

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

MODELAGEM NUMÉRICA DO ESCOAMENTO REATIVO COM ROTAÇÃO EM UMA
FORNALHA CILÍNDRICA

por

José Luis Potrich Anapolski

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia Mecânica

Porto Alegre, Maio 2015

MODELAGEM NUMÉRICA DO ESCOAMENTO REATIVO COM ROTAÇÃO EM UMA
FORNALHA CILÍNDRICA

por

José Luis Potrich Anapolski
Engenheiro Mecânico

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Thamy Cristina Hayashi

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Maria Luiza Sperb Indrusiak, ESCOLA POLITÉCNICA / UNISINOS

Prof. Dr. Adriane Prisco Petry, PROMEC / UFRGS

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira, PROMEC / UFRGS

Prof. Dr. Luiz Alberto O. Rocha
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 27, Maio 2015

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer a Capes pela concessão da bolsa, a qual permitiu desenvolver o trabalho sobre melhores condições, contribuindo no desenvolvimento pessoal e profissional. À minha orientadora, Prof. Thamy, por confiar um assunto de tamanha complexidade. Aos colegas do Geste e do Laboratório de Combustão, que de alguma forma contribuíram ao discutir assuntos diversos. Ao Prof. Bizzo da Unicamp, que colaborou com o trabalho através de seu estudo experimental. A minha esposa agradeço por me apoiar nestes dois anos de muita dedicação e privação.

RESUMO

O desenvolvimento de queimadores de baixo NO_x é baseado na compreensão da interação entre a cinética química da combustão e o campo do escoamento. Escoamentos rotacionais (*swirling flows*) são caracterizados pela presença de gradientes de pressão radiais e axiais, e tem sido aplicados como técnica de combustão para a minimização desses poluentes. Neste trabalho é apresentada a modelagem numérica de uma câmara de combustão cilíndrica com queimador dotado com *swirler* de blocos móveis. O modelo, composto pela equação de continuidade, balanços da quantidade de movimento em três dimensões, o transporte da energia cinética turbulenta e da vorticidade, transporte de espécies químicas e energia, foi implementado numericamente sob a plataforma computacional *Fluent*. A câmara foi simulada considerando propano combustível e os resultados comparados a dados experimentais de uma câmara cilíndrica operada com GLP. Como principal resultado foi possível identificar a ocorrência da ZCR no escoamento e a influência do número de *swirl* sobre as características da combustão.

Palavras-chave: Combustão; turbulência; *swirl*; modelagem; queimadores.

ABSTRACT

The development of low NO_x burners is based on the comprehension of the interaction between combustion kinetics and flow field. Swirling flows are characterized by radial and axial pressure gradients, which improve the recirculation of the hot products into the flame region, and then enhance the combustion efficiency have being proposed as a mean to reduce NO_x emissions from these equipment's. This work presents the numerical modeling of cylindrical combustion chamber equipped with movable blocks burner. The model includes the continuity equation along with the 3D momentum balance equations, the k- ω shear stress transport turbulence model equations, the energy balance and the equations for transport chemical species. Results of the simulation of the swirling reactive flow in the combustion chamber, performed using Fluent CFD package, are validated by comparison with experimental data obtained elsewhere. As a main result, it was possible to identify the occurrence of a CRZ in the flow and to discuss the influence of the swirl number on the combustion characteristics.

Keywords: swirl intensities, combustion, turbulence.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO.....	1
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	3
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E MODELAGEM	6
3.1	Escoamentos com <i>Swirl</i>	6
3.2	Turbulência e sua Modelagem	11
3.2.1	Modelo de Turbulência $k-\omega$ SST.....	14
3.2.2	Lei de Parede.....	15
3.3	Modelagem da Combustão Turbulenta	17
3.3.1	Modelo de Combustão Eddy Dissipation/Finite Rate.....	18
3.3.2	Tratamento da Equação de Energia	20
3.3.3	Mecanismo de Reação de Propano	22
3.4	Modelagem da Formação de Óxidos de Nitrogênio.....	22
4	MODELAGEM NUMÉRICA DE UMA CÂMARA CILINDRICA DOTADA DE QUEIMADOR COM SWIRLER.....	26
4.1	Descrição da Bancada Experimental.....	26
4.2	Avaliação de Modelos de Turbulência.....	28
4.3	Simulação da Câmara Estudada por Mafra e Bizzo.....	34
4.3.1	Solução a Frio.....	39
4.3.2	Solução a Quente.....	39
5	SIMULAÇÃO DA CÂMARA DE COMBUSTÃO DOTADA DE QUEIMADOR COM GERADOR DE SWIRL DE BLOCOS MÓVEIS.....	41
5.1	Avaliação das Características da ZCR	41
5.2	Adequação da Função de Parede Adotada	46
5.3	Combustão e Emissão de NO _x	47
6	CONCLUSÃO.....	65
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	66

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1	Zona central de recirculação típica.	7
Figura 3.2	Queimador com gerador de rotação. Tipo entrada de ar axial e tangencial...	7
Figura 3.3	Queimador com gerador de rotação. Tipo blocos móveis.....	8
Figura 4.1	Esquema da bancada experimental	27
Figura 4.2	Modelo geométrico do queimador e fornalha. Dimensões principais.....	27
Figura 4.3	Representação esquemática dos canais do ar de combustão e do escoamento em torno da lança de combustível.	28
Figura 4.4	Fornalha e queimador do estudo inicial. Malha tetraédrica.	29
Figura 4.5	Comportamento da pressão estática ao longo da linha central da câmara de combustão. (a) Anapolski e Hayashi, 2014. (b) Eldrainy <i>et al</i> , 2009.....	30
Figura 4.6	Linhas de corrente obtidas no plano central.....	31
Figura 4.7	Comportamento da pressão estática ao longo da linha central da câmara de combustão.....	32
Figura 4.8	Contornos de velocidade axial para os casos (a, b, c).....	33
Figura 4.9	Escoamento rotacional (<i>swirling flow</i>). Vetores velocidade obtidos no plano de saída do queimador.	33
Figura 4.10	Plano frontal situado 100 mm à jusante do queimador, para coleta de resultados na análise de qualidade de malha.	37
Figura 4.11	Vistas da malha M2 selecionada. a) Plano central y-z. b) Planos x-y. c) Detalhe do queimador no plano y-z.....	38
Figura 5.1	Campo da velocidade axial obtido plano médio y-z.	41
Figura 5.2	Perfil de velocidade axial obtido experimentalmente no centro do plano y-z. a) S=1,17 b) 1,463. [Bizzo, 1997].....	42
Figura 5.3	Resultados da pressão estática na linha de centro do escoamento a jusante do queimador até a saída da câmara de combustão.	43
Figura 5.4	Contornos de velocidade axial no plano x-y e linhas de corrente no plano central y-z. S= 1,17.....	44
Figura 5.5	Contornos de velocidade axial no plano x-y e linhas de corrente no plano central y-z. S= 1,315.....	45
Figura 5.6	Contornos de velocidade axial no plano x-y e linhas de corrente no plano central y-z. S= 1,463.....	45
Figura 5.7	Parâmetro y^+ descrito sobre a região de parede da fornalha. S=1,463.....	46
Figura 5.8	Campo da fração mássica de propano obtido no plano central para S=1,17; S=1,315 e S=1,463.	48
Figura 5.9	Campo da fração mássica do CO ₂ obtido no plano central para S=1,17; S=1,315 e S=1,463.	49

Figura 5.10	Campo da fração mássica de CO obtido no plano central y-z para $S=1,17$; $S=1,315$ e $S=1,463$.	50
Figura 5.11	Perfil de temperatura e NO_x obtidos ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais de x. $S=1,463$.	51
Figura 5.12	Campo de temperatura obtido no plano central y-z para diferentes números de <i>swirl</i> . $S=1,17$, $S=1,315$ e $S=1,463$.	52
Figura 5.13	Campo de temperatura obtido em planos x-y equidistantes para diferentes números de <i>swirl</i> . $S=1,17$, $S=1,315$ e $S=1,463$.	53
Figura 5.14	Perfil da fração mássica de O_2 obtidos ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. a) $S=1,315$. b) $S=1,463$.	55
Figura 5.15	Perfil da fração mássica de O_2 obtidos ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. a) $S=1,315$. b) $S=1,463$.	56
Figura 5.16	Perfis de O_2 obtidos experimentalmente ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. $S=1,315$. [Mafra, 2000].	57
Figura 5.17	Perfis de temperatura obtidos ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. a) $S=1,315$. b) $S=1,463$.	58
Figura 5.18	Perfis de temperatura obtidos ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. a) $S=1,315$. b) $S=1,463$.	59
Figura 5.19	Perfis de temperatura obtidos experimentalmente ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. $S=1,315$	60
Figura 5.20	Perfis de NO_x obtidos ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. a) $S=1,315$. b) $S=1,463$.	61
Figura 5.21	Perfis de NO_x obtidos numericamente ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. a) $S=1,315$. b) $S=1,463$.	62
Figura 5.22	Perfis de NO_x obtidos experimentalmente ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. $S=1,315$.	63

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1	Casos do número de <i>swirl</i> simulados.	29
Tabela 4.2	Condições de operação da fornalha.	34
Tabela 4.3	Malhas M1, M2 e M3 usados no método GCI.	36
Tabela 4.4	Solução da velocidade média axial para as malhas M1, M2 e M3.....	37
Tabela 4.5	Solução do método GCI para as malhas M1, M2 e M3.....	37
Tabela 4.6	Condições de Contorno.....	39
Tabela 5.1	Emissão de NOx da câmara com <i>swirler</i>	64

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

UFRGS	Universidade Federal do Rio Grande do Sul
ZCR	Zona central de recirculação
Re	Número de Reynolds
Pr	Número de Prandtl
RANS	Reynolds Average Navier Stokes Equations
GLP	Gás Liquefeito de Petróleo

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Área, m ²
CO	Monóxido de carbono
HC	Hidro carbonetos
CO ₂	Dióxido de carbono
NO _x	Óxidos de nitrogênio
SO ₂	Dióxido de enxofre
SO ₃	Trióxido de enxofre
G _x	Quantidade de movimento axial, kg.m/s ²
G _φ	Quantidade de movimento tangencial,kg.m/s ² .m
R	Raio da saída do gerador de rotação, m
ρ	Massa específica dos gases, kg/m ³
U	Componente axial de velocidade, m/s
σ	Razão das componentes médias entre as velocidades tangencial e radial;
\dot{M}	Taxa de massa, kg/s
B	Largura axial dos canais formados entre os blocos fixo e móvel do queimador, m
W ₁	Componente tangencial de velocidade, m/s
V ₁	Componente radial de velocidade, m/s
r	Posição radial, m
z	Quantidade de blocos móveis
ξ _m	Ângulo máximo de ajuste do bloco móvel, rad
ξ	Ângulo de ajuste do bloco móvel, rad
\bar{U}	Velocidade média temporal na direção x, m/s
t	Tempo, s
t ₀	Tempo inicial, s
\bar{u}_i	Média temporal da velocidade (i=1, 2, 3), m/s
u'	Componente da flutuação de velocidade, m/s
μ _t	Viscosidade turbulenta, kg/m.s
y	Distância da parede, m
$\overline{u'_i u'_j}$	Média do produto das flutuações de velocidade, m ² /s ²

k	Energia cinética turbulenta, m^2/s^2
δ_{ij}	Delta de Kronecker
v'	Componente da flutuação de velocidade, m/s
\bar{u}	Componente da velocidade na direção x, m
\bar{v}	Componente da velocidade na direção y, m
x	Direção, m
ρ	Massa específica, kg/m^3
\tilde{P}_k	Produção da energia cinética turbulenta, m^2/s^3
β^*	Constante do modelo k- ω SST
σ_k	Constante do modelo k- ω SST
ω	Taxa de dissipação específica de k , m^2/s^3
μ	Viscosidade dinâmica, $kg/m.s$
F_1	Função de mistura do modelo k- ω SST
ν_t	Viscosidade cinemática, m^2/s^2
$\sigma_{k,1}$	Constante do modelo k- ω SST
$\sigma_{k,2}$	Constante do modelo k- ω SST
$\sigma_{\omega,1}$	Constante do modelo k- ω SST
$\sigma_{\omega,2}$	Constante do modelo k- ω SST
a_1	Constante do modelo k- ω SST
$\beta_{i,2}$	Constante do modelo k- ω SST
u^+	Lei de parede
u^+_{lam}	Lei de parede laminar
u^+_{turb}	Lei de parede turbulento
Γ	Função de mistura da lei de parede
u^*	Velocidade de atrito, m/s
y^+	Distância adimensional da parede, m
Y_i	Fração mássica da espécie química i
\vec{V}	Vetor velocidade, m/s
$D_{i,m}$	Coefficiente de difusão de massa binário
Sc_t	Número de <i>Schimdt</i>
$D_{T,i}$	Coefficiente de difusão térmica

$R_{i,r}$	Taxa líquida de produção da espécie química i na reação r , kg/m ³ .s
m_i	Massa da espécie química i , kg
m_t	Massa total da mistura, kg
$\nu_{i,r}'$	Coefficiente estequiométrico de um reagente i na reação r
$M_{w,i}$	Massa molecular da espécie, kg/kmol
A	Constante experimental do modelo <i>Eddy Dissipation</i>
B	Constante experimental do modelo <i>Eddy Dissipation</i>
Y_p	Fração mássica de qualquer um dos produtos de combustão
$\nu_{i,r}''$	Coefficiente estequiométrico de um produto j na reação r
$Y_{\check{R}}$	É a fração mássica de um reagente particular \check{R}
\vec{v}	Vetor velocidade, m/s
E	Energia interna, kJ/kg.K
k_{eff}	Condutividade efetiva de um material sólido, kW/kg.K
T	Temperatura, K
h_i	Entalpia da espécie química i , kJ/kg.K
\vec{J}_i	Fluxo difusivo da espécie química i
$\bar{\nu}_{eff}$	Viscosidade efetiva do fluido, m/s ²
S_h	Termo fonte
$\vec{\nabla}$	Operador matemático (divergente) nas três direções, x, y, z
h	Entalpia sensível, kJ/kg.K
p	Pressão, Pa
T_{ref}	Temperatura de referência no estado inicial, K
\bar{c}_p	Calor específico médio da espécie química i , kJ/Kg.K
R	Constante universal do gás
Le_i	Número de <i>Lewis</i>
k_T	Condutividade térmica do fluido, kW/kg.K
C_3H_8	Propano combustível
O_2	Oxigênio
CO	Monóxido de carbono
H_2O	Água
CO_2	Dióxido de carbono

NO	Óxido nítrico
NO ₂	Dióxido de nitrogênio
N ₂ O	Óxido nitroso
$k_{f,1}$	Constante da taxa de reação 1 no sentido frontal f
$k_{r,1}$	Constante da taxa de reação 1 no sentido reverso r

1 INTRODUÇÃO

As emissões de dióxido de carbono, óxidos de nitrogênio e enxofre (CO_2 , NO_x e SO_x) provenientes da combustão em combustíveis fósseis são os principais responsáveis pelo aumento do nível de acidez na atmosfera. Estes compostos na forma de gás, quando precipitam, formam a chuva ácida. Somado a isso, conforme IPCC (2014), tais compostos também contribuem significativamente nas mudanças abruptas e irreversíveis do clima, as quais atingem as populações de países de todos os níveis de desenvolvimento. Dentre as mudanças climáticas, o de maior risco é o aquecimento global. Outro dado alarmante, de acordo com o Ministério do Meio Ambiente, em divulgação de dados da Organização Mundial da Saúde, é o de que sete milhões de pessoas morrem anualmente por conta de doenças decorrentes da poluição do ar, com somente dois compostos químicos: dióxido de nitrogênio (NO_2) e o dióxido de enxofre (SO_2) [UNEP, 2014].

Neste sentido, os impactos ambientais e de mortalidade levam as frentes do desenvolvimento a buscar mudanças na produção e consumo da energia, através do incentivo ao aprimoramento de tecnologias existentes e a partir do desenvolvimento de energias renováveis visando um menor impacto no meio ambiente. Tais mudanças acarretam na alteração da distribuição da matriz energética brasileira, tendo em vista o atendimento ao consumo, pois segundo a projeção da EPE (2008), a demanda da energia elétrica no Brasil no ano de 2030 deve superar 189 % a do ano de 2005.

Uma das muitas frentes de desenvolvimento, trata-se da eficiência de processos de combustão, no que diz respeito à otimização dos níveis de poluentes. Os compostos poluentes citados anteriormente são comumente encontrados em processos que envolvem combustão, assim, queimadores de baixa emissão de óxidos de nitrogênio (NO) têm sido desenvolvidos com base em estudos da interação da cinética da produção de compostos de nitrogênio com o escoamento no interior de fornalhas. Estes estudos visam ao desenvolvimento de processos de combustão mais estáveis e com menor emissão de poluentes. Na situação oposta, em uma chama instável, ocorre perda de calor na região de combustão devido sua dispersão, ocorrendo o decaimento da temperatura e favorecendo a formação de monóxido de carbono (CO) devido à queima incompleta de combustível. A estabilização da chama pode ser alcançada a partir da indução de *swirl* (rotação) no escoamento, o qual é gerado no queimador através da utilização de sistema de injeção de ar projetado para induzir a componente rotacional. Como efeito,

quando a mistura de ar e combustível atingem a câmara de combustão, tornando-se uma região de escoamento reverso, conhecida como zona central de recirculação (ZCR), a ZCR ameniza o efeito da dispersão de chama induzindo a recirculação de gases de combustão próximos ao queimador [Bourgouin *et al.*, 2013].

O objetivo principal deste trabalho é investigar o padrão de escoamento e a interação entre a intensidade do número de rotação e as emissões de NOx em uma câmara de combustão cilíndrica horizontal equipada com queimador de blocos móveis.

Como objetivos específicos pretende-se, implementar utilizando códigos comerciais de dinâmica dos fluidos computacional, um modelo de uma câmara cilíndrica dotada de um queimador com *swirler* e operada com propano, e validá-lo pela comparação dos resultados com dados experimentais disponíveis na literatura.

O modelo computacional validado servirá como ferramenta para simulação de queimadores dotados com *swirler*, visando ao desenvolvimento de novas configurações geométricas que promovam maior eficiência da combustão e redução da emissão de poluentes.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O projeto de queimadores de alta eficiência com baixo grau de emissão de poluentes implica no conhecimento da aerodinâmica de combustores, uma vez que a turbulência promove um papel fundamental, fornecendo o tempo de residência, temperatura e grau de mistura adequado. Deste modo, a turbulência torna-se essencial, já que em sistemas de combustão sem pré-mistura a relação ar/combustível pode variar de ponto a ponto, assim como a temperatura e o tempo de residência, sendo estes parâmetros governados pelas características do escoamento turbulento [Turns, 2000]

Na literatura são encontrados diversos estudos experimentais de câmaras de combustão cilíndrica, nos quais avaliam o nível de formação dos poluentes (HC, CO e NOx) conforme é elevado o número de *swirl* do escoamento. As pesquisas revelam que o grau de emissões, especialmente de NOx, pode ser reduzido em uma faixa de vinte até quarenta por cento, para um dado número de *swirl* [Claypole e Syred, 1981; Schmittel *et al.*, 2000; Bizzo, 1997; Mafra *et al.*, 2010].

Claypole e Syred (1981), estudaram experimentalmente uma câmara de combustão operando com gás natural, potência constante de 100 kW, excesso de ar de 10 %, e queimador com sistema de alimentação de ar radial e tangencial. Nestas condições de operação, avaliaram o comportamento da emissão de NOx para uma faixa do número de *swirl* entre 0,63 e 3,04. A partir de medições ao longo da posição axial, verificaram que a concentração de NO diminui com o número de *swirl*. Além disso, foi constatado que para escoamentos rotacionais, embora a ZCR forneça um longo tempo de residência e temperaturas moderadas, tais fatores não contribuiriam na formação de NOx.

Schmittel *et al* (2000), pesquisaram uma câmara cilíndrica operando com gás natural equipada com queimador de blocos móveis e potência constante igual a 150 kW. No trabalho experimental, levantaram medições detalhadas com o objetivo de compreender a interação de condições locais, que possam influenciar na formação de NOx que operam em escoamentos rotacionais para diferentes números de *swirl* de 0,6 até 1,6. Foi percebido que através da combinação do jato axial de combustível e a injeção de ar radial/tangencial, o grau de mistura entre o ar e combustível podem ser controlados a fim de minimizar a emissão de NOx. Além disso, evidenciou-se que a geometria da lança de combustível pode alterar a distribuição da ZCR.

Bizzo (1997) projetou, construiu e estudou uma câmara de combustão cilíndrica horizontal operando com GLP e tolueno simultaneamente, injetados na lança de combustível na forma anular. A câmara foi montada com um queimador de blocos móveis. Para cada número de *swirl*, foram avaliados os níveis de CO, hidrocarbonetos totais (HC), campos de velocidades da fornalha e distribuição da temperatura para diferentes condições de operação: excesso de ar 19 % e 42 %, duas concentrações não pré-misturadas de tolueno. O tempo de residência também foi levantado através da resposta de um sinal de concentração de SO₂. Foi constatado que o aumento do número de rotação teve impacto na emissão de CO e HC totais, minimizando-as na condição de operação de maior excesso de ar e aumentando as emissões para a menor condição de excesso de ar.

Mafra (2000) observou a formação de NO_x na câmara de combustão projetada por Bizzo (1997) realizando algumas modificações de operação e construção. A câmara modificada operava apenas com GLP sendo injetada por apenas um canal de combustível equipada com o mesmo queimador de blocos móveis. As condições de teste empregadas na câmara de combustão foram duas. A primeira condição avaliada foi com uma potência específica de 295 kW/m³, excesso de ar de 65 %, temperatura dos gases de exaustão 1000 °C. A segunda condição avaliada foi com uma potência específica de 312 kW/m³, excesso de ar de 19 %, temperatura dos gases de exaustão 1175 °C. O tempo médio de residência nas duas condições de teste foi fixado em 2 s, no entanto o seu efeito não foi avaliado. Além disso, a condição de operação da fornalha ocorre na pressão atmosférica, ou seja, pressão manométrica igual a zero. Em ambas as condições de teste foram avaliados perfis de temperatura, pressão, concentração de O₂, CO, NO_x ao longo da fornalha em função do número de *swirl* com o objetivo de compreender as interações entre a formação das espécies químicas poluentes com o escoamento rotacional. Os perfis de O₂ permitiram obter uma ideia da forma do escoamento no interior da câmara, onde foi possível estimar o tamanho e a intensidade da ZCR, neste sentido o tamanho da ZCR foi identificado pela região onde o perfil de oxigênio se tornou plano e a partir deste ponto o escoamento ficou caracterizado como desenvolvido. Os perfis de concentração de CO mostraram-se planos, com nível constante ao longo do comprimento, e praticamente independente do número de rotação. Foi verificado que maiores concentrações de NO_x ocorriam nas regiões de maior temperatura, para todos os números de *swirl* estudados. Além disso, a formação de NO_x foi minimizada a medida que o número de rotação foi intensificado.

Eldrainy *et al* (2009) realizou um estudo numérico do escoamento isotérmico de uma câmara cilíndrica equipada com queimador de aletas axiais e tangenciais. O escoamento com *swirl* foi modelado em três dimensões utilizando o modelo de turbulência k- ϵ através do programa de fluido dinâmica computacional *Fluent*. Foram estudados o comportamento da ZCR, a pressão estática e a intensidade turbulenta para a faixa de números de *swirl* simulados, 0,586 até 1,463 a fim de certificar a capacidade do queimador reproduzir a ZCR quando varia-se o número de rotação. Foi verificado que para um número de *swirl* mais intenso o comprimento da ZCR é também aumentado eliminando regiões do escoamento recirculante, que se localizam nos cantos vivos da fornalha, também nomeada por zonas mortas. O campo da intensidade turbulenta e a pressão estática, mostraram-se também superiores a medida que o número de *swirl* foi aumentado.

Conforme Durox *et al* (2013) a indução de *swirl* no escoamento pode ser realizada através de diversos tipos de queimadores classificados, principalmente, como aletas radial e aletas axial ao que se refere a passagem do ar de combustão e/ou combustível. A presença de rotação causa um acoplamento entre os gradientes de pressão radial e axial modificando o campo do escoamento. O gradiente de pressão adverso resultante de um número de *swirl* forte, superior a 0,6, produz um escoamento com fluxo reverso próximo a saída do queimador, conhecido como ZCR. Deste modo, a região envolvida pela ZCR, promove a recirculação de gases de combustão e seus radicais, funcionando como um bloqueio aerodinâmico, no qual serve para estabilizar a chama, além disso, a ZCR permite a redução de NOx através do aumento do grau de mistura entre os componentes reativos antes que atinjam a zona de reação.

Muitos estudos comprovaram o efeito provocado pela ZCR, conforme Bizzo (1997) escoamentos com *swirl* – rotacionais – são aplicados industrialmente a partir de queimadores com o objetivo de se obter a estabilidade de chama. Diversos pesquisadores estudaram o processo de combustão turbulenta em ambientes confinados desenvolvendo diferentes técnicas para a estabilidade de chama através da recirculação de gases quentes e espécies químicas intermediárias formadas na zona de reação.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E MODELAGEM

No presente capítulo é apresentada a fundamentação teórica envolvida na modelagem de escoamentos turbulentos reativos, seguindo uma ordem que permita introduzir o leitor nos assuntos pertinentes.

No item 3.1 é fundamentado o escoamento com *swirl* ilustrando os principais queimadores aplicados na produção de *swirl* (rotação), ainda é apresentado a forma de cálculo do mesmo.

No subcapítulo 3.2 é descrito, resumidamente, sobre a turbulência e sua modelagem apresentando as principais equações do modelo *k- ω Shear Stress Tensor (SST)* utilizado.

Na sequência o item 3.3, descreve a modelagem da combustão turbulenta, onde é apresentado o modelo de combustão *Eddy Dissipation/Finite Rate*.

A seguir no item 3.4 é fundamentado a modelagem de óxidos de nitrogênio (NOx) com ênfase no mecanismo de *Zeldovich*.

3.1 Escoamentos com *Swirl*

A presença de *swirl* (rotação) no escoamento resulta em uma configuração de gradientes de pressão radial e axial, os quais modificam o campo do escoamento. Casos em que o número de rotação é forte (maior que 0,6) o gradiente de pressão adverso é suficiente de modo a gerar a zona central de recirculação (ZCR), ao passo que para valores fracos (inferior a 0,6) é suficiente para criar efeitos centrífugos, porém não o bastante para geração da ZCR, na qual é caracterizada por um desprendimento de vórtices. No trabalho de Negro e O'Doherty, o qual relata uma revisão sobre o processo de desprendimento de vórtices (*vortex breakdown*) evidenciando que existem diversas formas. Baseado nos trabalhos de Sarpkaya, e Harvey; que consistem basicamente em um tubo cilíndrico, foram constatados três tipos: hélice dupla (*double helix*), espiral e bolha simétrica (*axisymmetric bubble*). Mais adiante, Faler e Leibovich mostram que o desprendimento de vórtice pode ocorrer em sete formas distintas caracterizadas em dois grupos: bolha e espiral, sendo altamente dependente do número de Reynolds. Por fim, escoamentos com recirculação são mais comumente encontrados desprendimento de vórtices do tipo bolha [Negro e O'Doherty, 2000].

O campo típico de uma ZCR, que ocorre logo a jusante do queimador apresentado na forma de linhas de corrente pode ser vista conforme Figura 3.1.

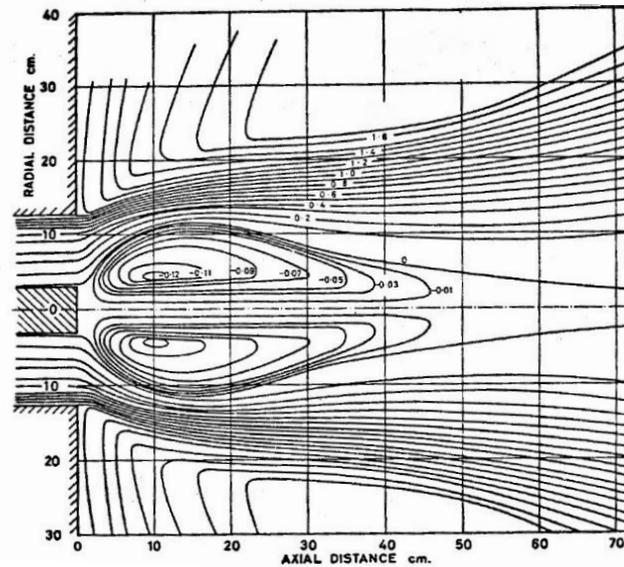


Figura 3.1 – Zona central de recirculação típica. [Beér e Chigier, 1972].

O cálculo do número de rotação a partir de dados de velocidade e pressão requer um alto grau de experimentação, em muitas vezes indisponível ao projetista. Beér e Chigier propuseram, a partir de estudos numéricos e experimentais da aerodinâmica da combustão, um modelo de cálculo que envolve apenas dados de velocidades sendo determinado com boa aproximação para diversos tipos de queimadores. As Figuras 3.2 e 3.3 ilustram os dois tipos de queimadores com características de alimentação de ar de combustão que mais são empregados.

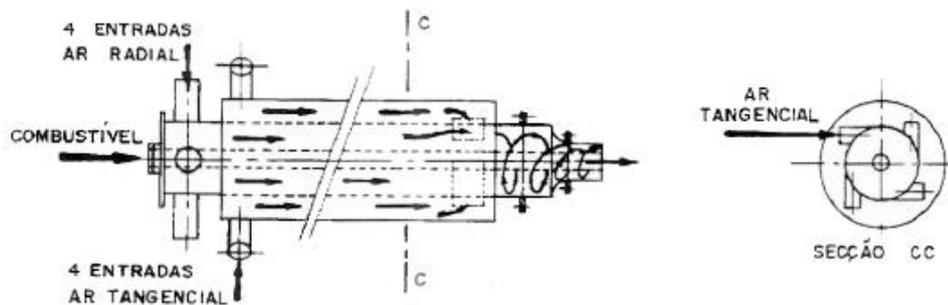


Figura 3.2 – Queimador com gerador de rotação. Tipo entrada de ar axial e tangencial. [Beér e Chigier, 1972].

A Figura 3.2 mostra um queimador com gerador de *swirl*, onde a variação do número de rotação é provocada através da alteração da vazão mássica de ar de combustão que é determinada pela rotação de um ventilador, que por sua vez é responsável pela alimentação de ar tangencial e ar radial. Assim para uma vazão mássica consegue-se um certo número de *swirl*.

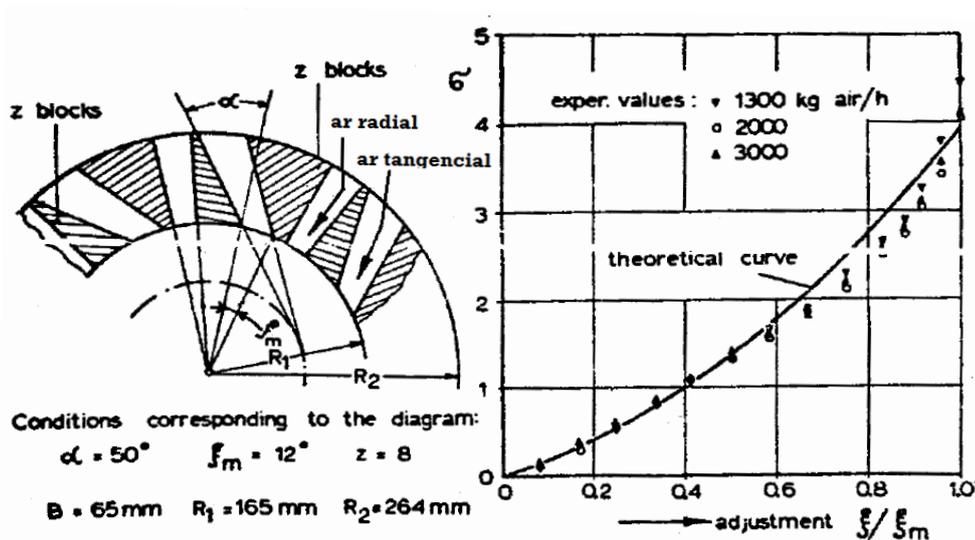
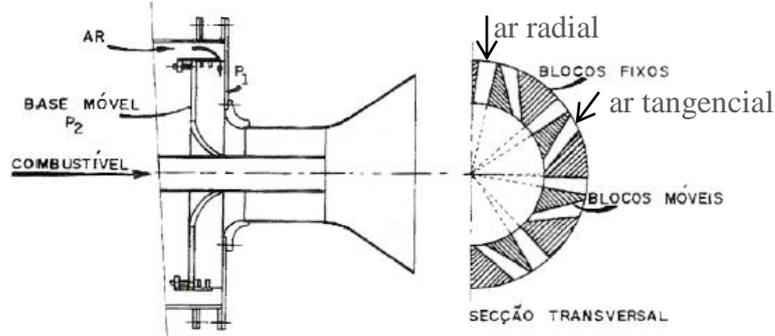


Figura 3.3– Queimador com gerador de rotação. Tipo blocos móveis [Beér e Chigier, 1972].

A Figura 3.3 acima ilustra o queimador aplicado neste estudo. Neste equipamento a variação do número de *swirl* ocorre através da configuração do ângulo de ajuste entre os canais radiais e tangenciais em que o ar é alimentado. Neste caso é a configuração dos canais, que proporcionam contribuições diferentes das componentes radiais e tangenciais de velocidade formando um número de *swirl* particular, independentemente da vazão mássica. A vantagem deste tipo de queimador é que esse permite operar em uma faixa de número de *swirl* para uma mesma vazão mássica de ar, bastando apenas configurar os blocos móveis.

O número de *swirl* (rotação) é definido como um adimensional com o objetivo de caracterizar e quantificar a intensidade de jatos com rotação sendo definido como a razão entre a quantidade de movimento tangencial e a quantidade de movimento axial de acordo com as Equações [Beér e Chigier, 1972].

$$S = \frac{G_\lambda}{G_x R} \quad (3.1)$$

$$G_x = 2\pi \int_0^R \rho U^2 r dr \quad (3.2)$$

A quantidade de movimento tangencial é obtida a partir da velocidade tangencial média no canal de alimentação de ar:

$$G_\lambda = \dot{M} R \overline{W}_1 \quad (3.3)$$

Na Equação (3.3) \dot{M} , R e \overline{W}_1 são respectivamente, a vazão mássica de ar de combustão, o raio interno do queimador e a velocidade tangencial média.

A velocidade \overline{W}_1 está relacionada com a velocidade radial média, \overline{V}_1 , com que o ar é alimentado ao canal do gerador de rotação (*swirler*), através de um parâmetro operacional do gerador de rotação, denominado σ :

$$\sigma = \frac{\overline{W}_1}{\overline{V}_1} \quad (3.4)$$

onde

$$\overline{V}_1 = \frac{\dot{M}}{\rho 2\pi R B} \quad (3.5)$$

sendo que, na Equação (3.5) ρ é a massa específica do ar e B a largura das passagens de ar no gerador de rotação.

Combinando-se as Equações (3.3, 3.4 e 3.5) tem-se uma nova expressão de G_λ :

$$G_\lambda = \sigma \frac{\dot{M}^2}{\rho 2\pi B} \quad (3.6)$$

Da observação das Equações (3.1, 3.2 e 3.6) verifica-se que a determinação do número de rotação depende da geometria do queimador, da vazão de ar e da razão σ que não é facilmente conhecida.

Quando são aplicados queimadores do tipo blocos móveis, o número de rotação também pode ser determinada partindo de um conjunto de equações, que relacionam as características geométricas do queimador. Neste trabalho foram consideradas as relações empíricas fornecidas por Beér e Chigier(1972):

$$S = \sigma \frac{R}{2B} \left[1 - \left(\frac{R_h}{R} \right)^2 \right] \quad (3.7)$$

$$\sigma = \frac{2\pi}{z\xi_m} \sin(\alpha) \left[\frac{\cos(\alpha) \left(1 + \tan(\alpha) \tan\left(\frac{\xi}{2}\right) \right)^{\xi/\xi_m}}{\left(1 - \left(1 - \cos(\alpha) \left(1 + \tan(\alpha) \tan\left(\frac{\xi}{2}\right) \right) \right)^{\xi/\xi_m} \right)^2} \right] \quad (3.8)$$

As variáveis apresentadas nas Equações (3.7 e 3.8) são definidas, respectivamente, como: S o número de rotação; σ coeficiente da quantidade de movimento tangencial; R é o raio interno de saída do queimador; B é a largura axial dos canais formados entre o bloco móvel e o bloco fixo; R_h é o raio externo da lança de combustível interno ao duto do queimador; z quantidade de blocos móveis; ξ_m ângulo máximo do bloco móvel; ξ ângulo de ajuste do bloco móvel.

Estas relações apresentaram boa concordância com resultados experimentais. A maior vantagem deste equipamento consiste na faixa operacional do número de rotação, o qual pode ser modificado durante o processo de combustão através da alteração das áreas de passagens do ar radial e tangencial (alterando o ângulo de ajuste ξ do queimador, modifica-se o número de rotação) [Beér e Chigier, 1972].

3.2 Turbulência e sua Modelagem

Existem três principais métodos numéricos, dentre eles, o método das diferenças finitas, o método dos elementos finitos, e o método dos volumes finitos. O programa comercial *Fluent* utilizado neste trabalho, fornece uma solução baseado no método de volumes finitos. Este método utiliza as equações de conservação na formulação integral. O domínio de solução é dividido, internamente, em diversos volumes de controle adjacentes, tendo as equações de conservação aplicadas em cada volume de controle. As variáveis são calculadas em cada nó computacional pertencente a um respectivo volume de controle. Utiliza-se a interpolação para obter os valores das variáveis na superfície de controle em função dos valores nodais, onde estão localizadas no centro do volume de controle. A partir desta metodologia é obtida uma equação algébrica em cada volume de controle no domínio computacional [Maliska, 1995].

Diversos são os modelos de turbulência utilizados para diferentes aplicações de engenharia. Dentre eles os mais conhecidos na literatura são o *Direct Numerical Simulation (DNS)*; *Reynolds Average Navier Stokes Equation (RANS)* e *Large Eddy Simulation (LES)*. Tais modelos possuem variações e a aplicação será específica dependendo do aspecto físico a ser representado pela modelagem e também do custo computacional esperado pelo estudo. O custo computacional está associado com o grau de complexidade das equações a serem resolvidos e com o grau de refinamento do domínio do problema, sendo estes dois parâmetros determinantes do tempo e conseqüentemente do custo computacional [Maliska, 1995].

Modelos baseados em *DNS* resolvem as equações de *Navier-Stokes* em todas as escalas do escoamento turbulento, demandando um maior tempo computacional entre todos os modelos. Contudo, outros modelos são aplicados em engenharia com bons resultados em um tempo computacional muito inferior, além disso, a *DNS* é limitada a um baixo número de Reynolds. Neste sentido modelos baseados em RANS resolvem problemas de engenharia representando diversos aspectos físicos importantes [Deschamps, 1998].

Ainda que informações das menores escalas do escoamento turbulento sejam importantes, diversos problemas podem ser resolvidos modelando-o como uma média. O conceito de tensão de Reynolds estudado por *Osbourne Reynolds* permite que qualquer propriedade do escoamento seja expressa através de uma quantidade média somada a uma flutuação associada à turbulência, contanto que as variações temporais do escoamento, não

associadas à turbulência, ocorram ao longo de uma escala de tempo muito maiores quando comparado aos maiores vórtices. Desta forma, a média da velocidade é tomada utilizando-se uma integração ao longo de um intervalo de tempo conforme Equação (3.9). Para um escoamento turbulento, em regime permanente, sabe-se que os valores obtidos a partir da média variam pouco espacialmente quando comparados às flutuações [Freire *et al.*, 2002].

$$\bar{U} = \frac{1}{t} \int_{t_0-t/2}^{t_0+t/2} u dt \quad (3.9)$$

Na abordagem clássica da turbulência simulações que utilizam *RANS* descrevem o escoamento através deste método aplicando-o nas equações de *Navier-Stokes* e ainda são criados métodos para determinação do *Tensor de Reynolds*. São dois métodos mais empregados para tal: o primeiro baseado na viscosidade turbulenta e um segundo baseado nas equações de transporte do tensor [Deschamps, 1998].

As equações da conservação da massa e da quantidade de movimento, em notação indicial, considerando um escoamento incompressível e regime permanente ficam na forma como apresentado pelas Equações (3.10 e 3.11) respectivamente. O termo \bar{u} da equação da conservação da massa representa a média temporal da velocidade nas três direções $i (i = 1, 2, 3)$ e x a direção.

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.10)$$

$$\rho \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) - \rho \overline{u'_i u'_j} \right) \quad (3.11)$$

Da Equação (3.11), o termo \bar{p} representa a média da pressão, ρ a massa específica do fluido, μ a viscosidade dinâmica e $\rho \overline{u'_i u'_j}$ é denominado *Tensor de Reynolds*, o qual representa a transferência de quantidade de movimento adicional causada pela turbulência. O tensor tem o papel de aumentar a difusividade da quantidade de movimento, e por este motivo também é chamado de tensão turbulenta [Tennekes e Lumley, 1972; Schlichting, 1979].

A presença do tensor $\overline{\rho u'_i u'_j}$ na equação da conservação insere novas incógnitas, resultando um maior número de incógnitas do que equações, ocorrendo o problema clássico de fechamento, no qual é resolvido através da modelagem da turbulência. Assim, a modelagem insere novas equações e variáveis permitindo a solução matemática das equações [Wilcox, 1993].

Como discutido anteriormente, a modelagem da turbulência via *RANS* pode utilizar o conceito da viscosidade turbulenta para obtenção do *Tensor de Reynolds* $\overline{\rho u' v'}$.

Boussinesq, em 1877 publicou sua proposta de modelagem matemática, através do conceito de viscosidade turbulenta (μ_t) de que as tensões $\overline{\rho u' v'}$ são proporcionais às deformações no escoamento médio. Assim, para um escoamento unidimensional sobre uma placa plana, a contribuição da turbulência na transferência da quantidade de movimento poderia ser apresentada na forma:

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t \frac{\partial u}{\partial y} \quad (3.12)$$

ao passo, que u'_i e u'_j são as flutuações de velocidade associadas às componentes de velocidades instantâneas u e v , paralelamente e normal à superfície da placa, sendo que y corresponde a direção normal à placa plana. Vale ressaltar que, μ_t não é uma propriedade do fluido, e sim do escoamento turbulento, desta forma modelando a viscosidade de escoamentos turbulentos. Posteriormente, Kolmogorov propôs uma hipótese estendida de Boussinesq, conforme Equação (3.13) em que as tensões do escoamento $\overline{\rho u'_i u'_j}$ podem ser avaliados mediante a seguinte relação:

$$\tau_{ij} = -\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad (3.13)$$

em que τ_{ij} é o tensor de Reynolds; μ_t é a viscosidade turbulenta; k a energia cinética turbulenta e δ_{ij} é o delta de Kronecker ($\delta_{ij} = 1$ para $i = j$ e $\delta_{ij} = 0$ para $i \neq j$) [Wilcox, 1993].

No trabalho que segue foi utilizado o modelo $k-\omega$ *SST* (*Shear Stress Transport*) para o problema de fechamento.

3.2.1 Modelo de Turbulência k- ω SST

O modelo k- ω SST consiste de um modelo híbrido entre os modelos k- ϵ e k- ω , mantendo as particularidades de solução de cada um. Esse pode ser aplicado para casos em que o efeito de parede necessita ser avaliado sem perda dos efeitos da corrente livre sendo esta a principal diferença entre o modelo k- ω convencional. Sua implementação também é indicado para geometrias mais complexas, onde o efeito da vorticidade precisa ser avaliado [Menter, 1994].

A modelagem via RANS a duas equações, é baseada na aproximação da viscosidade turbulenta, proposta originalmente por Boussinesq. No modelo k- ω SST, duas equações de transporte modelam a turbulência, uma para a energia cinética turbulenta (k) e a segunda para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ω) [Wilcox, 1993].

A energia cinética turbulenta (k) é apresentada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k \bar{u}_i) = \tilde{P}_k - \rho \beta^* k \omega + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\mu + \sigma_k \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] \quad (3.14)$$

em que \tilde{P}_k é resolvida pela Equação (3.15), em que μ é a viscosidade dinâmica, μ_t é a viscosidade turbulenta, ω é a taxa de dissipação específica da energia cinética turbulenta. Vale ressaltar que o termo transiente é nulo, uma vez que considerou-se o escoamento em regime permanente.

$$\tilde{P}_k = \mu_t \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right); \tilde{P}_k = \min(P_k, 10\rho\beta^*k\omega) \quad (3.15)$$

A taxa de dissipação específica da energia cinética turbulenta (ω) é dada pela Equação (3.16).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\omega\bar{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\mu \frac{F_1}{\sigma_{\omega,1}} + \frac{(1-F_1)}{\sigma_{\omega,2}} \right) \frac{\partial\omega}{\partial x_j} \right) + \frac{\alpha}{\nu_t} \tilde{P}_k - \rho\beta^* f_{\beta^*} \omega^2 \\ + 2(1-F_1) \frac{1}{\omega\sigma_{\omega,2}} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial\omega}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (3.16)$$

em que F_1 é uma função de mistura definida pela Equação (3.17). Vale ressaltar que o termo transiente foi modelado como nulo, assim como o termo fonte que foi desprezado frente ao efeito superior dos gradientes de pressão radial e axial, [Menter, 1994].

$$F_1 = \tanh \left\{ \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{0,09\omega y}, \frac{500\mu}{\rho y^2 \omega} \right); \frac{4\rho k}{\sigma_{\omega,2} D_{\omega}^+ y^2} \right] \right\}^4 \quad (3.17)$$

A função de mistura F_1 é igual a zero na região afastada da parede utilizando a formulação do modelo k- ϵ , e igual a um na região de parede utilizando o modelo k- ω , y é a distância da parede mais próximo. As variáveis $\sigma_{k,1} = 1,176$, $\sigma_{k,2} = 1$, $\sigma_{\omega,1} = 2$, $\sigma_{\omega,2} = 1,168$, $a_1 = 0,31$, $\beta_{i,1} = 0,075$, $\beta_{i,2} = 0,0828$ são as constantes do modelo. As demais constantes são as mesmas definidas pelo modelo k- ω convencional [Theory Guide, 2010]. Deduções e aprofundamentos do modelo podem ser encontradas na referência que segue [Menter, 1994].

3.2.2 Lei de Parede

As funções ou leis de parede devem ser levadas em conta em uma abordagem numérica, se acaso sua análise for dispensada, pode levar a erros numéricos grosseiros, além disso, sua implementação é dependente da física do problema e das equações que o constituem.

Os vórtices próximos à superfície possuem escalas ínfimas e assim altas frequências. Sendo assim, a turbulência nestas regiões pode ser considerada estatisticamente independente dos vórtices de baixa frequência (que correspondem as grandes escalas de comprimento) e do escoamento médio. Desta forma, o escoamento junto à parede pode ser assumido ser afetado somente pela proximidade da parede e pela viscosidade do fluido. Essa região é denominada

de *Região de Parede* e pode ser subdividida em três regiões – subcamada limite viscosa: onde o transporte devido a difusão molecular é dominante – subcamada limite de amortecimento: onde os transportes molecular e turbulento coexistem e possuem mesma ordem de grandeza – região turbulenta: onde o transporte turbulento é dominante [Freire et al., 2002].

Um outro aspecto importante do escoamento turbulento junto a parede é a existência de uma região, na qual a tensão total τ (a soma da tensão viscosa e da tensão de *Reynolds*) é constante e igual a tensão na parede τ_w . A partir de tais apontamentos, o perfil de velocidade U pode ser determinado a partir das condições na parede, definidas por τ_w e pela rugosidade e , da distância y à superfície e das propriedades do fluido.

No modelo $k-\omega$ SST, a formulação da função de parede utilizada é híbrida, ou seja, trata o efeito de parede a partir da lei da subcamada viscosa, da região intermediária e da região totalmente turbulenta. Assim apenas uma lei formula todos esses aspectos através da mistura entre a lei de parede linear e a logarítmica (laminar e turbulenta, respectivamente) tal como indica a expressão:

$$u^+ = e^\Gamma u^+_{lam} + e^{1/\Gamma} u^+_{turb} \quad (3.18)$$

na Equação (3.18), (Γ) é uma função de mistura dada pela Equação (3.19):

$$\Gamma = -\frac{0,01 (y^+)^4}{1 + 5y^+} \quad (3.19)$$

em que o parâmetro y^+ é determinado pela Equação (3.20) sendo definido como a distância para a qual dentro da camada limite turbulenta, somente haverá contribuição por parte das tensões viscosas, que ocorrem até o limite da subcamada viscosa. Desta maneira, este dado é utilizado para análises do efeito de parede sobre o escoamento [Freire, 1998].

$$y^+ = \frac{\rho u^* y}{\mu} \quad (3.20)$$

Na Equação (3.20), u^* é a velocidade de atrito, y é a distância próxima da parede. Na região em que $5 < y^+ < 30$ os efeitos viscosos e turbulentos são da mesma ordem de magnitude e

um perfil de velocidade deve ser ajustado. Já para valores em que $y^+ > 200$, a variação de velocidade não depende somente dos efeitos de parede, mas também dos efeitos dinâmicos da camada limite interagindo como um todo [Freire et al., 2002].

Segundo Theory Guide, 2010 a formulação da lei de parede utilizada pelo modelo $k-\omega$ SST tem a intenção de resolver a subcamada viscosa sendo aceitável uma solução para $y^+ = 1$ na célula adjacente a parede, no entanto, uma solução $5 < y^+ < 10$ para as demais células é também aceitável. Além disso, ao aplicar a malha tetraédrica, recomenda-se o uso de camadas prismáticas para correta discretização da região de parede entre 10 e 20 camadas [Theory Guide Fluent, 2010]. No presente trabalho foi utilizado 20 camadas.

3.3 Modelagem da Combustão Turbulenta

No processo de combustão existem duas classificações quanto ao tipo de chama: pré-misturada e não pré-misturada (difusivas), as quais estão assim relacionadas em função do grau de mistura dos reagentes. Uma chama pré-misturada é caracterizada pelo grau de mistura entre o combustível e os oxidantes ocorrer em um nível molecular sem que ocorra qualquer reação química anterior à queima da mesma. Ao passo que em uma chama difusiva, contrariamente a anterior, os oxidantes e o combustível possuem escoamentos separados ocorrendo reação química somente na interface entre ambos. Em uma chama turbulenta, percebe-se diversas estruturas de chama dentre algumas: sprays; chama tipo jato simples; chamas estabilizadas a partir de zonas com intensa recirculação provocados por escoamento rotacional (*swirling flows*) [Turns, 2000].

A modelagem numérica da combustão turbulenta, consisti fundamentalmente, na solução do sistema de equações governantes, que inclui as equações da continuidade, transporte de quantidade de movimento linear, balanço de energia e transporte de espécies químicas, com aplicação de modelos de fecho e condições de contorno adequadas. A modelagem da turbulência, transferência de calor e reações químicas implica na adição de novas equações de transporte, além da resolução de modelos para determinação de propriedades termofísicas, que são funções de temperatura, pressão e composição. Neste trabalho, a combustão turbulenta foi tratada pela aplicação do modelo *Eddy Dissipation/Finite Rate*, e as propriedades de transporte foram determinadas considerando o número de Lewis para a mistura gasosa.

A descrição a seguir inclui a modelagem da formação de óxidos de nitrogênio.

3.3.1 Modelo de Combustão Eddy Dissipation/Finite Rate

A taxa de reação modelada como termo fonte na equação de transporte de espécies químicas, a qual será discutida adiante, foi resolvida através do modelo híbrido *Eddy Dissipation/Finite Rate* (ED/FR). A taxa de reação é calculada por Arrhenius e através do modelo *Eddy Dissipation*, em que o menor valor obtido entre os dois métodos, é assumido como a taxa líquida de reação da espécie química. Essa modelagem preveni que a reação ocorra antes da frente de chama [Theory Guide, 2010].

No modelo *Eddy Dissipation* é assumido que a taxa de reação são controladas pela turbulência, não sendo necessário o cálculo dessas taxas através de modelos cinéticos como o de *Arrhenius*, por exemplo. O modelo utilizado é computacionalmente barato, quando comparado com modelos que descrevem a cinética química detalhada, no entanto o mesmo prevê bons resultados, apenas, para mecanismos de reação de um ou dois passos.

A Equação (3.21) de transporte das espécies químicas é dada por:

$$\nabla(\rho Y_i \vec{V}) = \left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_i + D_{T,i} + R_{i,r} \quad (3.21)$$

em que, Y_i é a fração mássica da espécie química (i), $D_{i,m}$ é o coeficiente de difusão de massa binário, Sc_t é o número de *Schimidt* turbulento dado pela Equação (3.22), μ_t é a viscosidade turbulenta, $D_{T,i}$ é o coeficiente de difusão térmica, $R_{i,r}$ é a taxa líquida de produção da espécie i . O número de *Schimidt* relaciona a difusividade de quantidade de movimento e a de massa, e para o escoamento turbulento tem a seguinte forma:

$$Sc_t = \frac{\mu_t}{D_t} \quad (3.22)$$

em que, D_t é a difusividade turbulenta. Neste trabalho o número de *Schimidt*, considerado foi $Sc_t = 0.7$.

A fração mássica Y_i de uma determinada espécie química contida em uma mistura pode ser determinada a partir da Equação (3.23):

$$Y_i = \frac{m_i}{m_t} \quad (3.23)$$

em que m_i é a massa da espécie i e m_t é a massa total da mistura.

No estudo de chamas turbulentas difusivas existem dois casos em que a interação entre a turbulência e termoquímica é analisada ao seu limite. O primeiro corresponde ao caso em que as reações químicas são ligeiramente superiores ao efeito difuso da mistura turbulenta. No segundo caso, as reações ocorrem lentamente quando comparado ao movimento turbulento. Neste sentido, Spalding (1977) concluiu experimentalmente, que os efeitos aerodinâmicos do escoamento turbulento prevalecem sobre os da cinética química na combustão turbulenta. Assim, nos casos em que as reações são muito rápidas, na modelagem via *Eddy Dissipation*, assume-se que a taxa de combustão pode ser determinada a partir da taxa de mistura dos reagentes combustível e oxigênio. É assumido que as taxas de reações são governadas pela mistura turbulenta na escala molecular de oxidante e combustível, em outras palavras, na escala de dissipação dos vórtices. Além disso, como o oxidante e combustível aparecem como quantidades flutuantes, então uma relação entre as flutuações mássicas e a concentração média das espécies podem ser estabelecidas. Para tanto, a taxa líquida de produção da espécie (i) na reação (r), a $R_{i,r}$, é tomado via equação de Magnussen conforme as Equações (3.24) e (3.25),

$$R_{i,r} = v_{i,r}' M_{w,i} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \check{R} \left(\frac{Y_{\check{R}}}{v_{\check{R},r}' M_{w,\check{R}}} \right) \quad (3.24)$$

$$R_{i,r} = v_{i,r}' M_{w,i} A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j v_{j,r}'' M_{w,j}} \quad (3.25)$$

em que $v_{i,r}'$ é o coeficiente estequiométrico de um reagente i na reação r , $M_{w,i}$ é o peso molecular da espécie, A e B são constantes experimentais igual 4,0 e 0,5, respectivamente; ρ é a massa específica da mistura, Y_P é a fração mássica de qualquer um dos produtos de combustão, $v_{j,r}''$ é o coeficiente estequiométrico de um produto j na reação r , $Y_{\check{R}}$ é a fração mássica de um reagente particular \check{R} . A Equação (3.24) fornece a taxa de produção que corresponde à menor taxa local de reação, modelando o início da combustão [Williams, 1985;

Magnussen e Hjertager, 1976]. Uma descrição detalhada do modelo *Eddy Dissipation* é encontrada em [Magnussen e Hjertager, 1976].

Nas Equações (3.24) e (3.25) a taxa de produção $R_{i,r}$ da espécie i é governada pela turbulência, mais especificamente, pela razão ε/k (taxa dissipação da energia cinética turbulenta/energia cinética turbulenta), de modo que a combustão ocorre onde o escoamento é turbulento.

3.3.2 Tratamento da Equação de Energia

O balanço de energia no escoamento turbulento tem a forma:

$$\nabla(\vec{v}(\rho e + p)) = \nabla \left(k_{eff} \nabla T - \sum_i h_i \vec{J}_i + (\bar{\tau}_{eff} \vec{v}) \right) + S_h \quad (3.26)$$

onde os três primeiros termos entre parênteses à direita da equação correspondem a difusão de calor, ao transporte associado às correntes materiais e à dissipação viscosa, respectivamente. Na Equação (3.26), k_{eff} é a condutividade efetiva de um material sólido, h_i é a entalpia da espécie química (i), \vec{J}_i é o fluxo difusivo da espécie química (i), $\bar{\tau}_{eff}$ é a viscosidade efetiva do escoamento, \vec{v} é o vetor velocidade e S_h é o termo fonte, que neste caso representa o calor desenvolvido na reação química. O segundo termo à direita da equação corresponde ao transporte da entalpia associado à difusão das espécies podendo ser reescrito conforme Equação (3.27),

$$\vec{v} \left[\sum_{i=1}^n h_i \left(- \left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \vec{\nabla} Y_i \right) \right] \quad (3.27)$$

Na Equação (3.26), no seu primeiro termo a esquerda, o qual representa a energia dado pela Equação (3.28),

$$e = h - \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \quad (3.28)$$

em que h é a entalpia sensível, p a pressão, ρ é a massa específica da mistura, $v^2/2$ é a energia cinética específica. A entalpia da mistura é calculada a partir da Equação (3.29),

$$h = \sum h_i Y_i + \frac{p}{\rho} \quad (3.29)$$

onde a entalpia da espécie química (i), para um escoamento incompressível, é determinada a partir da Equação (3.30),

$$h_i = \int_{T_{ref}}^T \bar{c}_p dT \quad (3.30)$$

em que \bar{c}_p é o calor específico médio da espécie química (i) e ($T_{ref} = 298 K$) é a temperatura de referência do estado inicial.

A massa específica da mistura é obtida do conhecimento da pressão e temperatura, assumindo comportamento de gás ideal. A modelagem é justificada, uma vez que a fornalha opera em pressão atmosférica (pressão manométrica igual a zero), e o número de *Mach* é inferior a 0,03. Nesta condição o escoamento é considerado incompressível, onde as variações da densidade influenciadas pelos gradientes de pressão podem ser desprezadas. Assim a massa específica é determinada por:

$$\rho = \frac{P}{RT} \quad (3.31)$$

na qual P é a pressão absoluta, T é a temperatura média da mistura obtida da equação de energia e ρ a massa específica da mistura.

O número de *Lewis* relaciona a difusividade de energia e de massa, conforme:

$$Le_i = \frac{k_T}{\rho c_p D_{i,m}} \quad (3.32)$$

em que k_T é a condutividade térmica do fluido, c_p é o calor específico a pressão constante e $D_{i,m}$ é coeficiente de difusão de massa [Özsisik, 1985]. Neste trabalho foi adotado $Le_i = 1$ para todas as espécies químicas consideradas.

3.3.3 Mecanismo de Reação de Propano

A modelagem de combustão foi aproximada através do mecanismo cinético de dois passos para o combustível propano, disponível no banco de dados do pacote comercial *Ansys/Fluent*. Segundo este modelo, a formação de CO_2 e H_2O na oxidação de propano se dá nas seguintes etapas:



3.4 Modelagem da Formação de Óxidos de Nitrogênio

Em processos de combustão os poluentes comumente encontrados são: hidrocarbonetos não queimados (HC); óxidos de nitrogênio (NO e NO_2) denominados NOx; óxidos de enxofre (SO_2 SO_3); monóxido de carbono (CO) ; dióxido de carbono (CO_2) e fuligem. Processos em que utilizam chama difusivas turbulentas existem duas fontes geradores de poluentes de hidrocarbonetos e monóxido de carbono que estão intimamente ligadas a natureza da chama. A primeira fonte está relacionada com a existência de zonas de mistura muito pobres dentro da câmara de combustão, onde a oxidação do combustível é muito lenta, por conseguinte, incompleta, favorecendo a formação de CO e outros poluentes. Neste sentido, a forma de injeção do combustível e a relação de mistura ar/combustível são fundamentais para o controle de poluentes de CO e HC, esse controle é muito importante em equipamentos que operam em cargas reduzidas, onde há elevado excesso de ar. A segunda fonte ligada à natureza da chama difusiva turbulenta está associada à ocorrência de zonas de mistura rica, em posições tais que o combustível não queimado deixa essa região não se

misturando ao ar adicional, ou ainda, pelo fato do tempo de residência na câmara de combustão não ser suficiente para que ocorra combustão completa [Coelho e Costa, 2007].

Os mecanismos de formação de NO_x consideram três principais compostos químicos. Dentre eles o mais frequente é o óxido nítrico (NO) e em menor escala ocorrem os compostos dióxido de nitrogênio (NO₂) e óxido nitroso (N₂O). Os mecanismos químicos responsáveis pela sua predição são o NO_x térmico; NO_x imediato (prompt NO_x); e o NO_x de origem no combustível. O mecanismo de formação de NO_x térmico denominado mecanismo de Zeldovich é a principal fonte na combustão de combustíveis não nitrogenados sendo altamente dependente da temperatura, e da concentração do átomo de oxigênio e independente do tipo de combustível. O mecanismo de formação de NO_x imediato, conhecido como mecanismo de Fenimore prevê uma taxa de formação elevada para zonas de mistura ricas, onde radicais de hidrocarbonetos reagem imediatamente com átomos de nitrogênio gerando aminas (NH) e compostos cianos (HCN, H₂CN, CN). Os óxidos formados pela via NO_x combustível são oriundos da volatilização de compostos ligados ao combustível. Essa rota é importante em queimas de carvão e seus derivados, em que o nitrogênio representa de 0,5% a 2% do peso do combustível [Miller e Bowman, 1989].

Na modelagem da formação de óxidos de nitrogênio (NO_x), para o caso do mecanismo de Zeldovich e *prompt* NO_x, a espécie química NO é resolvida no pós processamento, já que sua dependência de solução numérica é alta por parte do campo de temperatura. A equação de transporte de NO é resolvida levando em conta a convecção, difusão, produção e consumo da mesma conforme indica a Equação (3.35):

$$\vec{\nabla}(\rho Y_{NO} \vec{V}) = \vec{\nabla}(\rho D \vec{\nabla} Y_i) + R_{NO} \quad (3.35)$$

em que Y_{NO} é a fração mássica da espécie química NO, D é o coeficiente de difusão de massa efetiva e R_{NO} é o termo fonte da reação denominado como taxa de reação de produção ou de consumo da espécie NO. Esta forma de solução é possível devido ao fato das reações de formação do NO serem lentas, em comparação às demais reações concorrentes, permitindo resolver com independência da cinética química.

O mecanismo de Zeldovich consiste de três reações envolvendo a produção do óxido nítrico,



A terceira reação do mecanismo de Zeldovich não é apresentada, já que ocorre apenas para a condição de mistura rica, cuja não se aplica no presente trabalho. A velocidade dessas reações é obtida segundo as Equações (3.38) e (3.39):

$$k_{f,1} = 1,8 \cdot 10^8 e^{-\frac{38370}{T}} \quad k_{r,1} = 3,8 \cdot 10^7 e^{-\frac{425}{T}} \quad (3.38)$$

$$k_{f,2} = 1,8 \cdot 10^4 T e^{-\frac{4680}{T}} \quad k_{r,2} = 3,81 \cdot 10^3 T e^{-\frac{20820}{T}} \quad (3.39)$$

em que $k_{f,1}$, $k_{f,2}$ são as constantes da reação no sentido direto, ao passo que $k_{r,1}$, $k_{r,2}$ são as constantes das respectivas reações no sentido reverso. A taxa líquida de formação de NO resulta,

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_{f,1} [O][N_2] + k_{f,2} [N][O_2] - k_{r,1} [NO][N] - k_{r,2} [NO][O] \quad (3.40)$$

verifica-se que a determinação da taxa líquida de formação de NO depende da concentração de oxigênio atômico. Como essa espécie não é considerada no mecanismo de reação do propano, sua concentração é obtida admitindo-se o equilíbrio químico da reação de dissociação de O_2 na temperatura da mistura.

A hipótese de estado estacionário para o átomo de N e equilíbrio parcial para o átomo de O podem ser utilizadas para a determinação da taxa líquida de formação de NO. A taxa de formação de NOx é relevante somente a partir de 1800 K em função da fixação do átomo de N ligado quimicamente a um forte radical triplo de N_2 que por sua vez possui uma alta energia de dissociação. Contudo, a energia de dissociação de N_2 é pequena, e em condições de

mistura estequiométrica, quando há oxigênio suficiente para realizar a combustão, a taxa de consumo de N torna-se igual à sua taxa de formação, desta forma permitindo assumir a condição de estado quase estacionário para o átomo de N. Conforme Turns (2000) a concentração de oxigênio atômico é apresentado em,

$$[O] = 36,64 T^{1/2} [O_2]^{1/2} e^{-27123/T} \quad (3.41)$$

Por fim a taxa de formação de NO resulta em,

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_{f,1} [O][N_2] \frac{\left(1 - \frac{k_{r,1}k_{r,2}[NO]^2}{k_{f,1}[N_2]k_{f,2}[O_2]}\right)}{\left(1 + \frac{k_{r,1}[NO]}{k_{f,1}[O_2]}\right)} \quad (3.42)$$

Alguns estudos numéricos em que foram realizadas predições da formação de NO_x utilizando este modelo reportam discrepâncias significativas dos resultados calculados em comparação a dados experimentais, Missaghi *et al* (1990), por exemplo, identificaram no estudo numérico de chamas laminares de metano que a predição do NO_x pode estar superestimada em até 28 %. Somado a este fator, há o erro proveniente do projeto de geradores de rotação, quanto ao número de *swirl* efetivo do escoamento. Segundo Durox *et al*, (2013) esta discrepância pode atingir 20%, quando se comparam os números de *swirl* calculados a partir de dados de geometria com os dados de velocidade do escoamento. Além disto, ainda não há muitos estudos em chamas turbulentas, sobre o efeito da hipótese de equilíbrio parcial do átomo O [Theory Guide Fluent, 2010].

4 MODELAGEM NUMÉRICA DE UMA CÂMARA CILÍNDRICA DOTADA DE QUEIMADOR COM *SWIRLER*

A metodologia utilizada neste trabalho para o estudo da influência da rotação no escoamento na combustão consistiu no desenvolvimento da modelagem numérica do escoamento e reações químicas em uma câmara cilíndrica dotada de queimador de blocos móveis. Relembrando que o queimador de blocos móveis é o gerador de rotação (*swirler*).

No item 4.1 é descrito resumidamente a bancada experimental em que este trabalho foi baseado e suas aproximações da modelagem geométrica. Na seção 4.2 é apresentado um estudo inicial onde foi modelado um problema de geometria e escoamento análogo ao presente estudo; com o fechamento do capítulo, no item 4.3 descreve-se a modelagem numérica deste trabalho, a estratégia de solução e as equações governantes.

4.1 Descrição da Bancada Experimental

A bancada experimental utilizada por Bizzo (1997), Maфра (2000) e Lenço (2004) é composta por uma câmara de combustão cilíndrica horizontal com um queimador de blocos móveis, os quais permitem regular o número de rotação (número de *swirl*) pela variação do ângulo relativo entre os blocos. O queimador é alimentado axialmente com GLP vaporizado, através da lança de combustível. Os produtos de combustão saem da fornalha por um duto de exaustão, onde são resfriados rapidamente por um lavador e succionados por um exaustor para a chaminé de descarga de gases que os lança para fora do laboratório. As Figuras 4.1 e 4.2 ilustram alguns dos componentes da bancada e suas principais dimensões.

A fornalha de testes é construída em três módulos de 600mm totalizando um comprimento de 1800mm um diâmetro interno de 470 mm, onde em cada módulo uma abertura 50 x 500 mm permite a inserção de sondas para medição de temperatura e composição de gases de combustão ao longo de 90% do comprimento da fornalha.

O queimador utilizado foi do tipo de blocos móveis conforme [Beér e Chigier, 1972]. O ar de combustão é alimentado através de um canal radial e outro axial, de modo a promover o escoamento rotativo em torno da lança de combustível, a qual mede 25,4mm no diâmetro externo. Este efeito é representado esquematicamente pela Figura 4.3.

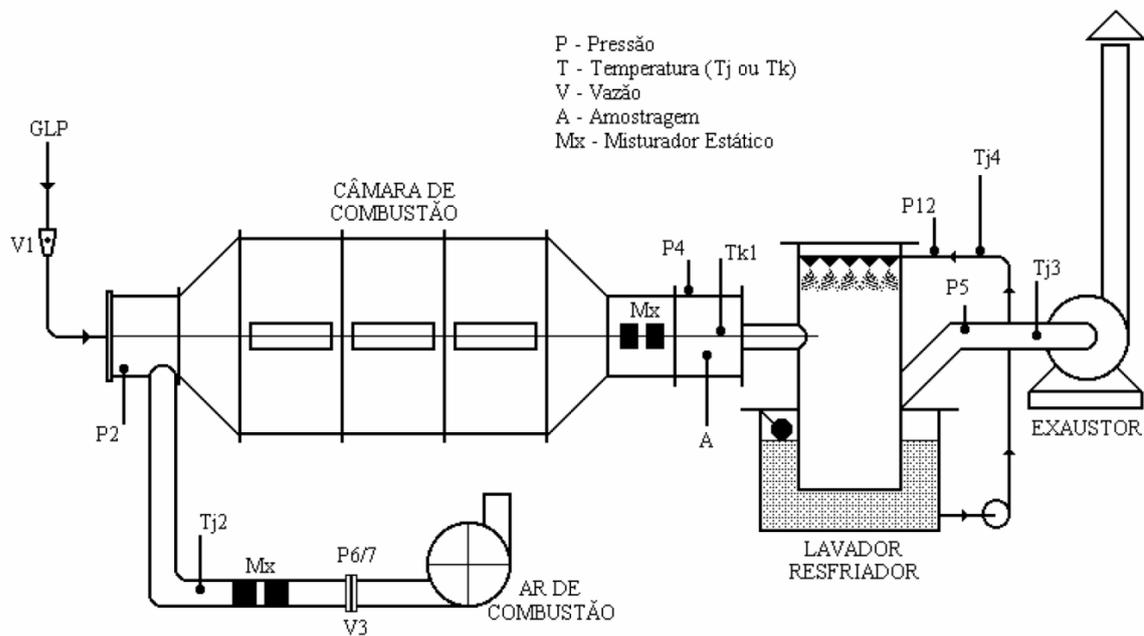


Figura 4.1 – Esquema da bancada experimental. [Bizzo, 1997].

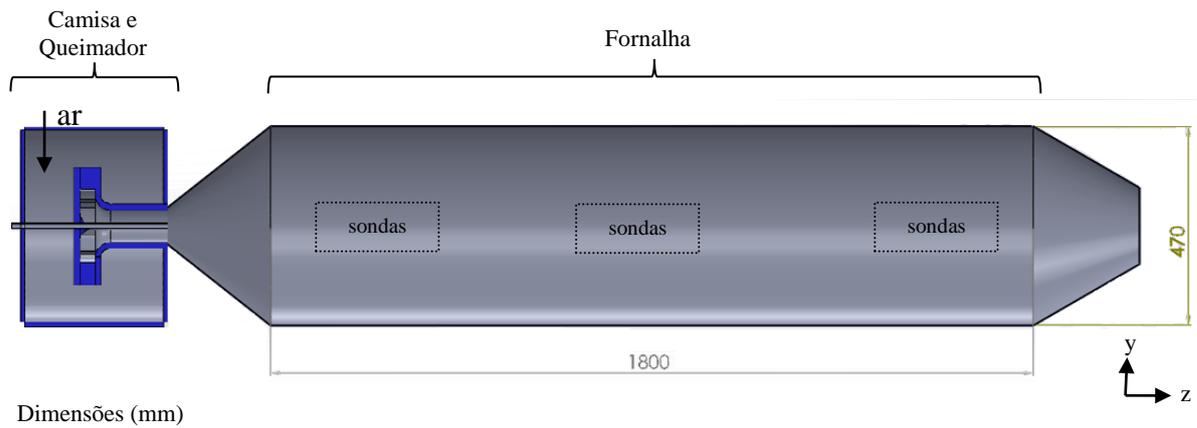


Figura 4.2 – Modelo geométrico do queimador e fornalha. Dimensões principais. [Bizzo, 1997].

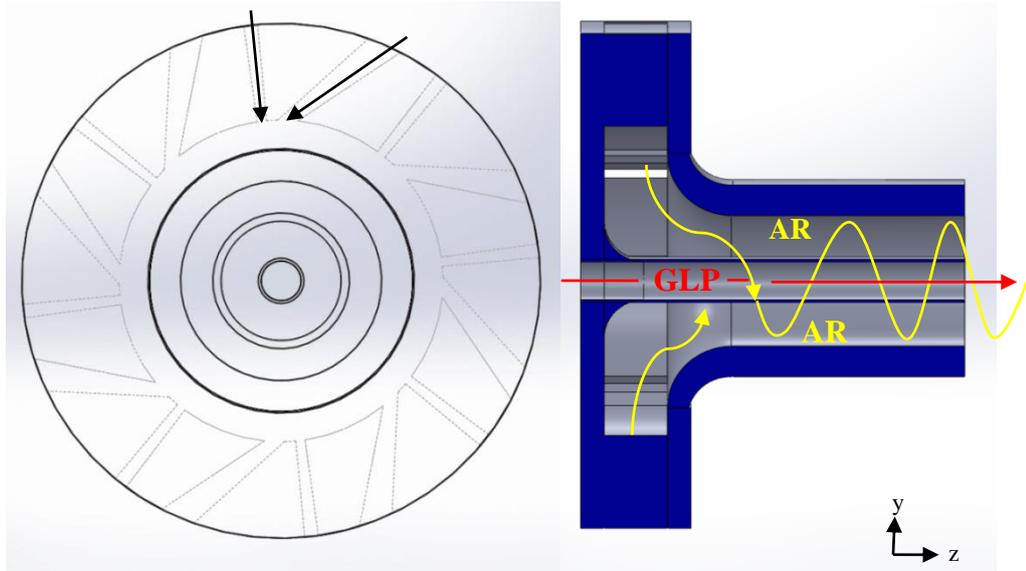


Figura 4.3 – Representação esquemática dos canais do ar de combustão e do escoamento em torno da lança de combustível.

4.2 Avaliação de Modelos de Turbulência

Um estudo inicial foi realizado com objetivo de compreender e avaliar a modelagem de escoamentos com *swirl*, no qual se verificam o efeito da variação do número de *swirl* sobre o campo do escoamento, testando-se os modelos de turbulência $k-\epsilon$ e $k-\omega$ SST.

Como base para o estudo inicial foi considerado o trabalho de Eldrainy *et. al* (2009), de modo que a geometria da fornalha também é cilíndrica, porém o gerador de rotação empregado é do tipo aletas radiais e axiais. Naquele queimador a variação do número de *swirl* é obtida pela alteração direta da configuração da taxa de massa do ar e do combustível conforme a Equação (4.1):

$$S_i = \frac{\int_0^R \rho U W r^2 dr}{R \int_0^R \rho U^2 r dr} \quad (4.1)$$

em que S_i é o número de rotação dado pelo queimador de aletas radiais e axiais; R o raio do queimador; U e W são as componentes axial e tangencial da velocidade, respectivamente. A Figura 4.4 indica a geometria da fornalha e queimador utilizados, bem como a malha empregada.

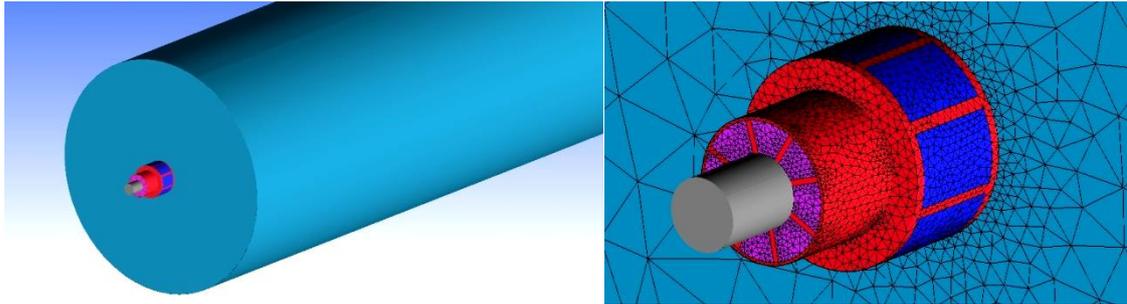


Figura 4.4 – Fornalha e queimador do estudo inicial. Malha tetraédrica. [Anapolski e Hayashi, 2014].

A fornalha estudada por Eldrainy *et al* (2009) mede 0,8 m no comprimento, enquanto o queimador medem, em seu maior e menor diâmetro, 0,6 m e 0,2 m respectivamente. As superfícies em azul escuro e rosa correspondem ao local da injeção de ar de combustão aplicados como condição de contorno, sendo definida para a vazão mássica normal à superfície. O jato de combustível não foi modelado, sendo representado por um material sólido indicado na cor cinza na Figura 4.4. Na saída da fornalha aplicou-se a condição de *pressure outlet*, com pressão igual a zero. O queimador localizado ao lado extremo esquerdo da fornalha utiliza o mesmo princípio de ação ao escoamento que o queimador de blocos móveis, com a única diferença de possuir aletas axiais.

Neste estudo, modelou-se o escoamento isotérmico turbulento em regime permanente utilizando o esquema de discretização espacial proposto por [Eldrainy *et al.*, 2009]. Foram avaliados três casos referentes a três valores do número de *swirl*, obtidos pela combinação de vazões axial e tangencial do ar injetado através das respectivas entradas do queimador. A Tabela 4.1 relaciona as diferentes combinações de vazões mássica axial e tangencial que formam o número de *swirl* simulado.

Tabela 4.1 – Casos do número de *swirl* simulados.

Casos	a	b	c
Vazão de ar tangencial	0,05	0,075	0,1
Vazão de ar axial	0,15	0,125	0,1
Número de <i>swirl</i>	0,586	0,801	1,220

A partir dos dados constantes no caso (b) apresentados pela Tabela 4.1 avaliou-se a pressão estática ao longo da linha central da câmara, como parâmetro para o estudo da independência de malha. O resultado é apresentado na Figura 4.5.

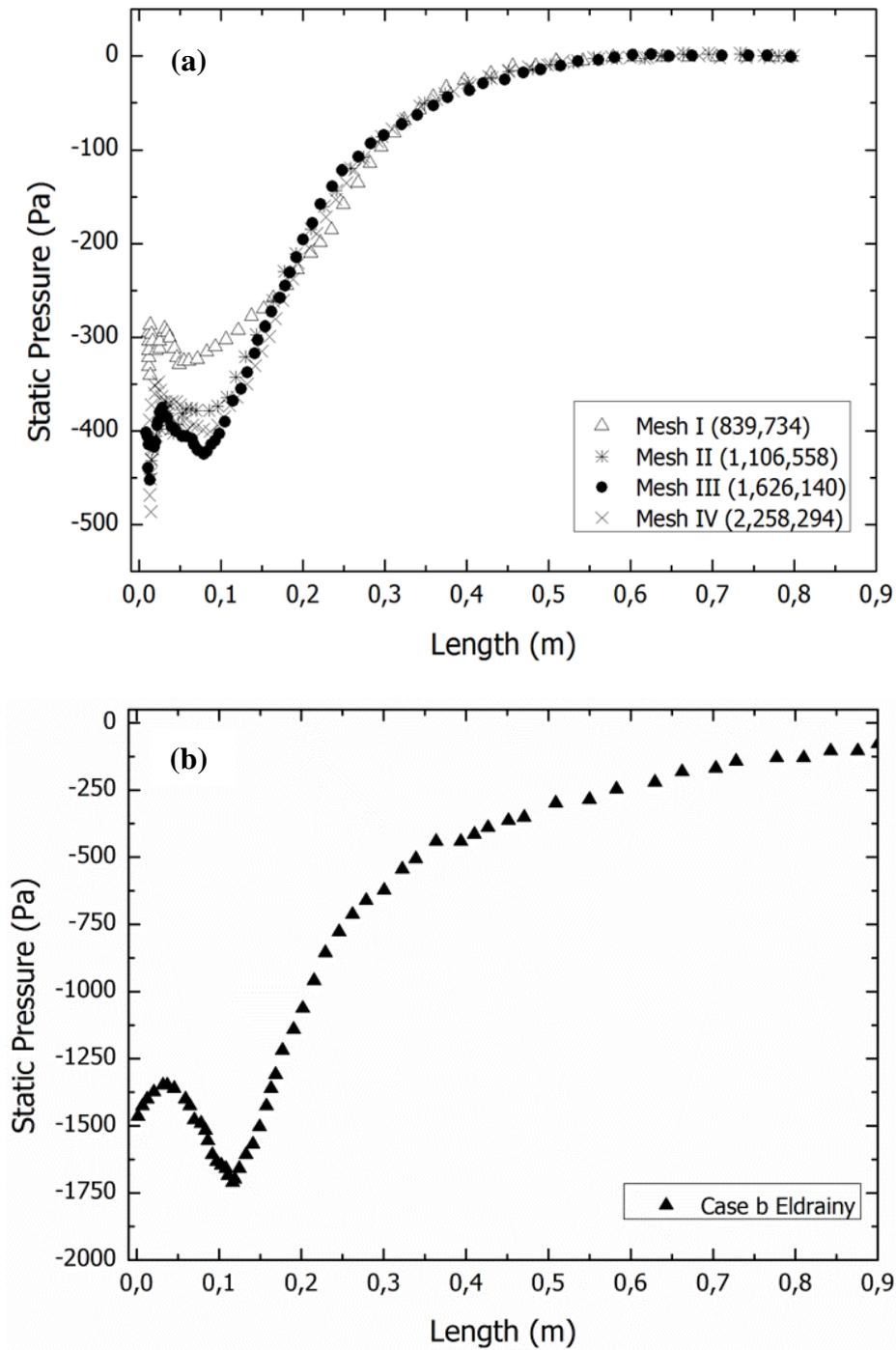


Figura 4.5 – Comportamento da pressão estática ao longo da linha central da câmara de combustão. (a) Anapolski e Hayashi, 2014. (b) Eldrainy *et al*, 2009.

Verifica-se que para malhas com mais de 1.500.000 elementos tetraédricos, o comportamento da pressão estática apresenta boa concordância qualitativa com os resultados obtidos por Eldrainy *et al* (2009), mostrando-se suficiente para descrever os fenômenos envolvidos. No entanto, há uma discrepância nos valores encontrados quando comparado à referência

estudada. Acredita-se que isso se deve ao fato da incerteza em algumas cotas geométricas do queimador, não informadas pelo autor, as quais foram aproximadas considerando as dimensões conhecidas e admitindo a manutenção da escala nos desenhos. Os resultados permitiram verificar a queda de pressão a jusante da saída do queimador que caracterizou a existência da ZCR, uma vez que a queda de pressão nesta região é responsável pela iniciação do desprendimento de vórtices, que por sua vez é responsável pela geração da ZCR.

Definida uma malha adequada para a aplicação do estudo, realizou-se a simulação para os três casos descritos pela Tabela 4.1. Foram analisadas as linhas de corrente no plano médio central e a pressão estática para os dois modelos testados com o objetivo de avaliar o campo do escoamento decorrente de ambos, conforme mostrado nas Figura 4.6 e Figura 4.7.

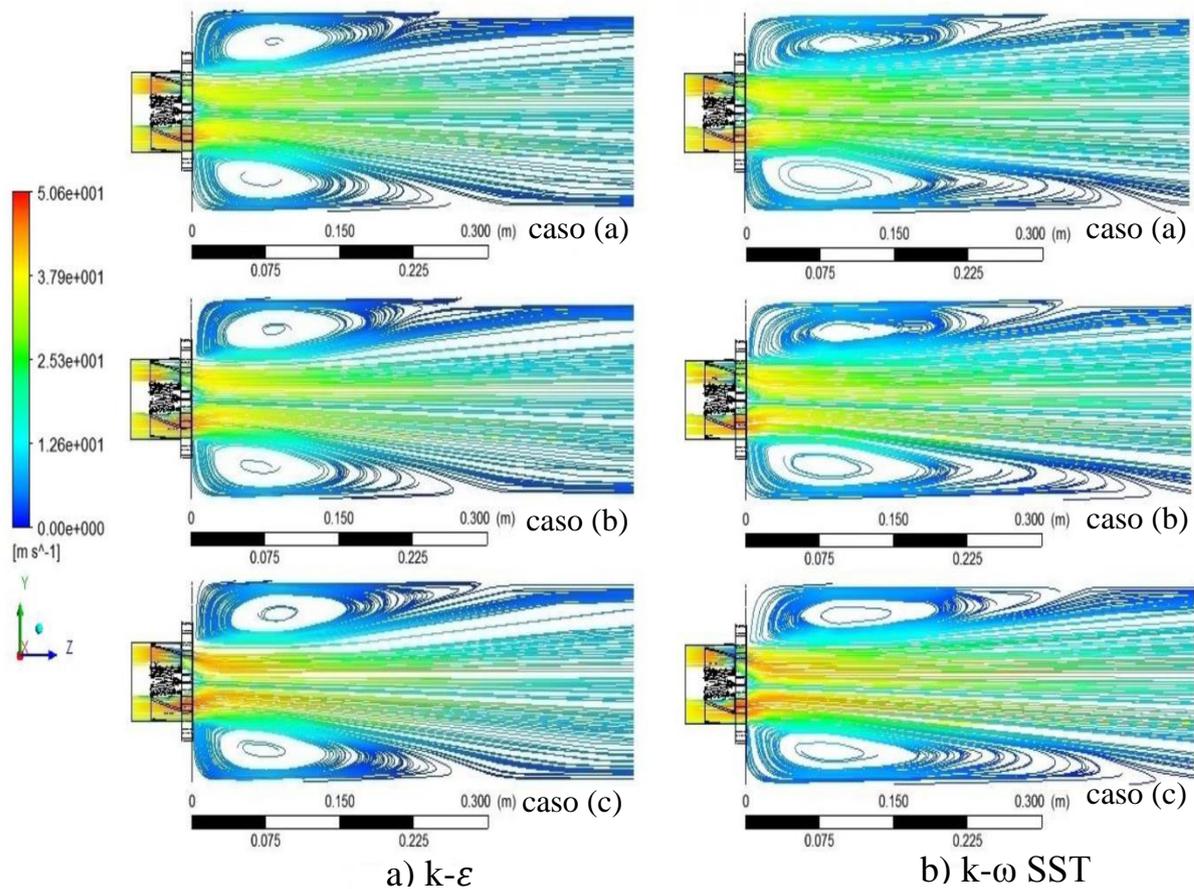


Figura 4.6 – Linhas de corrente obtidas no plano central. a) k- ϵ . b) k- ω SST. Casos a, b, e c.

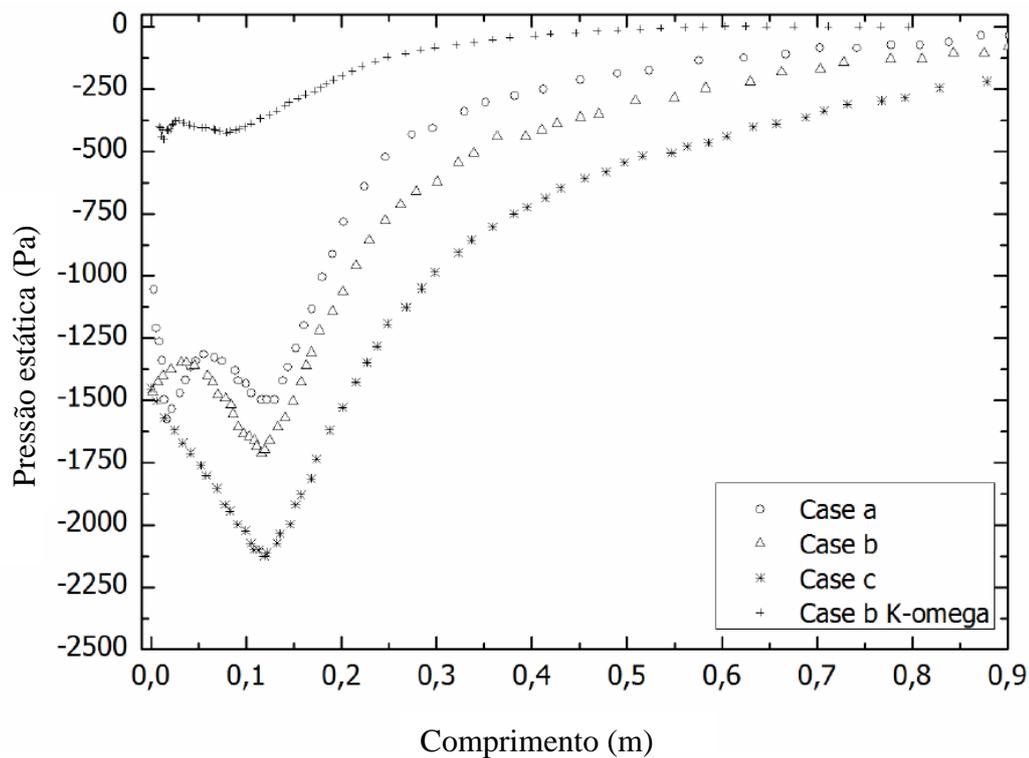


Figura 4.7 – Comportamento da pressão estática ao longo da linha central da câmara de combustão. (Casos a,b, c) Eldrainy *et al*, 2009. (Caso b K-omega) Anapolski e Hayashi, 2014.

Através da Figura 4.6 é possível verificar a existência da ZCR bem definida próximo à parede, quando um número de *swirl* específico é selecionado para os casos (a), (b) e (c) simulados. Sendo que isso ocorre para os dois modelos testados. Além disso, não é percebida uma diferença significativa na solução entre os modelos, ao comparar o campo de linhas de corrente. Ao comparar os resultados apresentados pela Figura 4.6 e Figura 4.7, ambas concordam na formação da ZCR, uma vez que o escoamento rotacional se propaga à medida que escoo pela fornalha e forças centrífugas geram uma região de baixa pressão no centro da corrente a jusante do queimador, na qual é responsável pela iniciação do processo de desprendimento de vórtices. Conforme Wang *et al* (1994), esse fenômeno é o responsável pela geração da ZCR.

A Figura 4.8 apresenta os dados de velocidade axial obtida no plano central, a qual indica a região da ZCR representada pelo contorno azul escuro imediatamente a jusante do queimador, enquanto na Figura 4.9 se pode visualizar no plano frontal próximo a saída do queimador vetores velocidade indicando o escoamento rotacional.

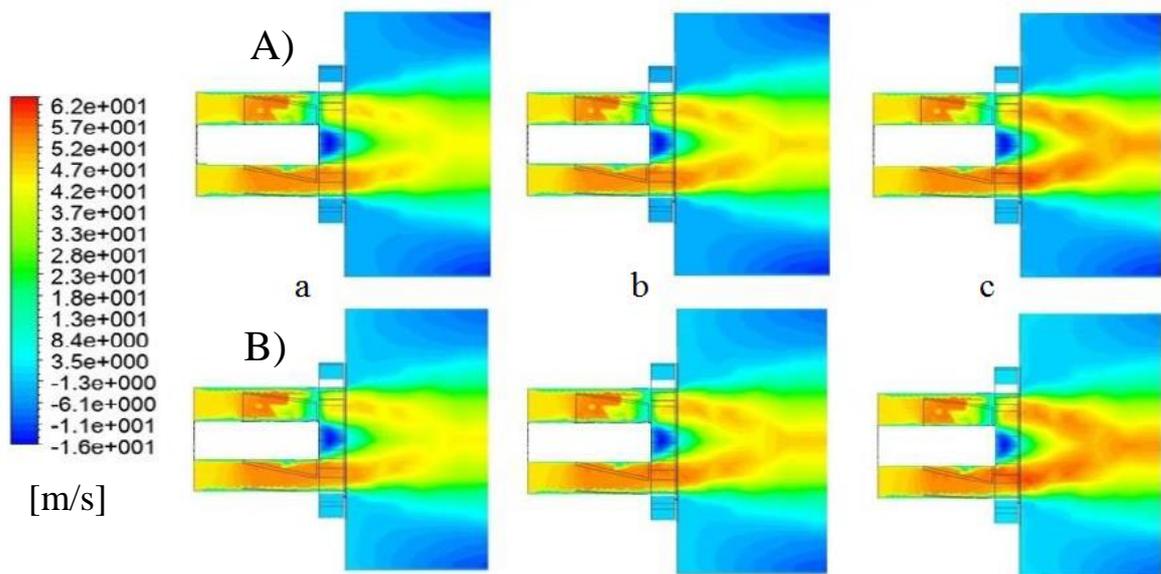


Figura 4.8 – Contornos de velocidade axial para os casos (a, b, c). A) $k-\epsilon$. B) $k-\omega$ SST.

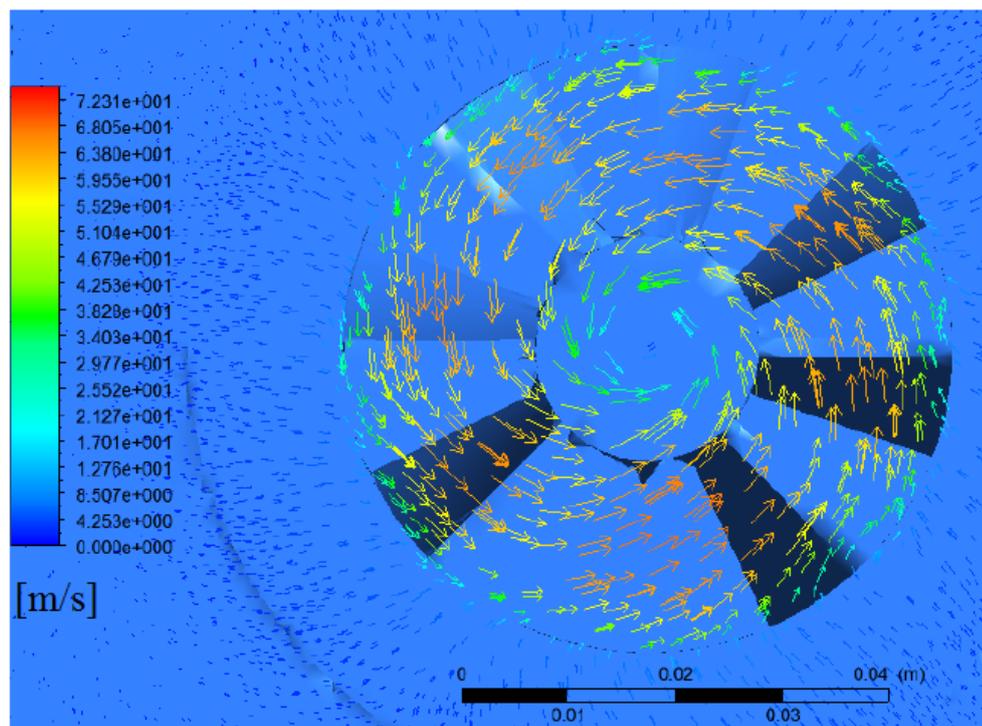


Figura 4.9 – Escoamento rotacional (*swirling flow*). Vetores velocidade obtidos no plano de saída do queimador.

Ao analisar os resultados apresentados pela Figura 4.8 pode-se constatar que o efeito do número de *swirl* sobre a ZCR é pouco sensível. No entanto, espera-se que esse efeito do *swirl*

sobre o comprimento da ZCR definido entre o ponto de saída do queimador ao ponto final da ZCR seja acentuado, quando ocorrer a indução do jato de combustível.

No que concerne aos modelos de turbulência testados, foi percebido um maior grau de convergência para o modelo $k-\omega$ SST, quando baseado nos resíduos. Somado a isto, para reforçar o uso deste modelo nesta aplicação, segundo Menter (2004), o modelo $k-\omega$ SST é mais indicado na presença de geometrias complexas, em escoamentos rotacionais provocados pela indução de *swirl*, e melhor descrição do efeito de parede sobre escoamentos confinados.

Com base neste estudo inicial, foi possível conhecer os fenômenos envolvidos em escoamentos rotacionais provocados pela indução de *swirl*. Além disso, pode-se definir o modelo $k-\omega$ SST como o mais indicado para a captura dos efeitos presentes, sendo esse o modelo utilizado na continuação do trabalho.

4.3 Simulação da Câmara Estudada por Mafra e Bizzo

A simulação da câmara cilíndrica dotada de queimador com gerador de rotação de blocos móveis foi realizada para as condições de operação reportadas por Bizzo (1997) e Mafra *et al* (2010) apresentadas na Tabela 4.2.

Tabela 4.2 – Condições de operação da fornalha.

Excesso de ar	65 %
Taxa de massa do ar de combustão	0,060331 kg/s
Taxa de massa de combustível	0,002359 kg/s
Pressão na fornalha	0 Pa
Faixa do número de <i>Swirl</i>	1,17-1,315-1,46
Potência específica da câmara	323 kW/m ³

Os resultados descritos na seção 4.2 serviram como ponto de partida para realizar o estudo de qualidade de malha para este trabalho.

O estudo de qualidade de malha foi baseado no método do Índice de Convergência entre Malhas (GCI). Este é baseado na extrapolação de Richardson, em que se compara duas soluções para cada espaçamento diferente.

O método proposto por Roach (1997) é aplicado para malhas não estruturadas, em domínios computacionais uni, bi ou tridimensionais, utilizando-se no mínimo duas malhas.

No presente trabalho realizou-se a avaliação de três malhas para a condição de operação com número de *swirl* igual a 1,463 (o mais intenso). Todas as malhas tiveram maior refinamento na região da ZCR.

Quando não se sabe a razão de refinamento entre duas malhas, pode-se utilizar a Equação (4.2):

$$r_{xy} = \left(\frac{N_x}{N_y} \right)^{\frac{1}{D}} \quad (4.2)$$

em que r_{xy} , é a razão de refinamento entre a malha mais refinada (x) e a menos refinada (y), N é o número de elementos da malha e D representa a dimensionalidade do domínio computacional, que neste caso é ($D = 3$). Foi adotada a seguinte nomenclatura para as malhas avaliadas M_1 , M_2 e M_3 , com $r_{12} > r_{23}$

A ordem convergência (O) é determinada através de um método iterativo, segundo a Equação (4.3), em que s_1 , s_2 , e s_3 são os resultados da velocidade média axial obtidas para as malhas 1, 2 e 3 no plano frontal a jusante do queimador. Como estimativa inicial foi utilizado ($O_{ini} = 2$) [Oliveira, 2014].

$$O = \ln \left(\frac{\left(\frac{r_{12}^{p-1}}{r_{23}^{p-1}} \right) \left(\frac{s_3 - s_2}{s_2 - s_1} \right)}{\ln(r_{12})} \right) \quad (4.3)$$

O GCI quantifica percentualmente o afastamento da solução em relação à solução assintótica estimada (solução extata). Este afastamento relaciona duas malhas com refinamentos subsequentes e por

$$GCI = \frac{F_s |\varepsilon_{xy}|}{r_{xy}^O - 1} \quad (4.4)$$

em que F_s é o fator de segurança igual a 1,25 utilizado para avaliação de três ou mais malhas e ε_{xy} é o erro relativo, no qual é dado por

$$\varepsilon_{xy} = \left| \frac{S_y - S_x}{S_x} \right| \quad (4.5)$$

A estimativa da solução exata $S_{exato,xy}$ pode ser realizada, através de uma extrapolação de Richardson:

$$S_{exato,xy} \cong S_y + \frac{(S_x - S_y)r_{xy}^O}{r_{xy}^O - 1} \quad (4.6)$$

O cálculo do GCI utilizado neste trabalho foi verificado através da Equação (4.7), em que um valor próximo a um indica que a solução se encontra dentro do intervalo de convergência assintótica,

$$GCI_{23} = r^O GCI_{12} \quad (4.7)$$

em que r é o fator de refinamento determinado pela Equação (4.7) e O é a ordem de convergência.

Na Tabela 4.3 são apresentadas as Malhas M1, M2 e M3, nas quais foram aplicadas o método GCI.

Tabela 4.3 – Malhas M1, M2 e M3 usados no método GCI.

Malhas Simuladas	Número de <i>swirl</i> utilizado	Número de elementos de malha
M1	1,463	7.639.000
M2	1,463	5.328.000
M3	1,463	4.544.000

A Figura 4.10 apresenta o plano no qual foram calculadas as soluções (S_1 , S_2 , S_3) da velocidade axial média usando as malhas M1, M2 e M3. Os resultados são apresentados na Tabela 4.4.

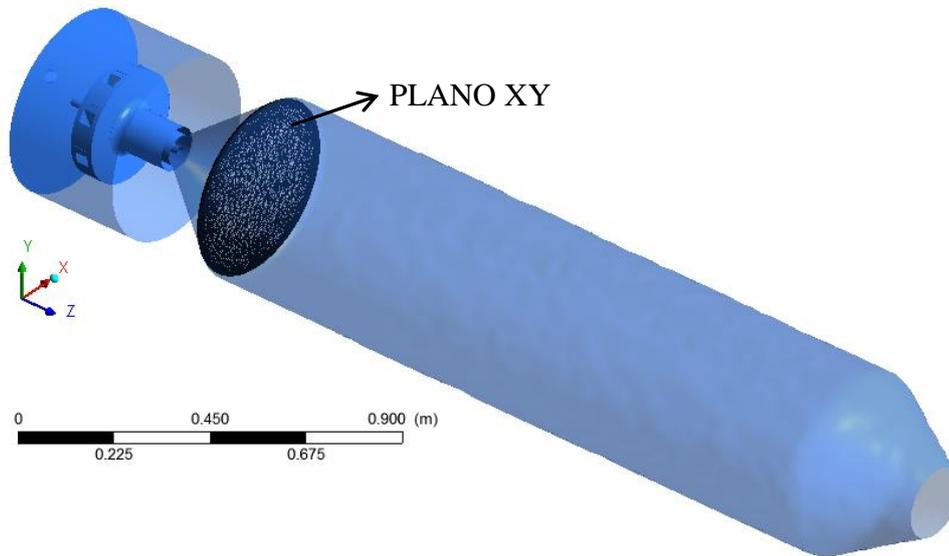


Figura 4.10 – Plano frontal situado 100 mm à jusante do queimador, para coleta de resultados na análise de qualidade de malha.

Tabela 4.4 – Velocidade axial média no plano de coleta para as malhas M1, M2 e M3.

Malhas Simuladas	S_1, S_2, S_3 (m/s)
M1	1,458
M2	1,654
M3	1,994

A Tabela 4.5 apresenta os resultados do índice GCI das malhas consideradas.

Tabela 4.5 – Resultado das malhas M1, M2 e M3.

GCI_{xy}	(%)
GCI_{12}	0,052
GCI_{23}	0,289

Como a indicação do índice GCI_{23} entre as malhas M2 e M3 apresentou-se próximo de um (1), então escolheu-se a malha M2.

As malhas M1, M2 e M3 avaliadas tiveram maior grau de refinamento em regiões da chama (a jusante) do queimador e na região em que se espera a ocorrência da zona central de recirculação (ZCR). A Figura 4.11 apresenta a malha M2 selecionada evidenciando as regiões de maior e menor refino.

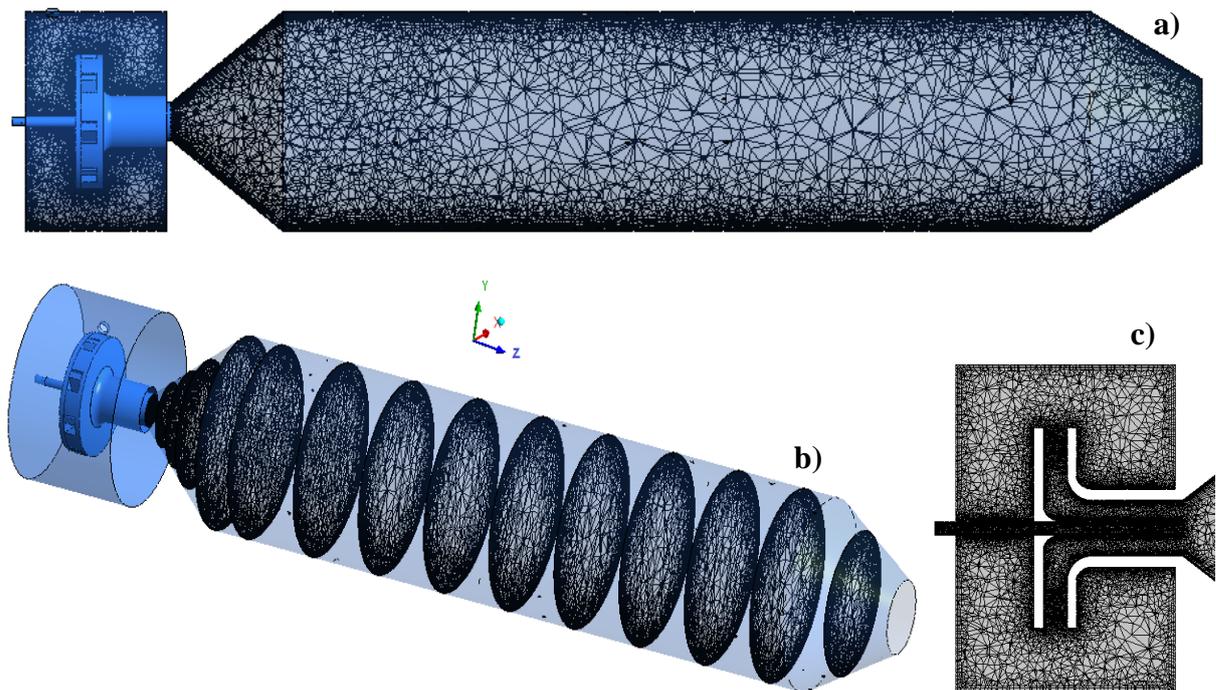


Figura 4.11 – Vistas da malha M2 selecionada. a) Plano central y-z. b) Planos x-y. c) Detalhe do queimador no plano y-z.

A partir da determinação da qualidade de malha via GCI, e, por conseguinte, do número de elementos a ser utilizado, pode-se partir para as simulações numéricas da modelagem proposta.

Para acelerar a convergência adotou-se a estratégia de resolver inicialmente o escoamento a frio e em seguida tendo o resultado a frio como solução inicial, resolver o modelo considerando a combustão.

4.3.1 Solução a Frio

A formulação permanente das equações governantes foi considerada tendo-se aplicado o algoritmo *Pressure Based Solver Equation* através do programa comercial *Fluent 13.0*. O algoritmo *SIMPLE*, pode ser visto com maior detalhamento em Patankar (1980), foi utilizado para tratar o acoplamento entre a velocidade e a pressão. Na discretização espacial foram utilizados os esquemas de segunda ordem para a pressão, energia cinética turbulenta e dissipação da energia. Já para a equação da quantidade de movimento foi utilizada de primeira ordem.

Como condições de contorno, conforme indicado na Tabela 4.6, modelou-se a entrada de ar de combustão como taxa de massa na entrada da camisa do queimador, e na saída da fornalha adotou-se uma pressão prescrita. Quanto a condição de contorno para as quantidades turbulentas definiu-se como condição de contorno, na entrada de ar, entrada de combustível e na saída da fornalha as quantidades constantes de energia cinética turbulenta (k) e taxa específica de dissipação da energia cinética turbulenta (ω) iguais a um (1).

Tabela 4.6 – Condições de contorno.

Superfície de controle	Condição de contorno	Valor da variável
Entrada de ar do queimador	Taxa de massa	0,060331 (kg/s)
Entrada de combustível da lança	Taxa de massa	0,002359 (kg/s)
Saída da fornalha	Pressão na saída (manométrica)	0 (Pa)
Paredes sólidas	Não escorregamento	-

4.3.2 Solução a Quente

Tomando como solução inicial os resultados da simulação do escoamento, a simulação a quente consistiu na solução das equações de *Navier Stokes* e do modelo $k-\omega$ SST agregando-se agora as equações de energia e de transporte das espécies químicas, através do modelo

híbrido de dissipação de vórtices/taxa finita generalizada (ED&FR – *Eddy Dissipation Model/Finite Rate*) [Theory Guide Fluent, 2010].

Adotando-se o propano como combustível modelo, nas condições de contorno prescreveu-se as frações mássicas, de oxigênio no ar igual 0,23 e na corrente de propano igual a 1. A temperatura de entrada do ar, e do propano foi prescrita igual a 25 °C e na saída da fornalha, assumiu-se com base nos dados experimentais, uma temperatura média de 1522 °C.

Na modelagem da formação de NO_x térmico, posterior à solução a quente convergida, o campo do escoamento turbulento reativo é considerado fixo para a solução das equações de transporte de NO levando em conta somente a variação de temperatura. Esta forma de modelar o mecanismo de NO_x é viável, em função deste mecanismo possuir cinética química lenta, sendo resolvido no pós-processamento. Além disso, na modelagem de NO_x térmico assume-se o equilíbrio parcial para o oxigênio (O).

5 SIMULAÇÃO DA CÂMARA DE COMBUSTÃO DOTADA DE QUEIMADOR COM GERADOR DE SWIRL DE BLOCOS MÓVEIS

O modelo descrito no capítulo anterior foi resolvido para diferentes condições de operação, utilizando o pacote comercial Ansys/Fluent 13.0. O computador utilizado possui quatro núcleos físicos com processadores da marca Intel modelo i7 de 3,6GHz, sendo possível sua virtualização até 8 processadores. A memória RAM é de 32GB.

Este capítulo descreve os resultados da simulação da câmara de combustão descrita no trabalho de Bizzo (1997) e Mafra (2010).

5.1 Avaliação das Características da ZCR

A validação numérica das características da ZCR foi realizada pela comparação dos resultados calculados com os dados experimentais de [Bizzo, 1997]. Com o objetivo de evidenciar o campo de velocidade com a zona central de recirculação (ZCR) foi levantado, para o escoamento a frio, o perfil de velocidade axial conforme mostrado na Figura 5.1.

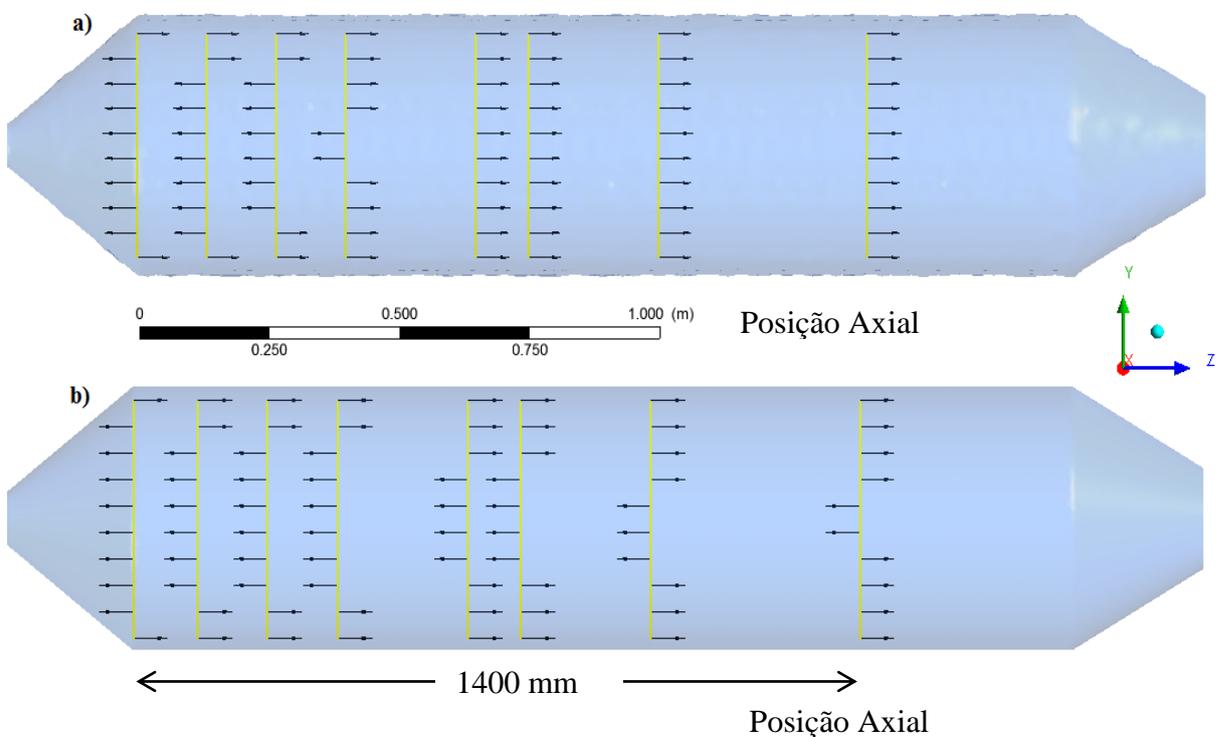


Figura 5.1 – Campo da velocidade axial obtido plano médio y-z. a) $S=1,17$. b) $S=1,436$.

A Figura 5.2 apresenta a distribuição de velocidade, obtida experimentalmente, no mesmo plano e posições das medições indicadas pela Figura 5.1 para os mesmos números de rotação.

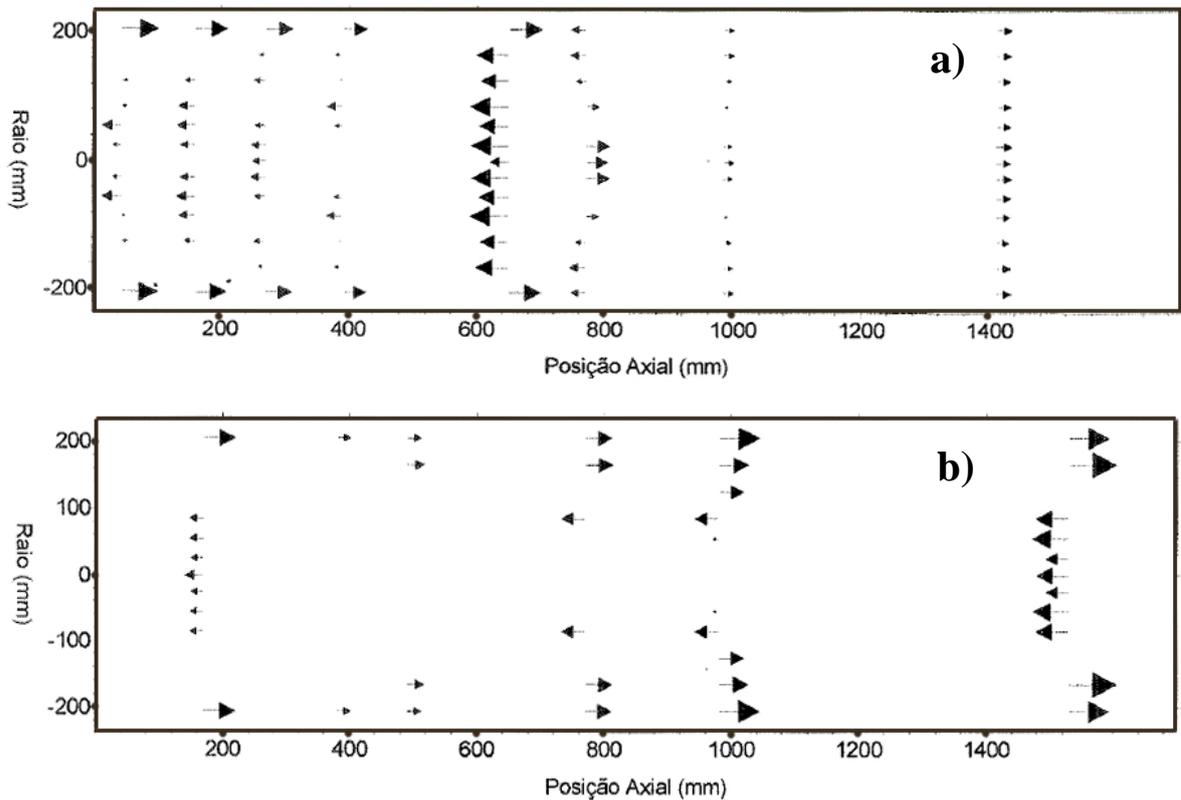


Figura 5.2 – Perfil de velocidade axial obtido experimentalmente no centro do plano y-z.
a) $S=1,17$ b) $1,463$. [Bizzo, 1997].

Verifica-se que o resultado da simulação apresenta boa concordância com os dados experimentais que indicam a ocorrência da ZCR para $S=1,17$ e $S=1,463$. Somado a presença da ZCR foi percebido o comportamento de escoamento desenvolvido quando se distancia do campo de recirculação. Tal comportamento é característico de câmaras de combustão com presença de jatos com *swirl*, sendo também caracterizado por Leuckel (1968) e Bizzo (1997). Além disto, ao analisar o campo da velocidade axial para $S=1,463$ apresentado pela Figura 5.1 (b), percebe-se que o comprimento da zona central de recirculação é superior ao comparar com o comprimento da ZCR de $S=1,17$, ocorrendo da mesma forma para os dados experimentais.

Também para o escoamento a frio foi levantado o campo de pressão estática ao longo da linha de centro do escoamento a partir de um ponto a jusante do queimador até a saída da fornalha, para $S=1,17$ e $S=1,463$. O resultado é apresentado na Figura 5.3.

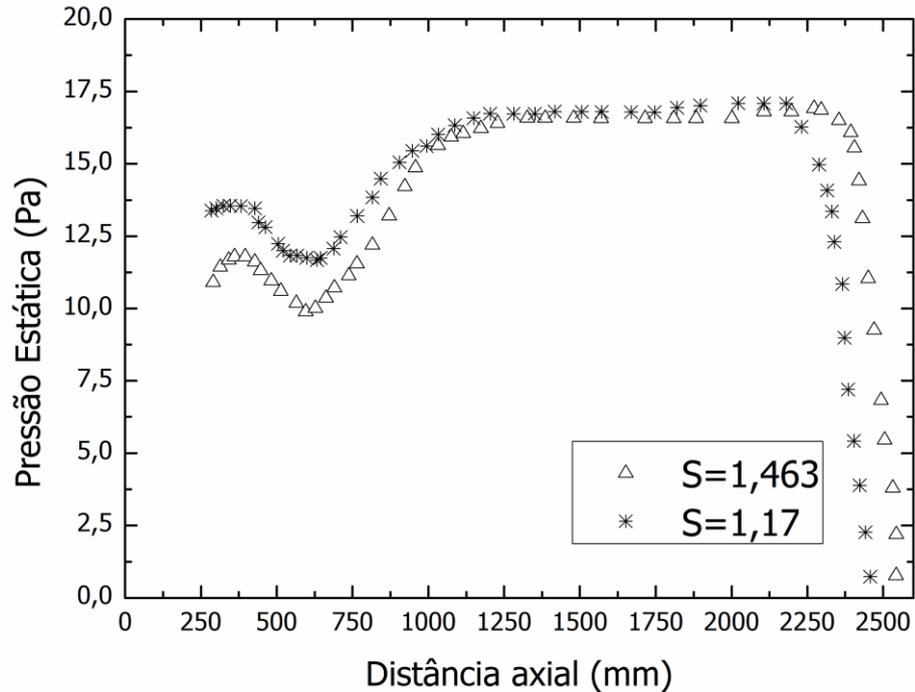


Figura 5.3 – Resultados da pressão estática na linha de centro do escoamento a jusante do queimador até a saída da câmara de combustão.

Pode-se constatar que a queda de pressão estática logo a jusante do queimador caracterizou a existência da ZCR ocorrendo para os dois números de rotação simulados 1,17 e 1,463, uma vez que esta região de baixa pressão é responsável pela iniciação do processo de despreendimento de vórtices, e pela geração da ZCR. Além disso, o campo da pressão auxilia a visualizar o comprimento da ZCR, que ficou caracterizado a jusante do queimador até a distância de 400 mm à 1400 mm. A partir desta distância a pressão volta a crescer estabilizando em 15 Pa caracterizando a região de escoamento desenvolvido. A queda brusca de pressão próximo à saída da fornalha foi influenciada pela condição de fronteira estabelecida.

A fim de caracterizar a presença da ZCR foram também analisados contornos de velocidade axial e linhas de corrente para os diferentes valores do número de *swirl*. Os resultados são apresentados nas Figuras 5.4, 5.5 e 5.6. Verifica-se que a ZCR pode ser

identificada na região em que ocorre a recirculação a jusante do queimador a partir da parede até o centro do escoamento, pelo valor negativo da componente axial da velocidade.

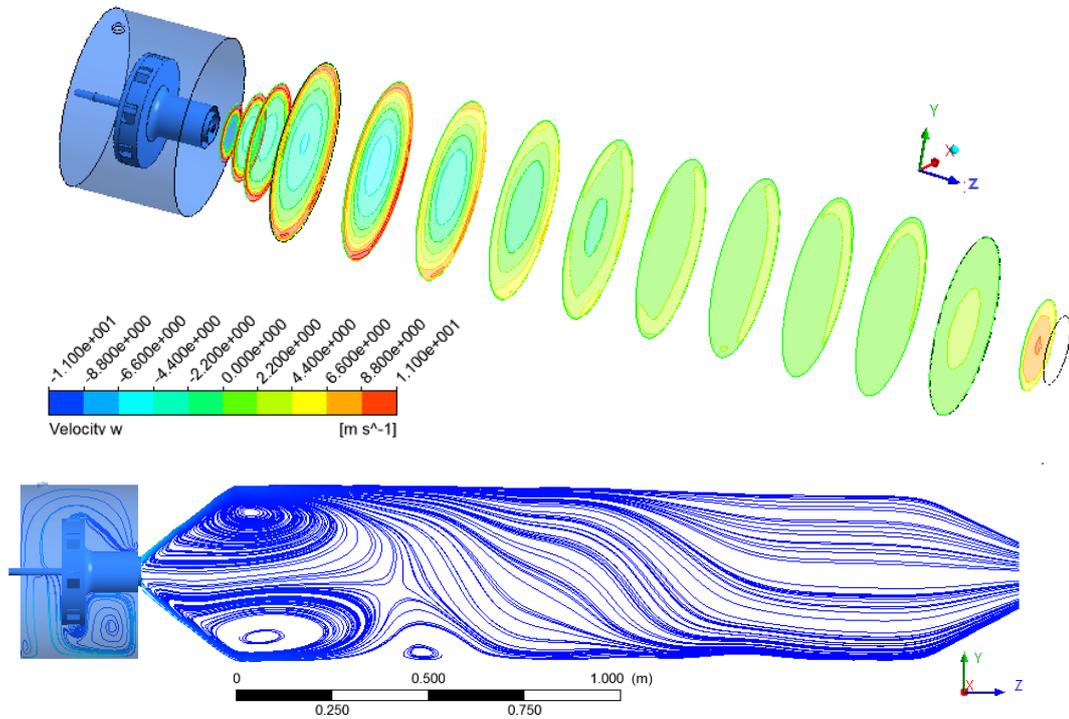


Figura 5.4 – Contornos de velocidade axial no plano x-y e linhas de corrente no plano central y-z. $S = 1,17$.

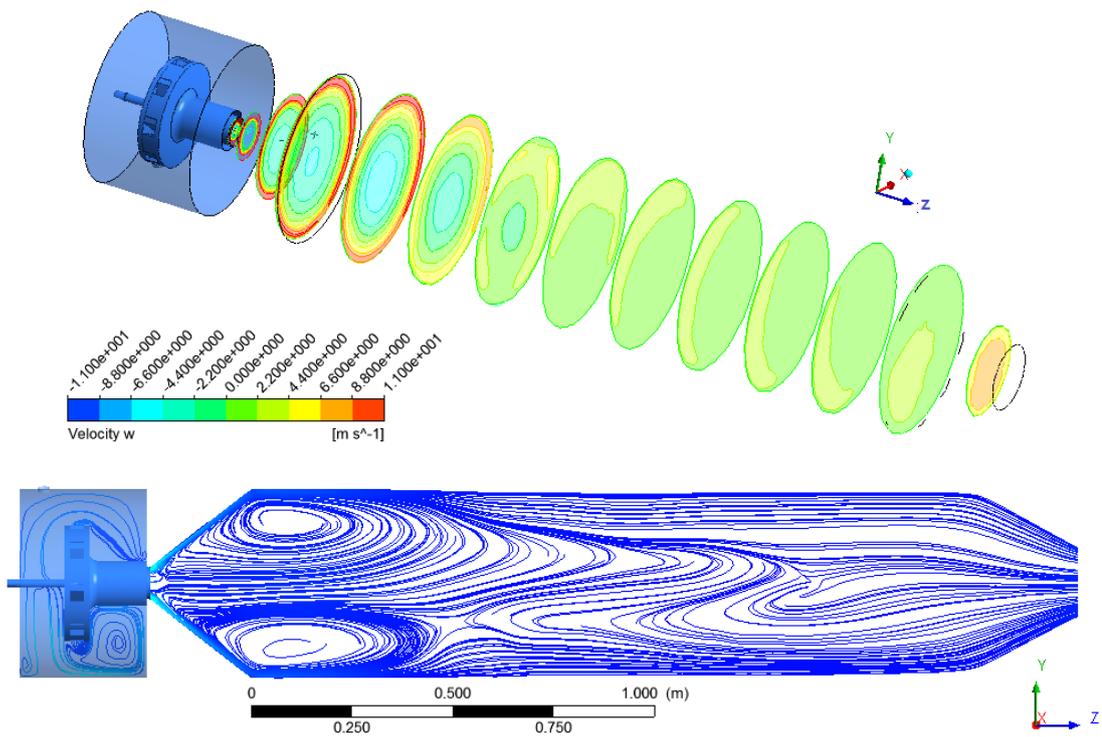


Figura 5.5 – Contornos de velocidade axial no plano x-y e linhas de corrente no plano central y-z. $S = 1,315$.

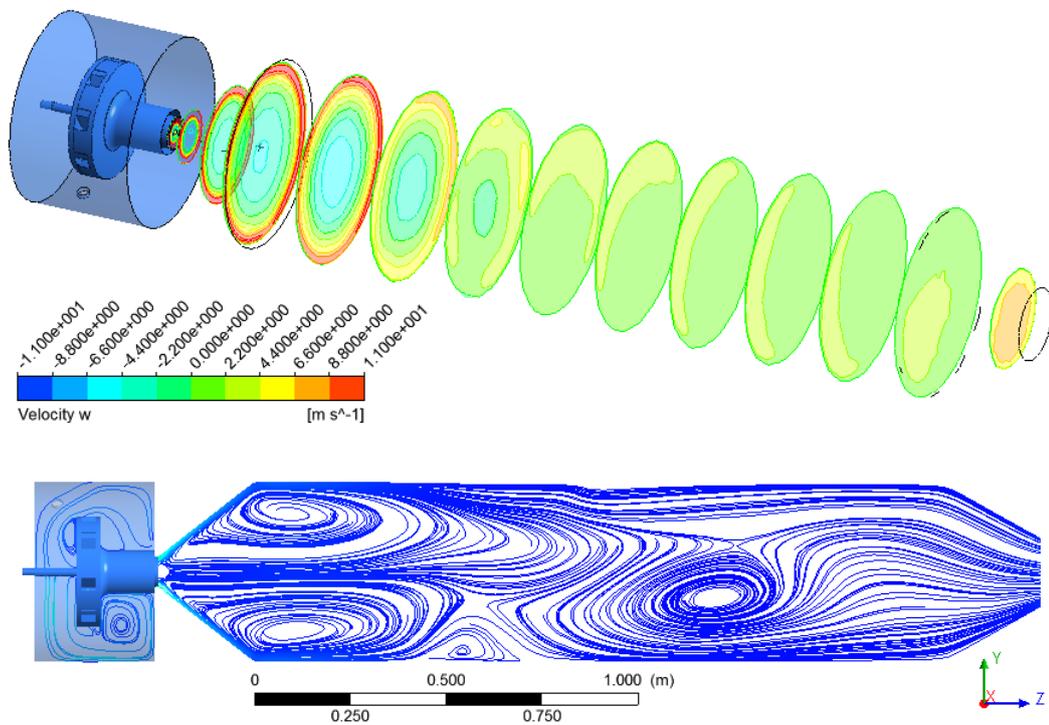


Figura 5.6 – Contornos de velocidade axial no plano x-y e linhas de corrente no plano central y-z. $S = 1,463$.

A partir dos resultados apresentados verifica-se que o modelo , é capaz de reproduzir o fenômeno da ZCR em concordância com os resultados experimentais. Os resultados calculados apontam que o comprimento da ZCR varia entre 400 mm e 1400 mm com o aumento do número de rotação.

5.2 Adequação da Função de Parede Adotada

O escoamento turbulento junto à parede é caracterizado em três regiões em função do mecanismo de transporte de quantidade de movimento predominante. Na subcamada limite viscosa o transporte devido à difusão molecular, é dominante, enquanto difusão e transporte turbulento coexistem e têm a mesma ordem de grandeza na subcamada limite de amortecimento. A região mais afastada da parede é a camada limite turbulenta, em que predomina o mecanismo turbulento.

Para garantir a correta discretização das equações de transporte junto à parede, a fim de prover uma correta modelagem da transferência de calor e da tensão de cisalhamento junto à superfície é utilizado o parâmetro y^+ . A distância y^+ caracteriza a espessura da subcamada limite viscosa. Tipicamente deve ser atendido o critério de $5 \leq y^+ \leq 10$.

Ao avaliar a solução de y^+ , apresentado na Figura 5.7, verifica-se que o critério é satisfeito na maior parte do domínio.

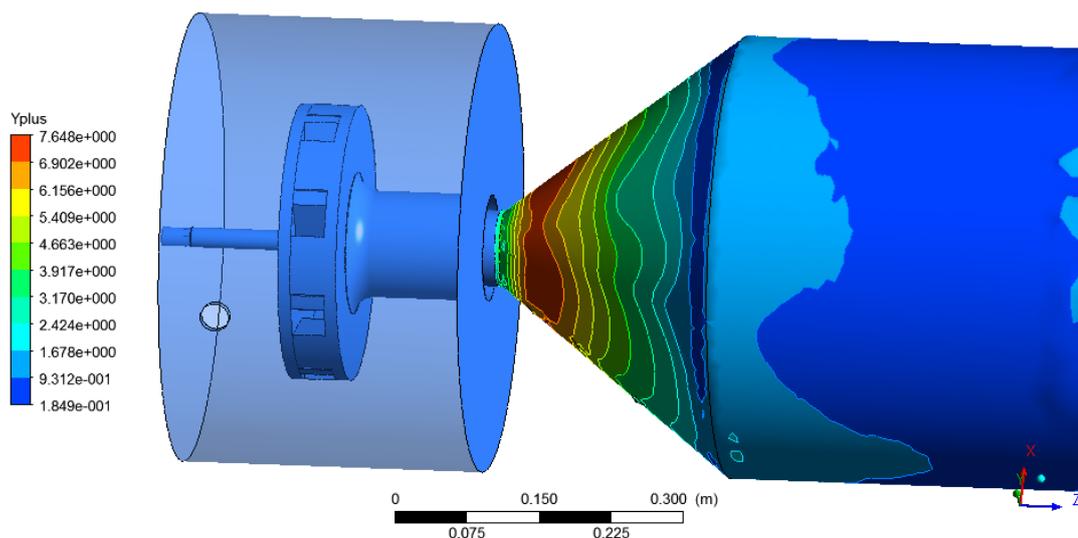


Figura 5.7 – Parâmetro y^+ descrito sobre a região de parede da fornalha. $S=1,463$.

A solução para y^+ fornecida pela malha discreta na região de parede foi tão importante quanto à geração para o restante do domínio geométrico, pois o processo de geração de malha envolveu diversos parâmetros. Dentre eles, o mais importante, foi o tamanho máximo de elemento, o qual pode ser selecionado por regiões, quando se trata de geometrias complexas com grande variação nas dimensões como, por exemplo, a largura do canal do queimador, a fornalha, e a lança do combustível. Ao gerar a malha para o número de rotação mais intenso, percebeu-se alto grau de dificuldade na obtenção da qualidade de malha, com elementos altamente não uniformes gerados no domínio da fornalha, com variação desde a ordem de 2 mm no queimador até 60 mm na fornalha. Deste modo, para corrigir o problema foi necessário ajustar o tamanho máximo do elemento pertencente à fornalha de 60 mm para 20 mm, o que acarretou um grande número de elementos, e elevado custo computacional.

A partir da análise das características da ZCR via escoamento a frio, e garantindo a capacidade de reproduzir um campo de uma ZCR para os números de *swirl* simulados, passou-se a incluir o modelo de combustão e emissão como é visto na próxima seção.

5.3 Combustão e Emissão de NO_x

O objetivo da simulação da câmara de combustão dotado com queimador de gerador de rotação com blocos móveis estudado por Mafra (2010) foi o de verificar a influência da rotação do escoamento sobre o comportamento da chama e emissão dos poluentes, em particular os NO_x. A Figura 5.8 mostra o campo da fração mássica do combustível em função do número de rotação.

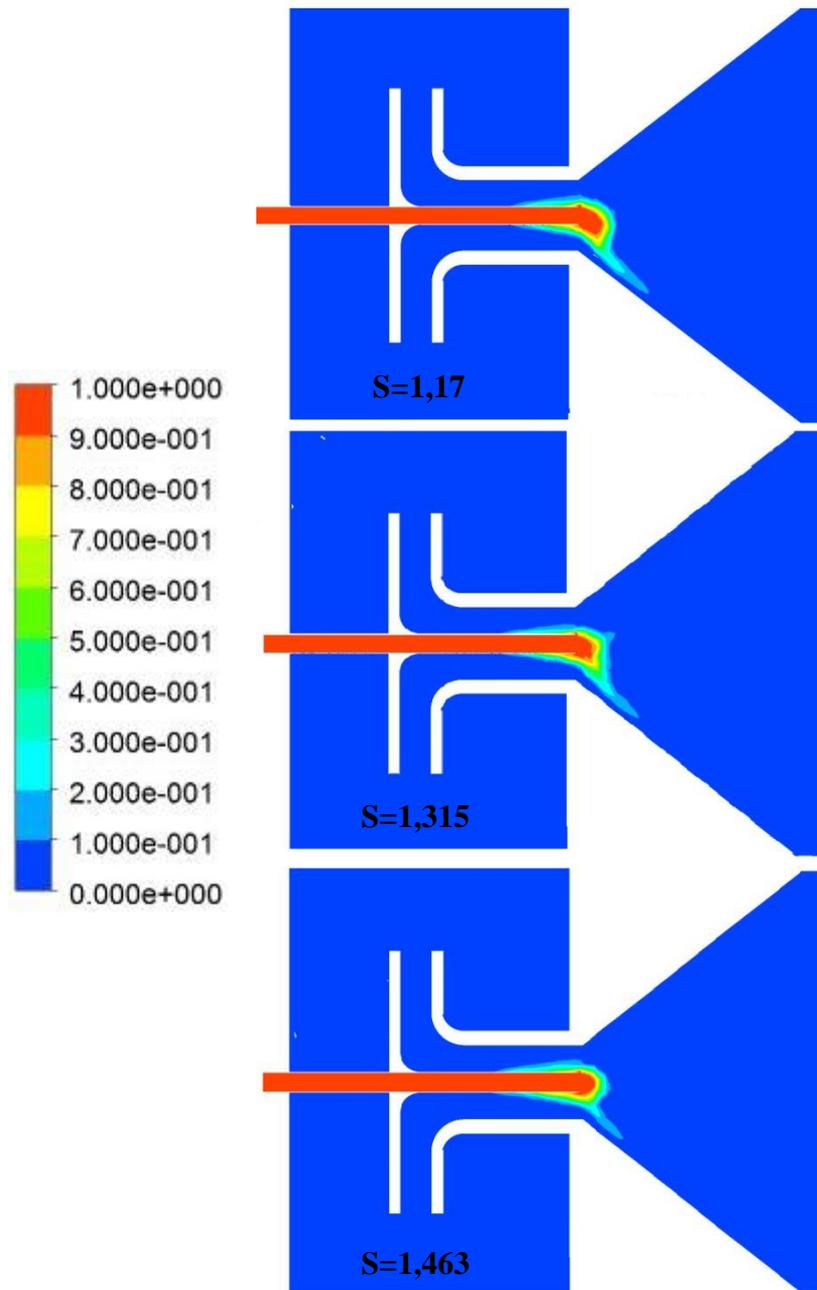


Figura 5.8 – Campo da fração mássica de propano obtido no plano central para $S=1,17$; $S=1,315$ e $S=1,463$.

A análise dos campos não permite concluir que o aumento do número de rotação afete o comprimento da chama. Era esperado que o aumento da intensidade do escoamento reverso resultante do aumento do número de *swirl* levasse a alguma modificação da forma da chama. Na faixa estudada, entretanto, só é possível verificar que a chama fica confinada em uma região relativamente pequena junto à saída do queimador notando-se que, para $S=1,463$, o mais intenso, revela uma forma da chama pouco menos dispersa quando comparada com as demais.

O comportamento da composição dos gases de saída de combustão em função do número de rotação é retratado através da fração mássica do CO_2 apresentado na Figura 5.9.

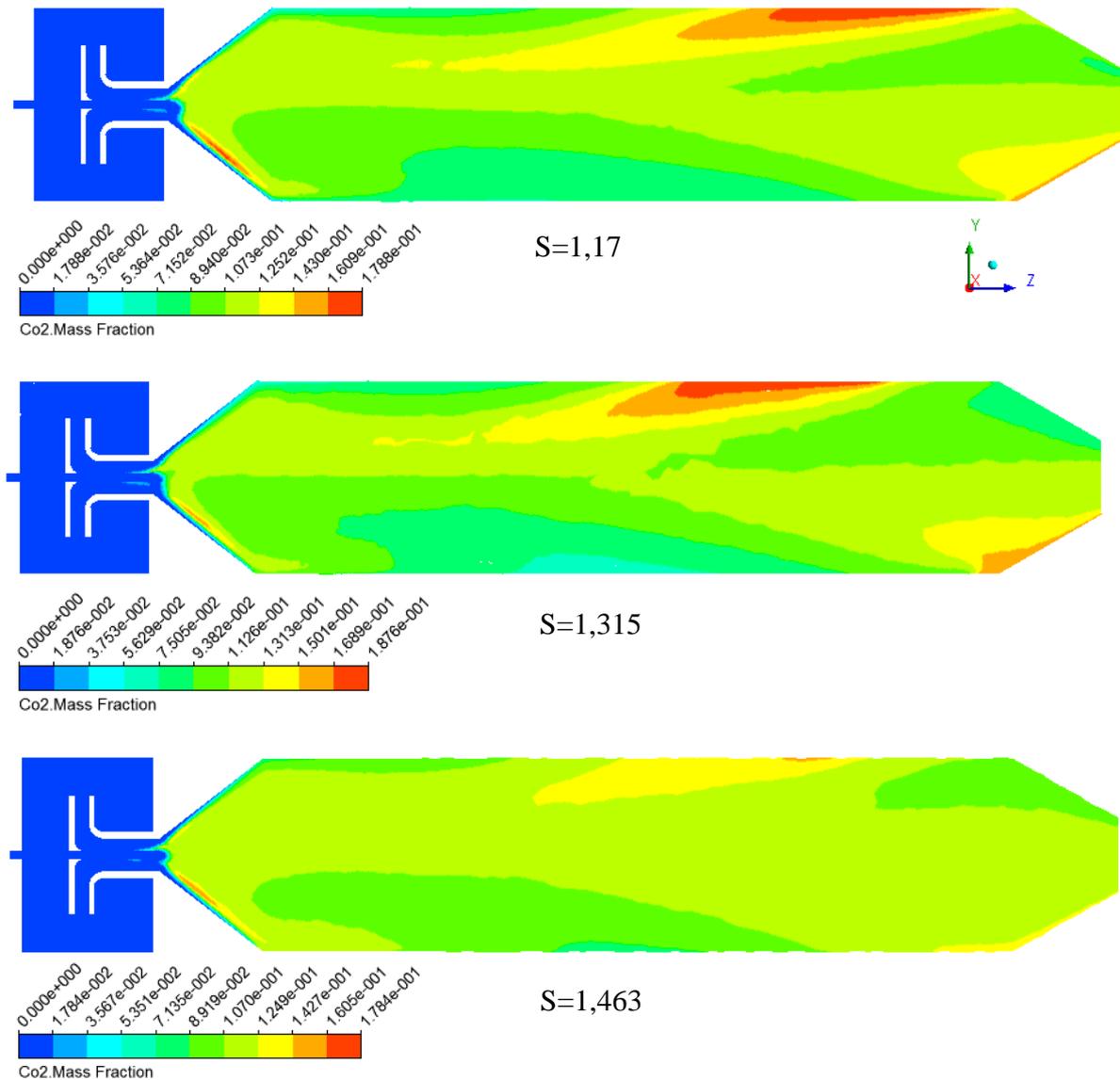


Figura 5.9 – Campo da fração mássica do CO_2 obtido no plano central para $S=1,17$; $S=1,315$ e $S=1,463$.

É interessante notar que na saída da câmara de combustão a fração de CO_2 está de acordo com o esperado da combustão completa de propano com o excesso de ar prescrito. Entretanto, causa estranheza a alta concentração de CO_2 em distâncias significativamente grandes da chama, uma vez que era esperado que a turbulência promovesse a mistura.

Da Figura 5.9 tem-se que, aparentemente, o aumento da turbulência que acompanha o aumento do número de rotação favorece a homogeneização.

A evolução da formação do CO na combustão para os números de *swirl* considerados neste trabalho é apresentada na Figura 5.10. Verifica-se que a maior concentração de CO ocorre na região próxima da chama, reforçando a hipótese de que ocorre a combustão completa do combustível.

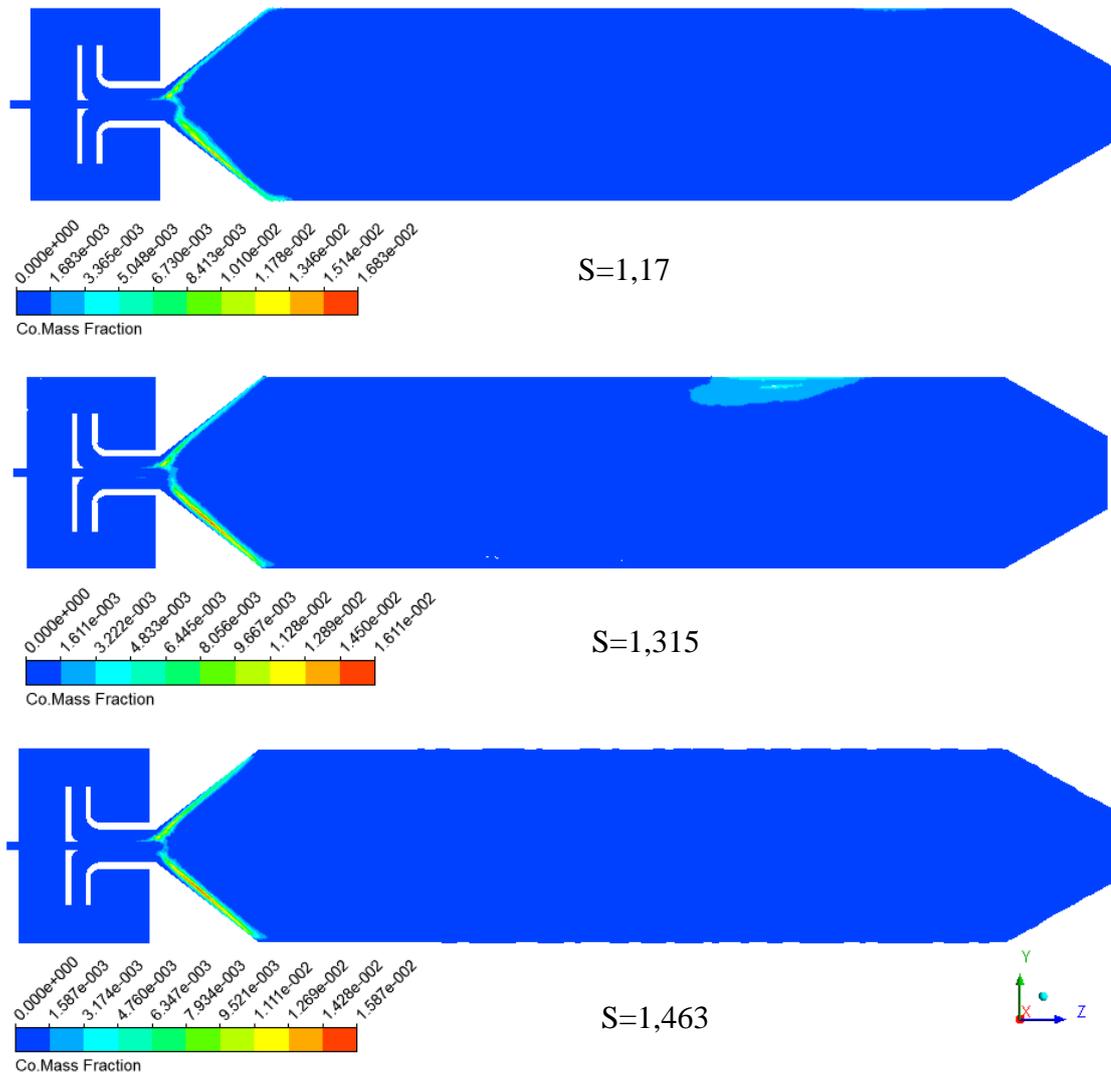


Figura 5.10 – Campo da fração mássica de CO obtido no plano central y-z para $S=1,17$; $S=1,315$ e $S=1,463$.

Considerando os mecanismos de formação de NOx em chamas, é esperado que a ocorrência da ZCR nos escoamentos com rotação resulte na diminuição de emissão de NOx pelo aumento da concentração de produtos da combustão recirculados, e consequente diminuição da concentração de oxigênio, na região da chama.

A partir dos resultados da simulação do escoamento com reação química foi avaliado o comportamento da emissão de NOx. Os resultados são apresentados na Figura 5.11.

Verifica-se que a formação de NO_x acompanha a variação de temperatura evidenciando que o mecanismo predominante é o NO_x térmico.

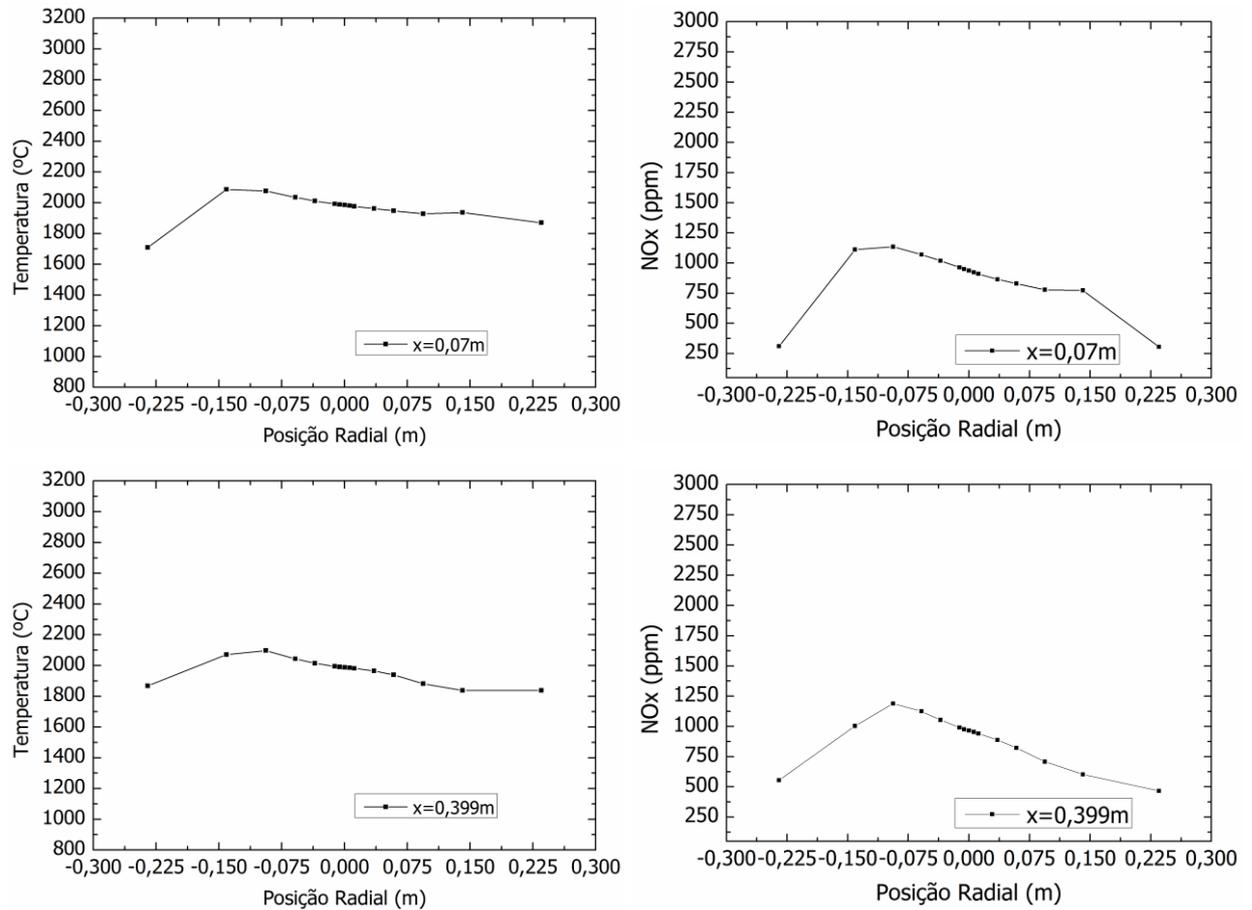


Figura 5.11 – Perfil de temperatura e NO_x obtidos ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais de x . $S=1,463$.

O comportamento da temperatura é apresentado na Figura 5.12 e Figura 5.13. Pode-se verificar que o aumento do número de *swirl* resulta em maior homogeneização da temperatura na câmara de combustão. Além disso, o nível de temperatura atingido na câmara é o esperado para a combustão adiabática de propano com o excesso de ar considerado neste trabalho.

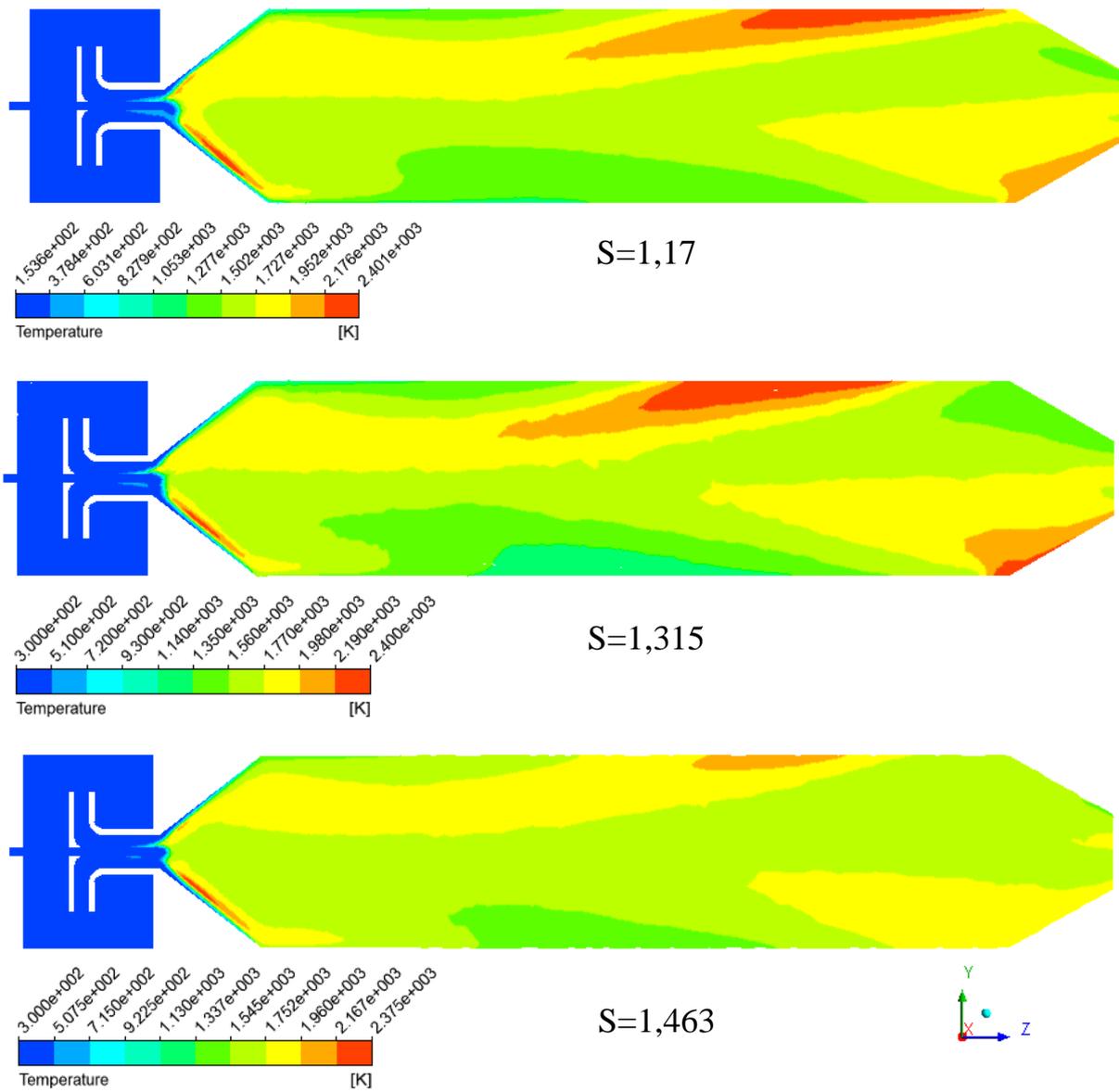


Figura 5.12 – Campo de temperatura obtido no plano central y-z para diferentes números de *swirl*. $S=1,17$, $S=1,315$ e $S=1,463$.

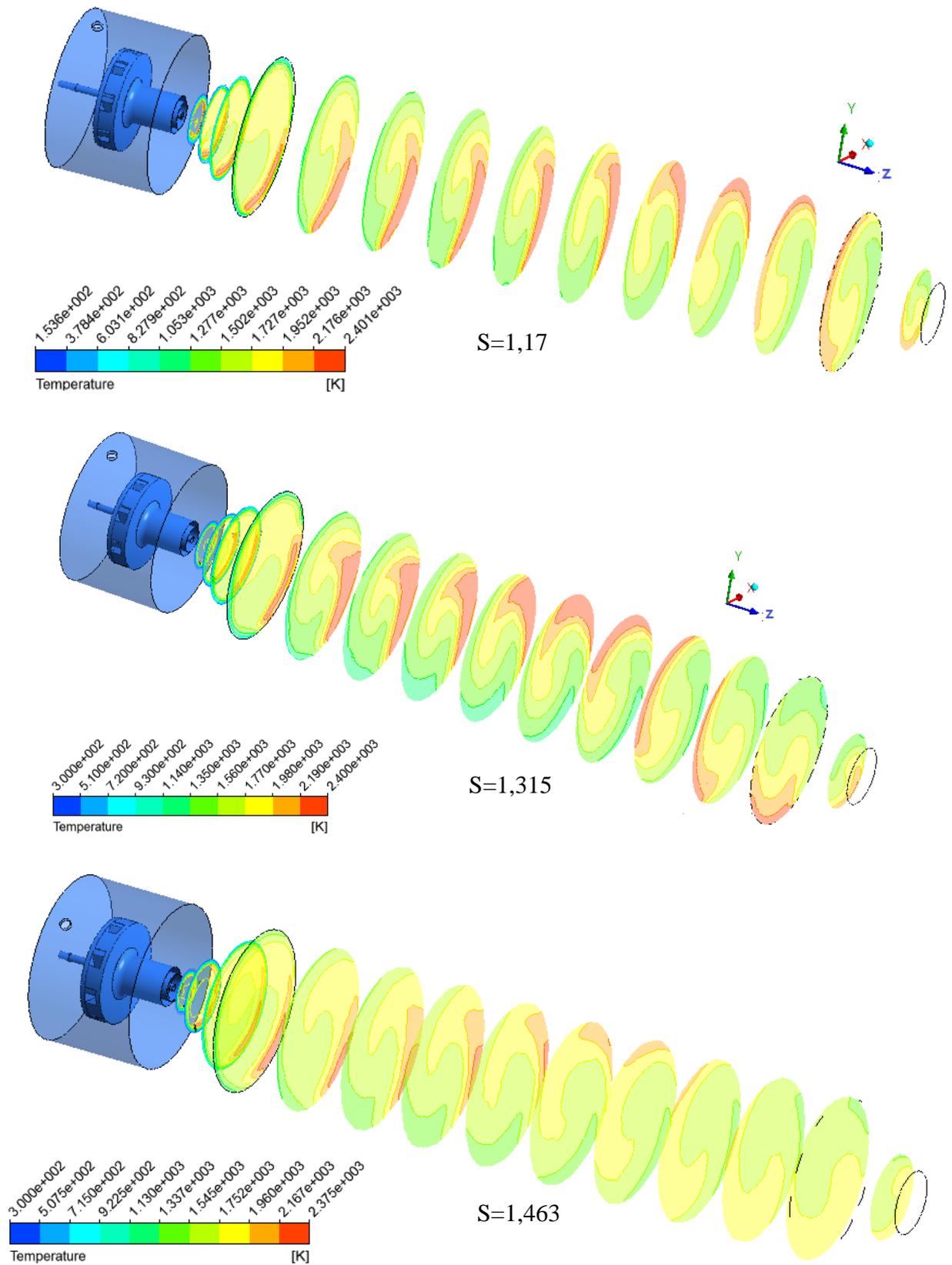


Figura 5.13 – Campo de temperatura obtido em planos x-y equidistantes para diferentes números de *swirl*. $S=1,17$, $S=1,315$ e $S=1,463$.

A partir da análise dos perfis de O_2 apresentados nas Figura 5.14 e Figura 5.15 percebe-se uma maior concentração na região central da fornalha à medida que se aproxima do queimador, parecendo haver uma tendência de assumir um perfil plano a medida que se afasta, ocorrendo para os dois números de *swirl* avaliados. Estes dados reforçam a hipótese de que o escoamento é desenvolvido após a região da ZCR como foi apresentado através dos perfis de velocidade axial na Figura 5.1. Este comportamento foi também observado por Mafra (2000) uma vez que, o mesmo assumiu uma distribuição axissimétrica realizando a medição radial a partir da posição zero (0) até o raio interno da fornalha (r). Os dados experimentais dessa medição são ilustrados pela Figura 5.16.

Ao analisar os perfis de temperatura ao longo da fornalha apresentados pelas Figuras 5.17 e 5.18 percebe-se pequena oscilação, em torno de 100 K na região mais central, ocorrendo desde o queimador até a saída da fornalha, para ambos os níveis do número de *swirl* avaliados. Quando o campo de temperatura é comparado ao da fração mássica de O_2 (Figuras 5.14 e 5.15), percebe-se a relação inversamente proporcional, ou seja, em regiões de maior concentração de O_2 o nível de temperatura atinge um valor inferior e vice-versa demonstrando que o excesso de ar, neste caso o O_2 , pode ser utilizado para controlar a temperatura em processos de combustão. Esse comportamento qualitativo, embora um tanto afastado da condição experimental foi percebido experimentalmente por Mafra (2000) como indicado na Figura 5.19.

Os resultados da formação de NO_x calculada em partes por milhões (ppm) sobre os perfis no interior da fornalha, são apresentadas nas Figuras 5.20 e 5.21. Percebe-se que para o número de *swirl* $S=1,463$ (o mais intenso) fornece uma menor formação quando comparado ao campo de NO_x fornecido por $S=1,315$, ocorrendo em todos os perfis. Isto ocorre de forma controversa, ao comparar com dados experimentais de Mafra (2000) como indicado pela Figura 5.22.

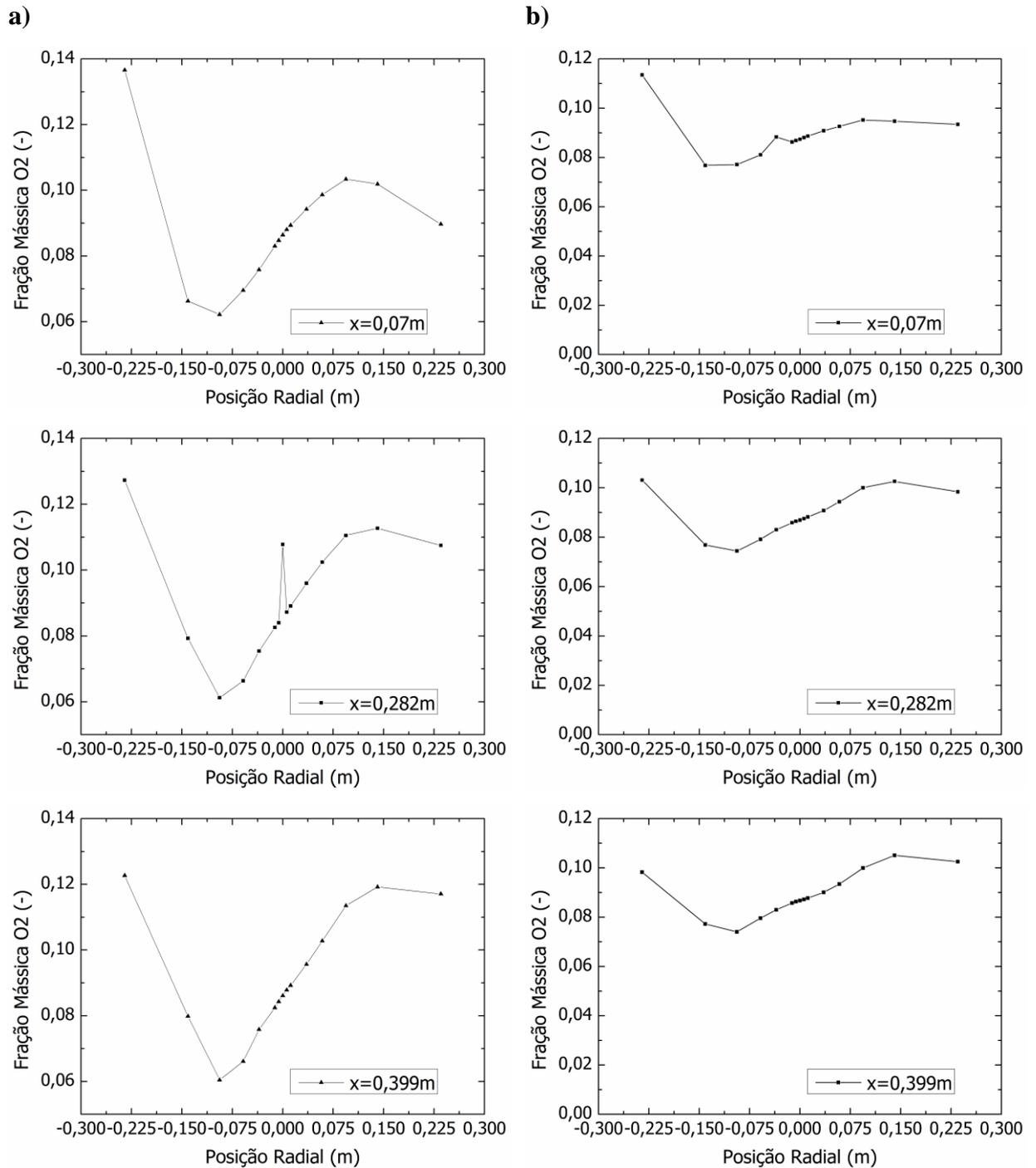


Figura 5.14 – Perfil da fração mássica de O₂ obtidos ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. a) S=1,315. b) S=1,463.

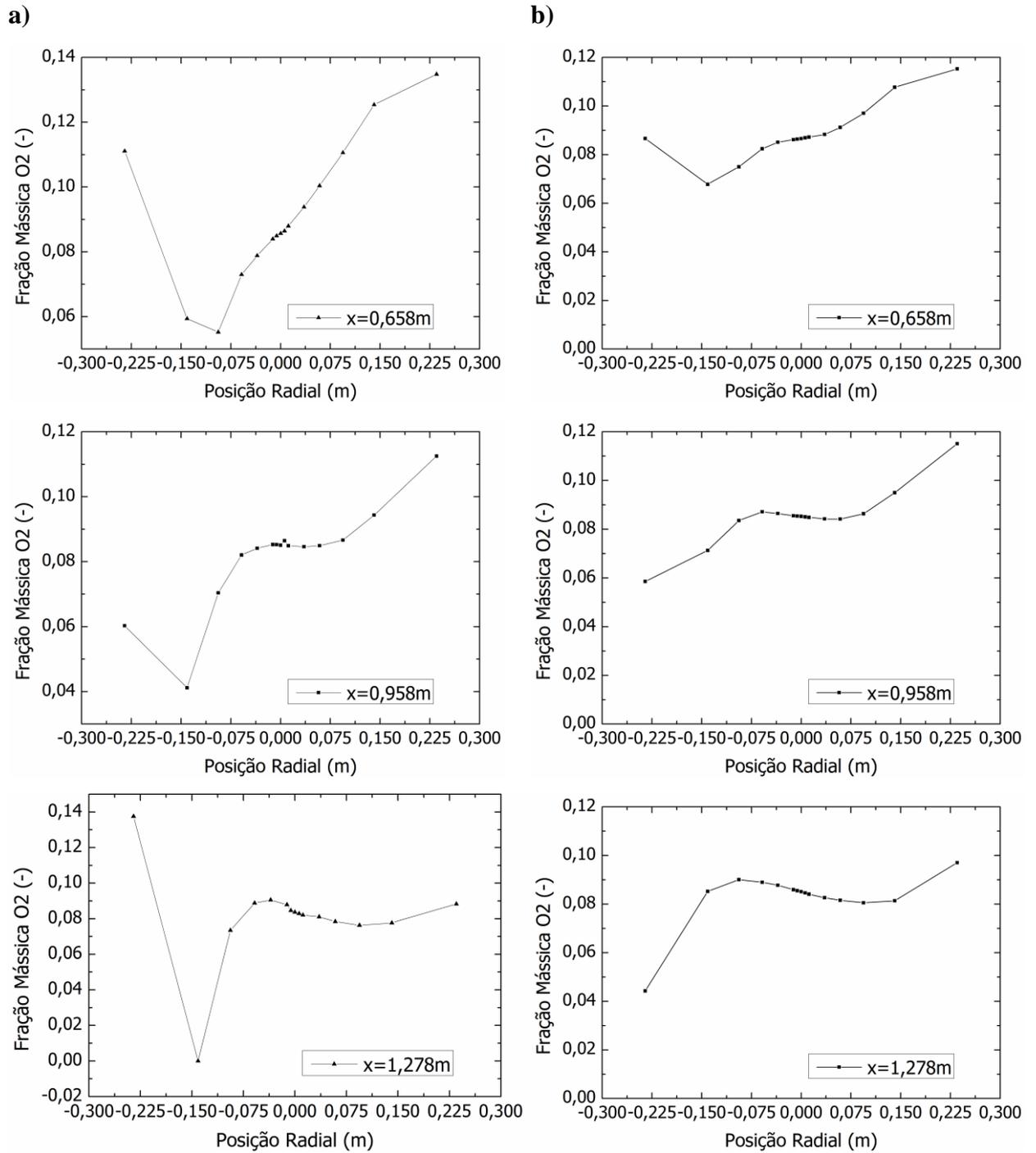


Figura 5.15 – Perfil da fração mássica de O_2 obtidos ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. a) $S=1,315$. b) $S=1,463$.

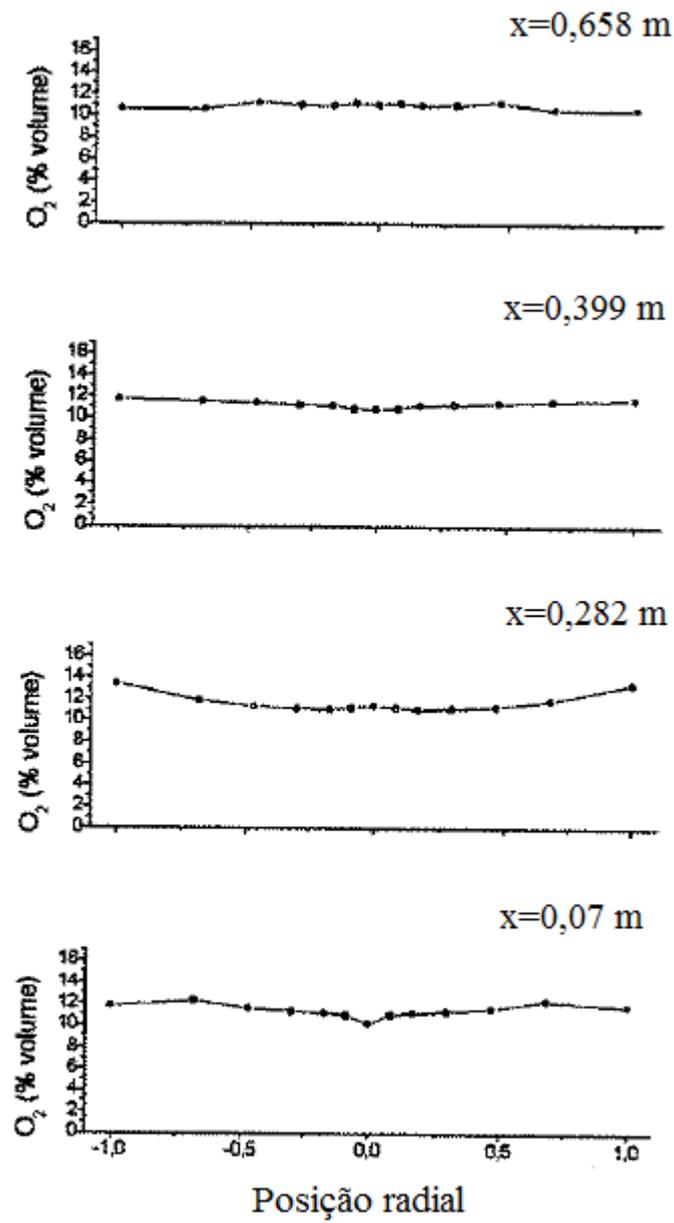


Figura 5.16 – Perfis de O₂ obtidos experimentalmente ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. S=1,315. [Mafra, 2000].

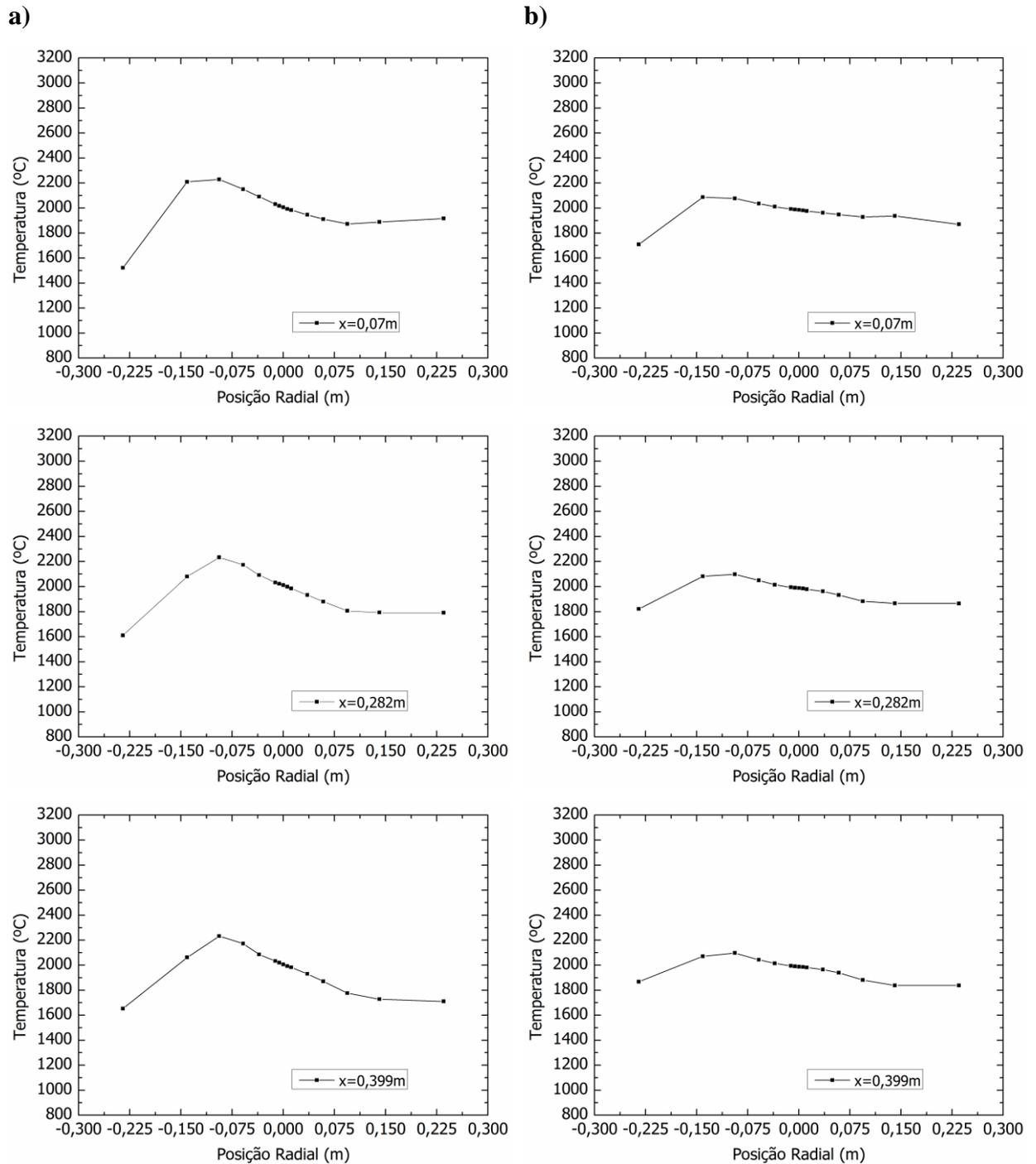


Figura 5.17 – Perfis de temperatura obtidos ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. a) $S=1,315$. b) $S=1,463$.

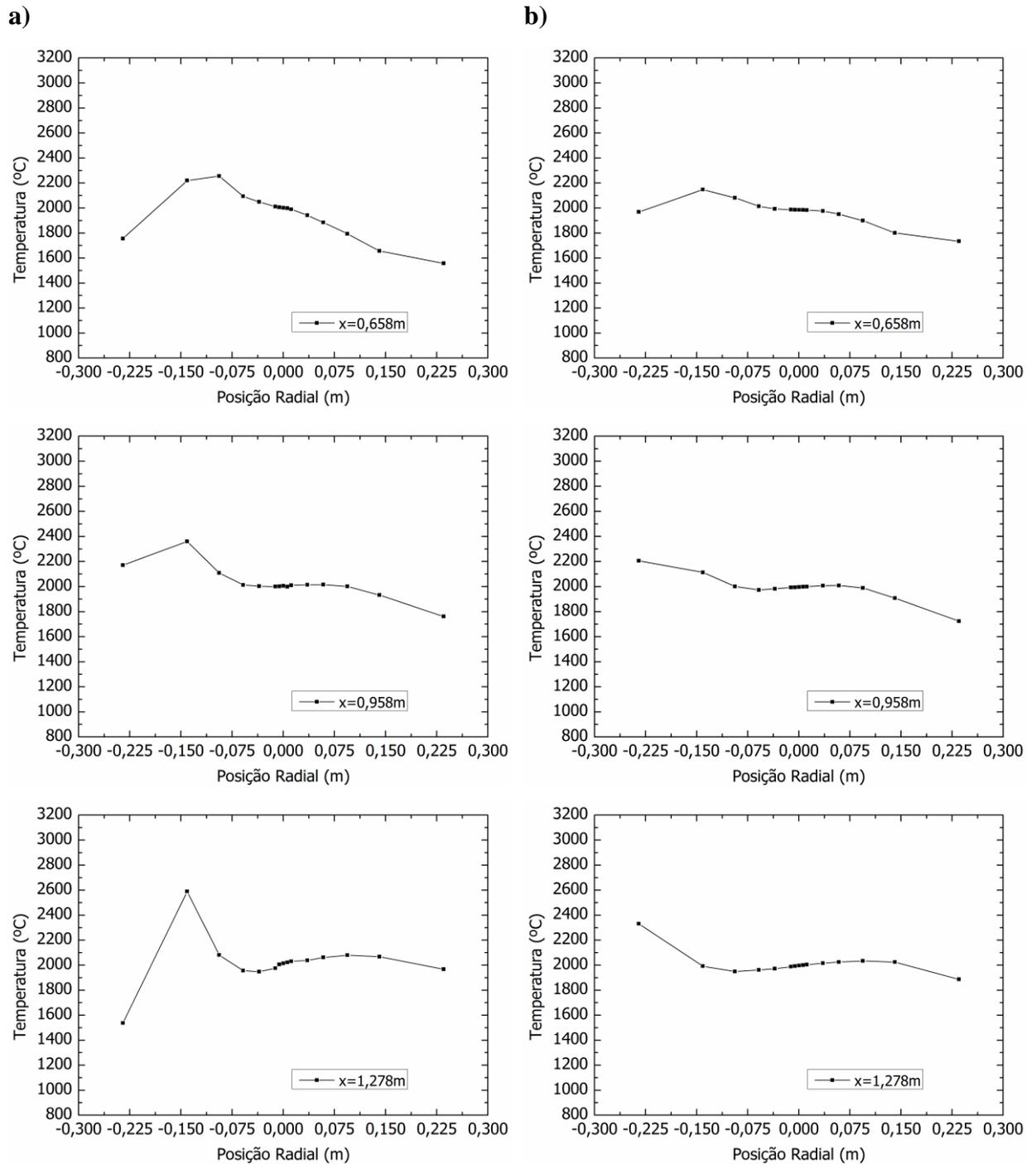


Figura 5.18 – Perfis de temperatura obtidos ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. a) S=1,315. b) S=1,463.

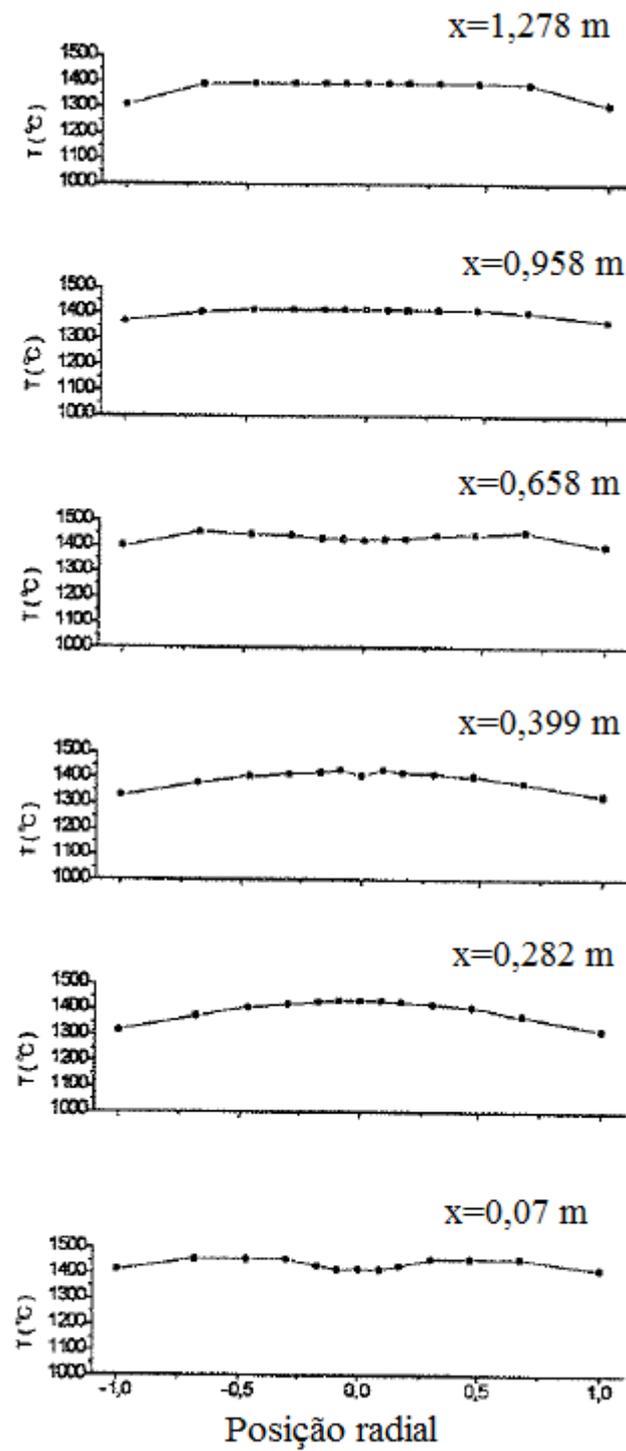


Figura 5.19 – Perfis de temperatura obtidos experimentalmente ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. $S=1,315$. [Mafra, 2000].

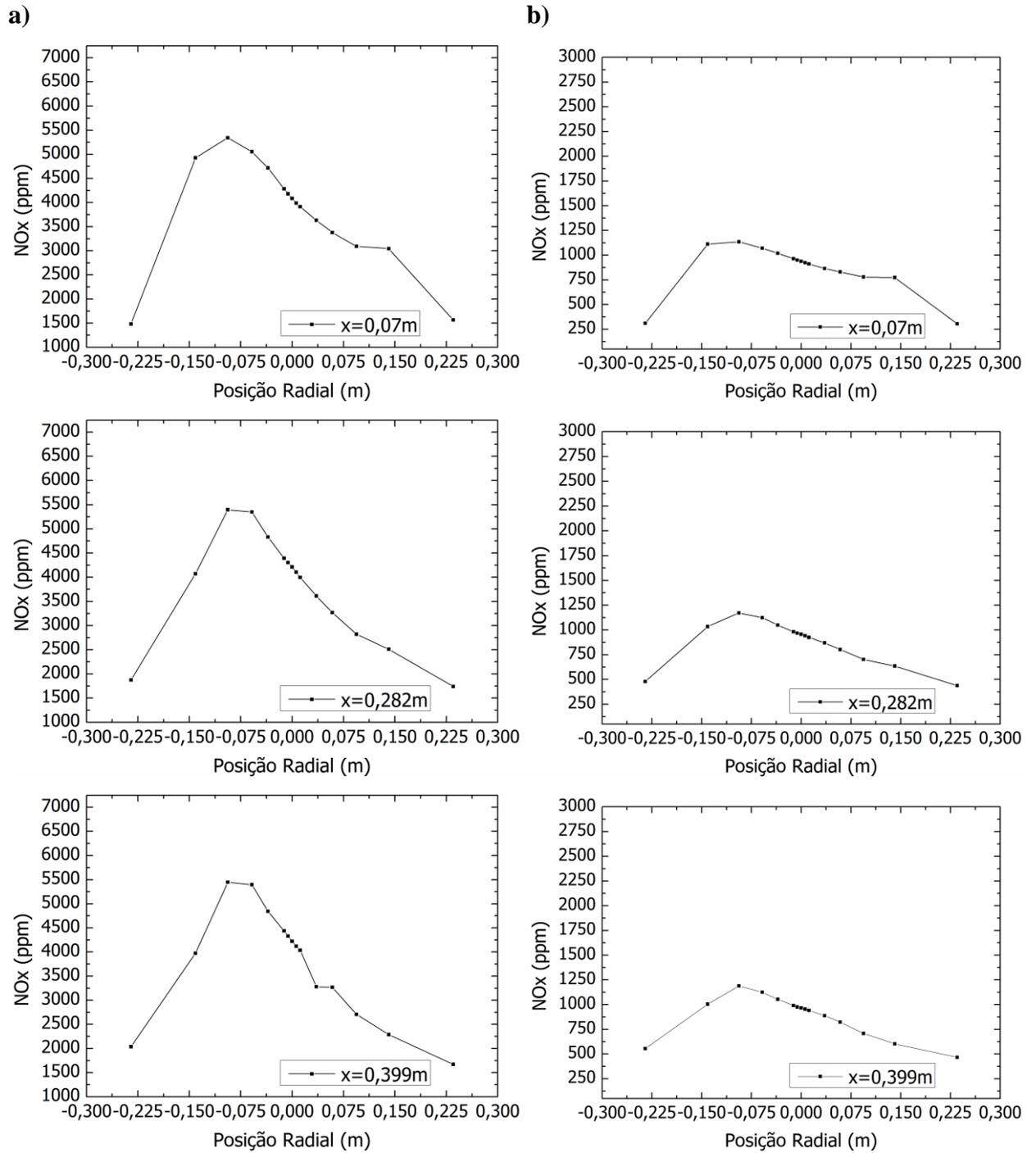


Figura 5.20 – Perfis de NOx obtidos ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. a) $S=1,315$. b) $S=1,463$.

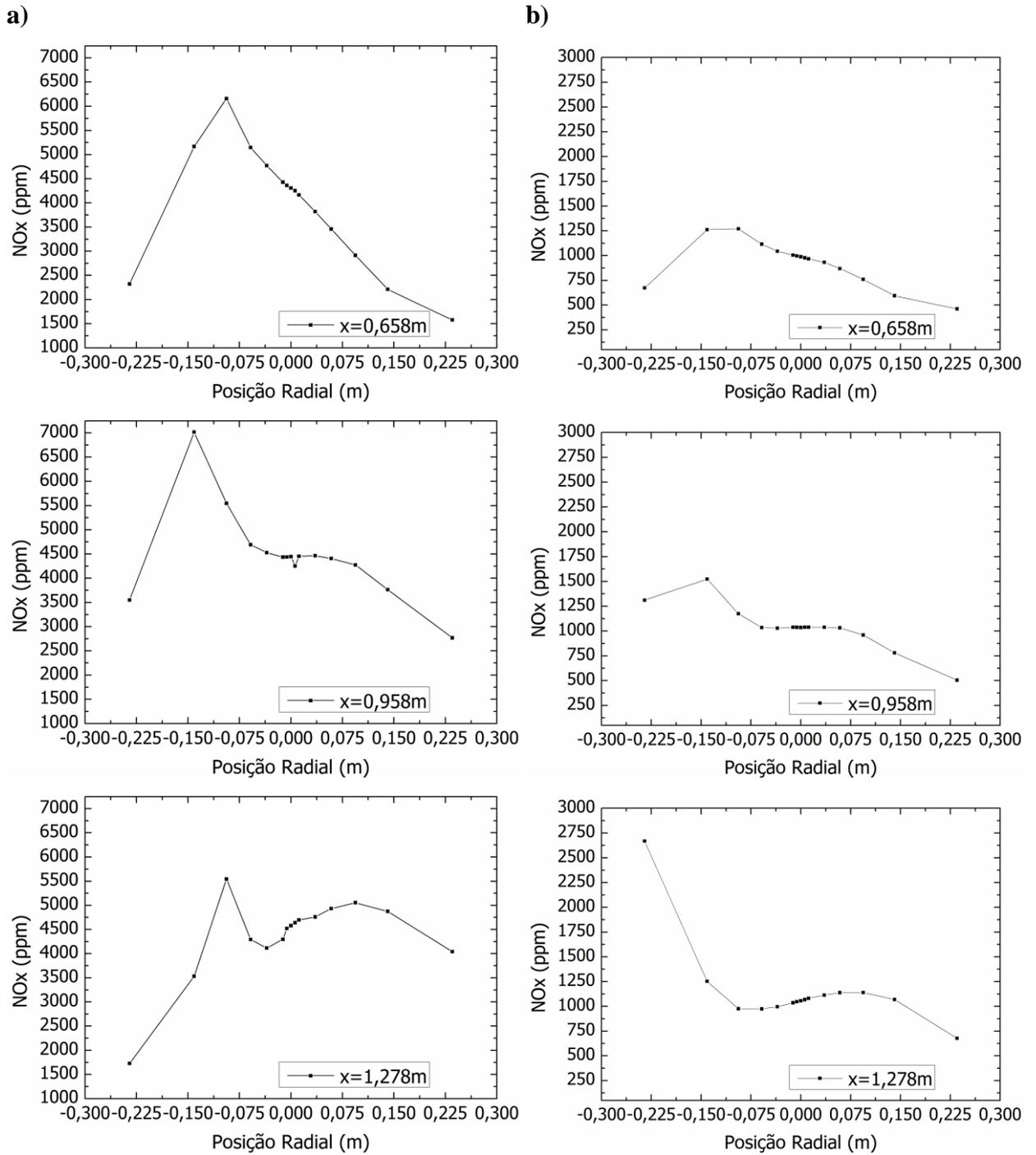


Figura 5.21 – Perfis de NOx obtidos numericamente ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. a) $S=1,315$. b) $S=1,463$.

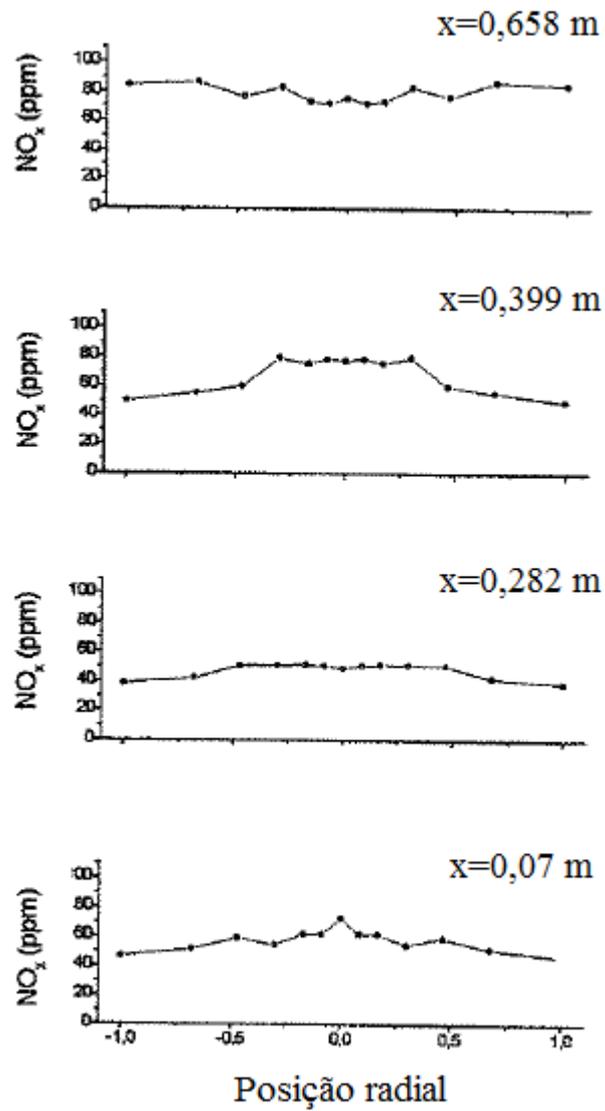


Figura 5.22 – Perfis de NO_x obtidos experimentalmente ao longo do diâmetro da fornalha para diversas posições axiais. S=1,315. [Mafra, 2000].

A ordem de grandeza dos resultados calculados de formação de NO_x nos planos internos do escoamento é duas vezes superior (200 %) às das medições. Isto é confirmado pela avaliação dos índices de emissão na seção de saída da fornalha conforme apresentado na Tabela 5.1.

Tabela 5.1 – Emissão de NO_x da câmara com *swirler*.

Número de <i>Swirl - S</i>	NO _x calculado (ppm)	NO _x experimental [Mafra, 2000] (ppm)
1,17	3964	45
1,315	3995	45
1,463	1223	55

Estes resultados reforçam a necessidade de aprofundar o estudo da modelagem da interação da turbulência com cinética de reações químicas e da modelagem da turbulência como promotor de mistura no escoamento.

6 CONCLUSÃO

Neste trabalho a câmara cilíndrica dotada de queimador de blocos móveis foi modelada numericamente com o objetivo de estudar a influência do número de rotação sobre a combustão e a emissão de poluentes. Os resultados da simulação da câmara de combustão, realizada através do pacote computacional *Fluent*, foram comparados com os dados experimentais reportados por Mafra (1997).

O modelo implementado incluiu as equações de Navier Stokes, a equação da continuidade e de balanço de energia, além das equações de transporte de k e ω (modelo $k-\omega$ SST). Propano foi considerado como combustível modelo, com a combustão modelada por mecanismo de reações de dois passos. A interação turbulência e cinética química foi tratada pela aplicação do modelo de combustão *Eddy Dissipation/Finite Rate*. A formação de NOx foi calculada considerando-se o mecanismo de formação de NOx térmico a partir dos resultados da simulação.

A partir da implementação do método GCI, avaliando-se a velocidade axial média, verificou-se a qualidade de malha e o número de elementos necessários para aplicação dos três casos simulados. O índice forneceu um valor de modo a garantir a qualidade de malha.

A discussão dos resultados da simulação mostrou que o modelo implementado reproduz de forma satisfatória o comportamento do escoamento com rotação, tendo-se verificado a formação de uma zona central de recirculação (ZCR) no escoamento.

A análise dos resultados de temperatura, composição e emissão de NOx permitiu identificar que, embora a ordem de grandeza dessas variáveis esteja de acordo com o previsto para a combustão de propano com o excesso de ar adotado, é questionável se os resultados da modelagem reproduziram de forma adequada a capacidade de promoção de mistura que é esperada do escoamento turbulento. Além disso, a grande discrepância encontrada entre os valores calculados e experimentais da emissão de NOx indicam a necessidade de aprofundar o estudo da interação da cinética química da combustão de propano.

Desta forma é sugerido que futuros trabalhos sejam desenvolvidos com o intuito de resolver estas lacunas a fim de permitir que o modelo seja usado efetivamente como ferramenta de desenvolvimento de queimadores dotados de promotores de rotação e de apoio ao estudo de aerodinâmica de combustão.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Anapolski, J.L.P. e Hayashi, T.C. Numerical modeling of swirling flow in a combustion chamber. IX Escola Primavera de Transição e Turbulência, São Leopoldo-RS, ABCM, 2014.
- Ansys Fluent Theory Guide, v.13, 2010.
- Beér, M. J., Chigier, N. A. **Combustion Aerodynamics**. London, Applied Science Publishers LTD, pp.102, 1972.
- Bizzo, W.A. Emissão de monóxido de carbono e hidrocarbonetos totais em câmara de incineração – efeito do número de rotação e composição do combustível. Tese de Doutorado. Universidade Estadual de Campinas, São Paulo, Campinas, Brasil, 1997.
- Bourgouin, J.F. and Moeck, J. and Durox, D. and Schuller, T. Candel, S. “Sensitivity of swirling flows to small changes in the swirler geometry”. **Comptes Rendus Mecanique Académie des Science**, Vol.341, pp. 211-219, 2013.
- Claypole, T.C. and Syred, N. The effect of swirl burner aerodynamics on NOx formation. **Symposium (International) on Combustion**, v.18, pp.81-89, 1981.
- Coelho, P. e Costa, M. **Combustão**. Edições Orion, 2007.
- Deschamps, C.J. **I Escola de Primavera de Transição e Turbulência**. pg.103, 1998.
- Durox, D. and Moeck, J.P. and Bourgouin, J.F. and Morenton, P. and Viallon, M. and Schuller, T. and Candel, S. Flame dynamics of variable swirl number system and instability control. **Combustion and Flame**; 160, 1729-1742, 2013.
- Eldrainy Y.A., Saqr K.M., Aly H.S., Jaafar M.N., 2009. CFD insight of the flow dynamics in a novel swirler for gas turbine combustors. **International Communications on Heat and Mass Transfer**, Vol. 36, pp. 936-941.
- EPE – Empresa de Pesquisa Energética, Ministério de Minas e Energia. Plano Nacional de Energia 2030, 2008. Disponível em <http://www.epe.gov.br/PNE/Forms/Empreendimento.aspx>.
- Faler J.H, and Leibovich S. Disrupted states of vortex flow and vortex breakdown. **Physics of Fluids**; 20:1385±400, 1977.
- Fox, W. R. e McDonald, A.T. **Introdução à Mecânica dos Fluidos**. 4ª ed., LTC, Rio de Janeiro, 1998.
- Freire, A.P.S. **Transição e Turbulência**. Associação Brasileira de Ciências Mecânicas – ABCM, Rio de Janeiro – BR. p.68, 1998.

Freire, A.P.S., Menut, P. P. M. e Su, J. **Turbulência**. Associação Brasileira de Ciências Mecânicas – ABCM, Rio de Janeiro – BR. Vol.1. 2002.

Harvey, J.K. **Some observations of the vortex breakdown phenomenon**. Journal of Fluid Mechanics;14:585±92, 1962.

IPCC – Intergovernmental Panel on Climate Change. Climate Change Synthesis Report, 2014. Disponível em: <http://www.ipcc.ch/report/ar5/syr/>.

Leuckel, W. Swirl intensities, swirl types and energy losses of different swirl generating devices. **International Flame Research Foundation**, Ijmuiden, Holland, doc n° GO2/a/16, 1968.

Mafra, M.R.; Fassani, F.L.; Zanoelo, E.F e Bizzo, W.A. Influence of swirl number and fuel equivalence ratio on NO emission in an experimental LPG-fired chamber. Applied Thermal Engineering, v.30 pp.928–934, 2010.

Mafra, M.R. Estudo da influência do número de rotação na formação de NOx em uma câmara de combustão cilíndrica. Dissertação de Mestrado. Universidade Estadual de Campinas, São Paulo, Campinas, Brasil, 2000.

Magnussen, B.F., Hjertager, B.H. On Mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. **The combustion Institute**, 1976.

Maliska, C.R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. LTC, 1995.

Menter, F. R. Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications. **AIAA Journal**. 32(8). 1598–1605. August, 1994.

Miller, J.A., Bowman, C.T. Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion. **Progress in Energy and Combustion Science**, v.15, p.287-338, 1989.

Möller, S.V. e Silvestrini, J.H. Turbulência: Fundamentos. **IV Escola de Primavera de Transição e Turbulência**, v.4, p. 1-31, 2004.

NASA – Administração Nacional da Aeronáutica e do Espaço. Examining Spatial Grid Convergence, 2008. Disponível em <http://www.grc.nasa.gov/WWW/wind/valid/tutorial/spatconv.html>.

Negro, O.L. and O’Doherty, T. “Vortex Breakdown: a review”, **Progress in Energy and Combustion Science**, Vol.27, pp.431-481, 2000.

Neto, A. S. Fundamentos da Turbulência nos Fluidos. **III Escola de Primavera em Transição e Turbulência**, 2002.

Oliveira, P. O. Análise do Desempenho de uma Turbina Savonius Helicoidal com Torção 180° Empregando Simulação Numérica. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2014.

Özisik, M.N. **Heat Transfer**. Mc-Graw-Hill Book Company, 1st edn, New York, 1985.

Patankar, S.V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. McGraw-Hill, New York, 1980.

Roache, P. J. Perspective: A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies, **Journal of Fluids Engineering**, v.116, p.405-413, 1994.

Sarpkaya, T. On stationary and travelling vortex breakdowns. **Journal of Fluid Mechanics** 45(3):545±59, 1971.

Schlichting, H. **Boundary Layer Theory**. McGraw-Hill, 1979.

Schmittl, P.; Günther, B.; Lenze, B.; Leuckel, W.; and Bockhorn, H. **Turbulent Swirling Flames: Experimental Investigation of the flow field and formation of nitrogen oxide**. Proceedings of the Combustion Institute, v.28, pp. 303–309, 2000.

Spalding, D. B., Development of the eddy-break-up model of turbulent combustion. **Symposium International on Combustion** 16 (1) 1657–1663, 1977.

Tennekes, H. e Lumley, J.L. **A First Course in Turbulence**. The MIT Press, Cambridge, M.A. 1972.

Turns, S.R., **An Introduction to Combustion Process: Concepts and Applications**, McGraw-Hill, Singapore, 2000.

UNEP – United Nations Environment Programme. Disponível em: <http://www.unep.org/newscentre/Default.aspx?DocumentID=2791&ArticleID=10931&l=en>. 2014.

Viskanta, R. Heat Transfer During Melting and Solidification of Metals. **Journal of Heat Transfer**, v. 110, p. 1205-1219, 1988.

Wang Y., Yang V., Yetter R.A. Numerical study on swirling flow in an cylindrical chamber. **AIAA Aerospace Sciences Meeting**, Reno, 42nd, Nevada, 2004.

Wilcox, C. D. **Turbulence Modeling for CFD**. California, DCW Industries Inc., pp.84-.87, 1993.

Williams, F. A. **Combustion Theory**. Combustion Science and Engineering Series, 2ed. Princeton University, 1985.