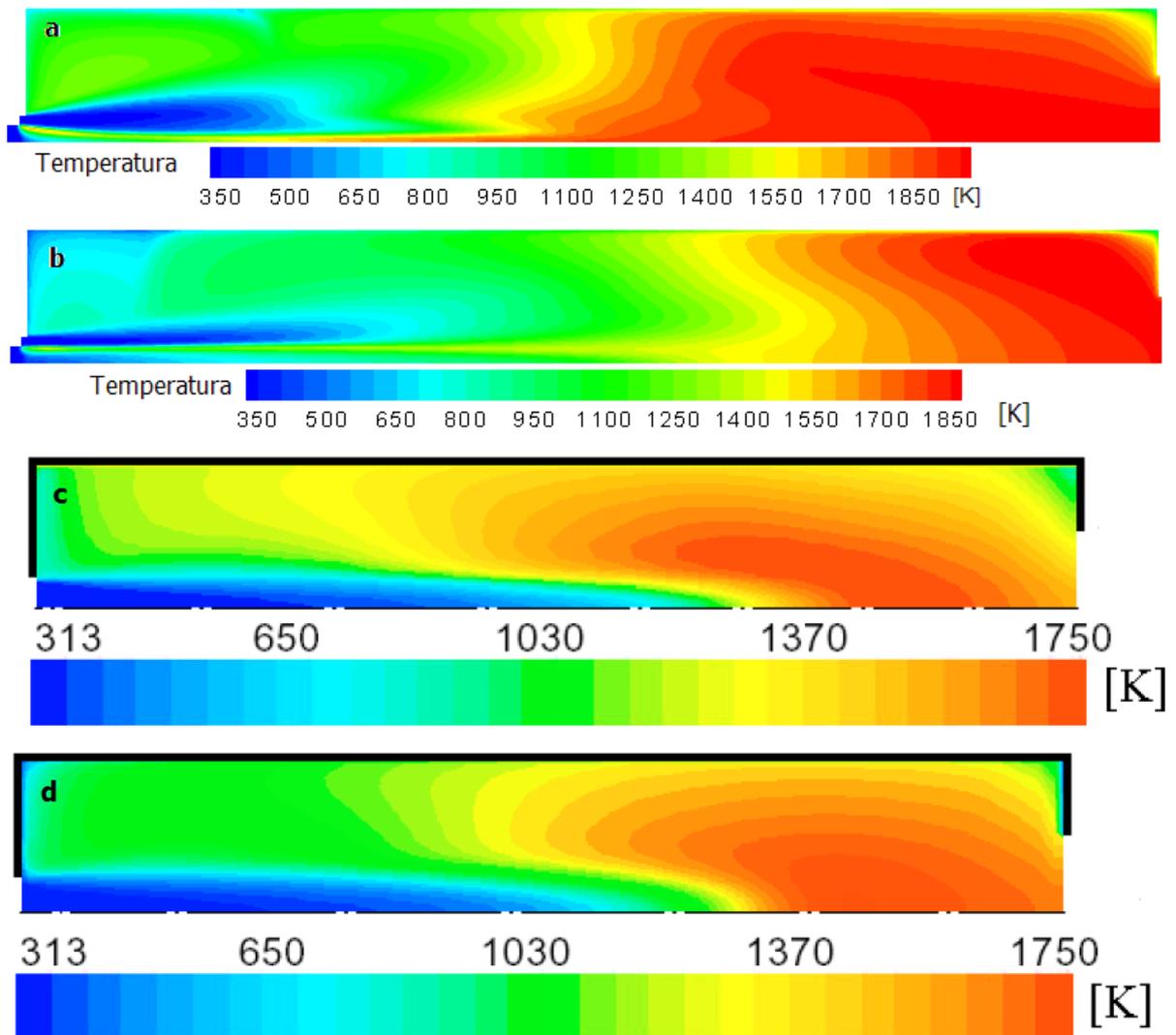


Figura 16 – Distribuição de temperatura em uma seção longitudinal da câmara de combustão: (a) Presente trabalho com swirl; (b) Presente trabalho sem swirl; (c) Nieckele et al. (2001) – modelo E-A com duas etapas de reação química; (d) Silva (2005) - modelo E-A com duas etapas de reação química

Observa-se que as distribuições de temperatura obtidas neste trabalho diferenciam-se das apresentadas por Silva (2005) e Nieckele et al. (2001). O principal motivo é o modelo de combustão empregado que considera reações instantâneas, adiantando o ponto de início de combustão. Também se observa que as reações, neste trabalho, iniciam na interface entre ar e metano e que para o caso onde há swirl esta interface é deslocada, aproximando-se do eixo.