

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

MODELAGEM DA COMBUSTÃO PRÉ-MISTURADA DE METANO-AR EM MEIO
POROSO INERTE

por

Laura Marques Prandi

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

Porto Alegre, julho de 2017



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

MODELAGEM DA COMBUSTÃO PRÉ-MISTURADA DE METANO-AR EM MEIO
POROSO INERTE

por

Laura Marques Prandi

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

Prof^a. Dr^a. Thamy Cristina Hayashi
Coordenadora do Curso de Engenharia Mecânica

Área de Concentração: **Energia e Fenômenos de Transporte**

Orientadora: Prof^a. Dr^a. Thamy Cristina Hayashi

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira

Prof. Dr. Felipe Roman Centeno

Prof. Dr. Cirilo Seppi Bresolin

Porto Alegre, 20 de julho de 2017

AGRADECIMENTOS

À minha família, por todo amor, carinho e suporte. Aos meus amigos, pelo companheirismo, amizade e apoio. À Prof^a. Thamy Hayashi, pela sua dedicação, paciência e ensinamentos ao longo da orientação deste trabalho.

PRANDI, LAURA M. **Modelagem da Combustão Pré-Misturada de Metano-Ar em Meio Poroso Inerte**. 2017. 23. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2017.

RESUMO

O impacto ambiental resultante da queima de combustíveis fósseis tem estimulado a busca por fontes renováveis de energia e o desenvolvimento de formas mais eficientes de combustão. A combustão em meio poroso surge, nesse contexto, como alternativa, na medida em que é aumentada a eficiência da combustão e reduzida a emissão de poluentes como NO_x e CO. A combustão pré-misturada de metano-ar em meio poroso inerte foi estudada numérica e teoricamente, utilizando o código para chama unidimensional CHEM1D. Parâmetros de entrada da mistura ar-combustível (razão de equivalência e velocidade dos reagentes) e da matriz sólida (porosidade e emissividade) foram variados, e o comportamento da chama foi analisado e comparado com a literatura disponível. A influência desses parâmetros foi também avaliada na quantidade de poluentes (NO_x, CO e CO₂) emitidos.

PALAVRAS-CHAVE: Combustão em meio poroso, queimadores porosos, modelagem, CHEM1D.

PRANDI, LAURA M. **Modelling of Methane-Air Combustion in Porous Media**. 2017. 23. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2017.

ABSTRACT

The impacts of fossil fuel combustion on the environment has encouraged the search for renewable energy sources and the development of more efficient combustion systems. Porous media combustion offers an alternative route, as the combustion efficiency is increased and the emission of pollutants such as NO_x and CO is reduced. Premixed combustion of methane-air in inert porous media was numerically and theoretically studied using the one-dimensional flame code CHEM1D. Air-fuel mixture input parameters (air ratio and velocity) and solid matrix (porosity and emissivity) were varied, and the flame temperature profile was analyzed and compared with the available literature. The influence of these parameters was also evaluated in the emission of pollutants (NO_x, CO and CO₂).

KEYWORDS: Porous media combustion, porous burners, modelling, CHEM1D.

SUMÁRIO

	Lista de ilustrações	vi
1	INTRODUÇÃO	1
2	OBJETIVO	1
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	2
4	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	3
4.1	Mecanismo de Reação	3
4.2	Modelagem Unidimensional da Combustão em Meio Poroso	3
4.2.1	Equações Governantes	3
4.2.1.1	Condições de Acoplamento	5
4.2.2	Modelos de Fechamento	6
4.2.3	A Química da Combustão	6
5	METODOLOGIA	7
5.1	Discretização	7
5.2	Configuração de Parâmetros no CHEM1D	7
6	RESULTADOS	8
6.1	Perfil de Temperatura	8
6.2	Influência de Porosidade	9
6.3	Influência de Velocidade	10
6.4	Influência de Razão Ar-Combustível	11
6.5	Emissão de Poluentes	12
7	Conclusão	13
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	13
	APÊNDICE A – OUTROS PARÂMETROS DO CHEM1D	15

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 3.1 – Chama estabilizada dentro e na superfície do queimador cerâmico. A temperatura do gás T_g é representada pela linha sólida e o calor liberado por unidade de volume devido às reações químicas é representado pela linha pontilhada. Adaptado de Bouma, 1997.	2
Figura 6.1 – Evolução da temperatura do gás e do sólido na combustão de metano em meio poroso. O refinamento local da malha pode ser observado em (a), enquanto a diferença entre T_g e T_s é evidenciada em (b).	8
Figura 6.2 – Perfis de temperatura do gás para combustão em meio poroso adaptados de Zhou e Pereira, 1998.	9
Figura 6.3 – Distribuição de temperaturas de uma chama metano-ar para três porosidades volumétricas ($\phi = 0,8$ e $0,5$) em função do comprimento do queimador.	9
Figura 6.4 – Variação da velocidade dos reagentes provocando o deslocamento do perfil de temperatura T_g do gás.	10
Figura 6.5 – Efeito do retorno de chama na distribuição de temperatura (emissividade do meio igual a $0,7$).	11
Figura 6.6 – Perfil de temperatura do gás T_g para três razões de equivalência ($\Phi = 0,8, 0,7$ e $0,6$) em função do comprimento do queimador.	11
Figura 6.7 – Perfis de emissão de poluentes obtidos para diferentes valores de razão de equivalência e potências de queima.	12

1 INTRODUÇÃO

A poluição e o impacto ambiental resultantes da queima de combustíveis fósseis têm estimulado de forma cada vez mais intensa a busca por fontes renováveis de energia e o desenvolvimento de formas mais eficientes de combustão, capazes de reduzir a emissão de poluentes como NO_x, SO_x, CO e CO₂. Quando comparado às demais fontes fósseis, o gás natural tem aumentado sua importância como fonte de energia, em razão da emissão de menor quantidade de poluentes, se apresentando assim como solução energética viável. Embora sua composição química varie em função da região geográfica de origem, o gás natural é uma mistura de hidrocarbonetos saturados em que prevalece a presença de metano (CH₄). Com relação à geração de poluentes, a oxidação do gás natural é livre da emissão de SO_x, no entanto CO₂, CO e NO_x são inerentes ao processo de combustão das fontes fósseis com ar (Bouma, 1997).

Nesse contexto, o emprego da combustão em meio poroso surge como alternativa, na medida em que é aumentada a eficiência da combustão e reduzida a emissão de poluentes como NO_x e CO, devido às altas capacidade térmica, condutividade e emissividade da matriz sólida (Mujeebu *et al.*, 2010). É facilitada também a queima de combustíveis com reduzido poder calorífico, já que a utilização de um queimador poroso proporciona maior temperatura e velocidade de chama e ampliação dos limites de inflamabilidade.

A combustão em meio poroso se refere à interação heterogênea entre um sólido e um gás (Mujeebu *et al.*, 2009). A abordagem desse tipo de combustão pode ser em regime estacionário ou transiente. Na primeira, aplicada aos queimadores radiantes ou de superfície, a zona de reação é estabilizada na matriz porosa pela imposição de condições de contorno. Na segunda, conhecida como transiente ou *filtration combustion*, a frente de chama tem a liberdade de se deslocar continuamente contra ou a favor do escoamento de reagentes (Moser, 2011). A chama pode ser, ainda, de pré-mistura (ar e combustível injetados por uma única passagem) ou não pré-misturada. Usualmente, no modo estacionário de combustão, uma mistura de ar/combustível penetra inicialmente em uma matriz sólida de baixa porosidade, para depois mover-se para uma segunda região mais quente e de porosidade superior, onde se estabiliza.

Como formas de aplicações da combustão em meio poroso, podem ser citados turbinas à gás e de propulsão, trocadores de calor, recuperação de petróleo e gás, produção de hidrogênio a partir de metano e sulfeto de hidrogênio, conversão termoelétrica, sistema combinado de potência, queima de combustíveis com baixo poder calorífico, sólidos e líquidos e oxidação de compostos orgânicos voláteis (VOC's), como formaldeído, fenol, acetona e benzeno (Mujeebu *et al.*, 2009).

O desenvolvimento da combustão em meio poroso requer, todavia, a complexa modelagem desse fenômeno, caracterizado pela presença de termos altamente não-lineares nas equações de transferência de calor por convecção e radiação entre o gás e a matriz sólida.

Este trabalho é dividido em sete seções. Essa seção introdutória contextualizou o tema e sua relevância na atualidade. As seções seguintes apresentam: os objetivos, uma pequena revisão bibliográfica que cita trabalhos essenciais para o entendimento do tema, a fundamentação teórica necessária para a modelagem da combustão em meio poroso, a metodologia utilizada, os resultados obtidos e, finalmente, as conclusões.

2 OBJETIVO

O objetivo deste trabalho é analisar numérica e teoricamente o comportamento de uma chama pré-misturada de metano-ar estabilizada no interior de um meio poroso inerte, utilizando o código numérico CHEM1D. Entre os objetivos específicos estão a verificação da influência da porosidade, velocidade de alimentação e diluição da mistura sobre a estabilidade da chama.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A complexidade envolvida na modelagem da combustão em meio poroso se deve ao acoplamento entre a transferência de calor e a cinética química, bem como à necessidade de adaptação das equações governantes para que representem a troca de calor entre as fases fluida e sólida.

Takeo, Echigo e seus colaboradores foram os pioneiros no estudo da combustão em meio poroso (Mujeebu *et al.*, 2010). Em 1979, Takeo e Sato propuseram um modelo para o estudo da vazão mássica e do coeficiente de transferência de calor em chamas com excesso de entalpia e sugeriram a utilização de uma matriz sólida, porosa e com elevada condutividade que pudesse trocar calor com os reagentes.

No que concerne a equação da conservação da energia, a primeira tendência observada na modelagem da combustão em meio poroso assumia um equilíbrio térmico local entre as fases sólida e gasosa. Era suficiente, por conseguinte, apenas uma equação para representar o balanço de energia durante o processo (Mujeebu *et al.*, 2010). Posteriormente, essa hipótese se mostrou inadequada para a correta modelagem desse tipo de combustão, e a utilização de duas equações de energia, uma para o fluido e outra para o sólido, conquistou espaço após o trabalho de Chen *et al.* (1988).

No modelo de Zhou e Pereira (1998), as equações de energia do gás e do sólido para uma chama adiabática laminar unidimensional inserida num meio poroso foram acopladas através de um coeficiente convectivo de transferência de calor. As equações governantes foram escritas de forma a representar trocas radiativas e convectivas através da matriz sólida e transferência de calor por convecção entre a fase gasosa e a matriz sólida. Não foram incluídos termos relacionados à radiação na equação de energia para o gás, ao passo que na equação do sólido foram desconsiderados os termos de liberação de energia.

O acoplamento entre a cinética química e a transferência de calor tem como resultado um sistema de equações diferenciais extremamente rígido, do inglês, *stiff equations*. Apesar da falta de uma definição matemática precisa sobre o conceito de rigidez, Curtiss e Hirschfelder (1952) constataram que um problema rígido impõe dificuldades às técnicas numéricas explícitas normalmente utilizadas (Loch, 2016). De modo consequente, torna-se difícil a solução da distribuição de espécies, temperatura e velocidade de chama na combustão em meio poroso.

Por esse motivo, códigos numéricos têm sido desenvolvidos especialmente para a modelagem da combustão em meio poroso. O CHEM1D, desenvolvido em uma universidade holandesa (*Multiphase and Reactive Flows Research Group* - TU Eindhoven), resolve as equações para chamas unidimensionais em queimadores de superfície através da aplicação de linearização e do método de Newton-Raphson modificado, como explicado por Sommers (1994).

De acordo com Bouma (1997), existem dois modos de combustão em meio poroso inerte, ambos mostrados na Fig. 3.1.

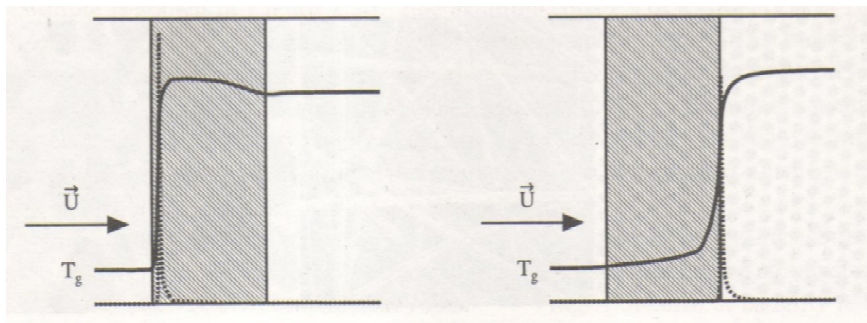


Figura 3.1 – Chama estabilizada dentro e na superfície do queimador cerâmico. A temperatura do gás T_g é representada pela linha sólida e o calor liberado por unidade de volume devido às reações químicas é representado pela linha pontilhada. Adaptado de Bouma, 1997.

A combustão pode ocorrer dentro do próprio meio cerâmico ou próxima da superfície do queimador. Para o primeiro caso, a temperatura do gás atinge seu máximo no interior do sólido e decresce à medida em que avança pelo meio poroso. Pereira (2002) apresenta distribuições de temperatura dentro da matriz sólida, resultantes da variação de alguns parâmetros operacionais de um queimador poroso de duas camadas. Também foram estudados os limites inferior e superior de estabilização da chama. Moser (2011) também avaliou os perfis de temperatura dentro do meio sólido em seu estudo sobre a combustão em meio poroso de etanol, butanol e gás natural.

4 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

4.1 Mecanismo de Reação

Um mecanismo de reação é um conjunto completo de reações elementares e suas respectivas constantes de reação, que descreve como uma reação acontece a nível molecular, quais ligações são quebradas ou formadas e em que sequência isso ocorre (Heghes, 2006).

Para a modelagem da combustão em meio poroso, Hsu e Matthews (1999) enfatizaram que a utilização de um mecanismo de reação detalhado é essencial para a correta previsão da taxa de liberação de energia, distribuição de temperatura e emissões, embora mecanismos de reação simples mostrem-se suficientes em grande parte dos problemas. O emprego de mecanismos simplificados, entretanto, é desejável a fim de reduzir a quantidade de trabalho computacional na modelagem de sistemas de natureza heterogênea que apresentem variações de concentração e temperatura.

O mecanismo utilizado para representar a combustão do metano foi o GRI-Mech 3.0 (Smith *et al.*, 1999), originalmente proposto para a combustão do gás natural, composto por 325 reações e 53 espécies químicas diferentes. Embora seja um mecanismo detalhado, o emprego do GRI-Mech 3.0 não representou um aumento significativo do trabalho computacional, motivo que justifica sua escolha nesse trabalho.

4.2 Modelagem Unidimensional da Combustão em Meio Poroso

4.2.1 Equações Governantes

A combustão em meio poroso pode ser modelada como unidimensional quando o queimador opera em modo radiante, já que uma chama plana se estabiliza dentro ou na superfície do meio sólido (Bouma *et al.*, 1994). Para a combustão em meio poroso, o código numérico CHEM1D resolve as equações apresentadas por Bouma (1997).

Para esse modelo, a equação estacionária de convecção-difusão-reação para as espécies químicas é dada por

$$\frac{\partial}{\partial x}(\phi \rho_g u Y_i) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\phi \rho_g D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) = \phi \dot{\rho}_i \quad \forall \quad i \in [1, N] \quad (4.1)$$

As quantidades ρ_g , Y_i , u , D_{im} , $\dot{\rho}_i$ e ϕ representam, respectivamente, a densidade, a fração mássica da espécie i , a velocidade da mistura gasosa, o coeficiente de difusão da espécie i na mistura, o termo fonte e a porosidade volumétrica. Os termos à esquerda da Eq. 4.1 descrevem o transporte convectivo e difusivo da espécie i . O coeficiente difusivo é definido pela Primeira Lei de Fick para sistemas binários e pela relação de Stefan-Maxwell para um sistema com um maior número de

espécies químicas, onde D_{im} é uma função da composição da mistura (Bird *et al.*, 1960). A partir da relação de Stefan-Maxwell, Wilke derivou a seguinte expressão (Krishna e Wesselingh, 1997)

$$D_{im} = \frac{(1 - X_i)}{\sum_{j \neq i}^N X_j / \mathcal{D}_{ij}} \quad \forall \quad i \in [1, N], \quad (4.2)$$

onde \mathcal{D}_{ij} é o coeficiente de difusão binário e $X_j = Y_j \bar{M} / M_j$ a fração molar da espécie j . A massa molar média é definida como

$$\bar{M} = \left[\sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i} \right]^{-1}, \quad (4.3)$$

sendo M_i a massa molar da espécie i . A soma de todas as frações mássicas é igual a 1 ($\sum_{i=1}^N Y_i = 1$) e a soma dos fluxos difusivos é, por definição, igual a zero, i.e.,

$$\sum_{i=1}^N U_i Y_i = - \sum_{i=1}^N D_{im} \vec{\nabla} Y_i = 0, \quad (4.4)$$

com \vec{U}_i a diferença entre as velocidades real \vec{u}_i da espécie e média da mistura \vec{u} ,

$$\vec{U}_i = \vec{u}_i - \vec{u} \quad (4.5)$$

Para o caso geral, a equação de convecção-difusão-reação deve incluir os efeitos da tortuosidade do meio cerâmico. Contudo, em situações unidimensionais, essa pode ser negligenciada, visto que seu valor médio é bastante próximo à unidade (Bouma, 1997).

A equação de balanço da energia para a temperatura do gás, de acordo com o modelo de Bouma (1997), pode ser expressa por

$$\phi \rho_g u c_{p,g} \frac{\partial T_g}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\phi \lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial x} \right) = \alpha S (T_s - T_g) - \phi \sum_{i=1}^N h_i \dot{\rho}_i, \quad (4.6)$$

onde o calor específico $c_{p,g}$ e a condutividade térmica λ_g são funções da temperatura e da mistura. Os sub-índices g e s são associados à fase gasosa e sólida, respectivamente. Já para a matriz sólida, a equação de balanço da energia, resolvida somente dentro dos limites do meio poroso, é dada por

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[(1 - \phi) \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right] = -\alpha S (T_s - T_g) + \frac{\partial q_{rad}}{\partial x} \quad (4.7)$$

O produto do coeficiente de transferência de calor α entre as fases gasosa e sólida pela área interfacial específica S da matriz cerâmica, com unidade de m^2/m^3 , resulta no coeficiente de transferência de calor por convecção que acopla as duas equações de energia.

O fluxo radiativo q_{rad} dentro do meio poroso pode ser aproximado pela aplicação de uma condutividade efetiva global λ_{eff} na equação de energia do sólido, válida apenas para a região do meio poroso, que pode agora ser reescrita como

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ (1 - \phi) \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} + q_{rad} \right\} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \left[(1 - \phi) \lambda_s + \frac{16\sigma T_s^3}{3K} \right] \frac{\partial T_s}{\partial x} \right\} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_{eff} \frac{\partial T_s}{\partial x} \right), \quad (4.8)$$

onde K é o coeficiente de extinção do queimador cerâmico.

O conjunto de equações necessário para a modelagem da combustão em meio poroso é completado pela equação da continuidade

$$\frac{\partial \phi \rho_g u}{\partial x} = 0 \quad (4.9)$$

e pela equação de gás ideal

$$P_0 = \frac{\rho_g R T_g}{\bar{M}}, \quad (4.10)$$

onde R é a constante universal do gases.

4.2.1.1 Condições de Acoplamento

Foram impostas condições de contorno no domínio computacional (início e fim) e condições de acoplamento no queimador cerâmico (superfícies de entrada e saída do sólido), totalizando 4 posições diferentes.

Na posição inicial do domínio computacional, uma condição de contorno de Robin ($\partial f / \partial x + \beta f = \text{fixo}$) foi aplicada para fixar o fluxo total (difusivo e convectivo) associado à temperatura T_g do gás e das frações mássicas Y_i de todas as espécies. Segundo Bouma (1997), para a modelagem da combustão em meio poroso é mais adequada a utilização de condições de Robin, já que a chama pode se estabilizar próximo da interface de entrada da matriz sólida. Condições de Neumann ($\partial f / \partial x = 0$) foram impostas para todas as espécies e para a temperatura do gás na saída do domínio computacional.

Para o meio poroso, foi considerado que existe troca de calor por radiação entre a vizinhança e o queimador, que se estende de $x = -L/2$ a $x = L/2$, onde L é a espessura da matriz sólida. As condições de acoplamento nos planos de entrada e saída do meio poroso são similares e podem ser derivadas de forma análoga, razão pela qual será somente definida nesse momento a condição para $x = L/2$. Assim, para a interface de saída do queimador,

$$-\lambda_{eff} \frac{\partial T_s}{\partial x} \Big|_{-L/2} = (1 - \phi_A) \alpha [T_s(L/2) - T_g(L/2)] + \epsilon \sigma (T_s^4(L/2) - T_{surr}^4), \quad (4.11)$$

onde ϕ_A é a porosidade na superfície e T_{surr} é a temperatura exterior. A aproximação por λ_{eff} implica que as perdas por radiação para o exterior acontecem somente na superfície do queimador e que a radiação emitida dentro do sólido é absorvida pelo próprio sólido (Bouma, 1997).

Além da condição para a temperatura do sólido, devem ser incluídas duas condições, uma para a temperatura do gás e outra para as espécies químicas, a fim de contabilizar a transferência de massa e calor nas interfaces do meio poroso. Para a espécie i ,

$$-\phi \rho_g D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \Big|_{-L/2} = -\rho_g D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \Big|_{+L/2}, \quad (4.12)$$

e para a temperatura do gás,

$$-\phi \lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial x} \Big|_{-L/2} + (1 - \phi_A) \alpha [T_{surf} - T_g(L/2)] = -\lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial x} \Big|_{+L/2} \quad (4.13)$$

4.2.2 Modelos de Fechamento

A descrição detalhada dos modelos de radiação na superfície e dentro do queimador, que resultam no fluxo q_{rad} e na dedução da condutividade efetiva global λ_{eff} , fogem ao escopo deste trabalho. As deduções dessas equações, entretanto, são detalhadas com profundidade por Bouma (1997).

As propriedades termofísicas necessárias para a modelagem da combustão já são incluídas nas bibliotecas do código CHEM1D. Em relação ao coeficiente difusivo, foi adotado um valor médio determinado localmente a partir da fração mássica de cada espécie.

4.2.3 A Química da Combustão

A processo de combustão é, muitas vezes, simplificado para uma reação elementar do tipo *combustível + oxidante = produtos*. A razão de equivalência Φ quantifica a proporção de oxidante e combustível numa mistura qualquer relativamente a uma mistura estequiométrica por meio de

$$\Phi = \frac{Y_{fu}/Y_{ox}}{(Y_{fu}/Y_{ox})_{esteq}}, \quad (4.14)$$

em que os sub-índices *fu* e *ox* se referem ao combustível e ao oxidante, respectivamente. Dessa forma, $\Phi = 1$ representa uma mistura estequiométrica. Para $\Phi < 1$, a quantidade de oxidante teoricamente necessária para a combustão completa do combustível é inferior à quantidade de oxidante na mistura, chamada de mistura pobre. Já para $\Phi > 1$, a quantidade de oxidante para a queima total é superior à quantidade de oxidante na mistura, designando-se esse tipo de mistura de rica (Coelho e Costa, 2007). Caso o oxidante seja o ar, pode-se definir $\lambda = 1/\Phi$ como o coeficiente de excesso de ar da mistura.

A taxa de reação global do combustível é expressa por

$$\dot{\rho}_{fu} = c_{fu}^\alpha c_{ox}^\beta k, \quad (4.15)$$

sendo a ordem da reação é igual a $\alpha + \beta$. As concentrações c_i do combustível e do oxidante podem ser calculadas por $c_i = \rho_g Y_i / M_i$. A constante de reação k é função da temperatura T e é descrita pela equação de Arrhenius,

$$k = A e^{-E_a/RT}, \quad (4.16)$$

onde E_a é a energia de ativação e A é o fator de frequência. A taxa em que o combustível é consumido $\dot{\rho}_{fu}$ é obtida pela combinação das Eq. 4.15 e 4.16.

Entretanto, as reações geralmente ocorrem de forma simultânea nas misturas. Uma reação reversível com índice $n \in [1, M]$ pode ser escrita como

$$\sum_{i=1}^N v'_{i,n} \mathcal{M}_i \rightleftharpoons \sum_{i=1}^N v''_{i,n} \mathcal{M}_i, \quad (4.17)$$

com $v'_{i,n}$ e $v''_{i,n}$ os coeficientes estequiométricos para as espécies i dos reagentes e produtos da n -ésima reação, respectivamente. O símbolo para a espécie i é dado por \mathcal{M}_i . A variação da concentração no tempo $dc_{i,n}/dt$ da espécie i na n -ésima reação é dada por

$$\frac{dc_{i,n}}{dt} = (v''_{i,n} - v'_{i,n}) \left(k_{f,n} \prod_{j=1}^N c_j^{v'_{j,n}} - k_{b,n} \prod_{j=1}^N c_j^{v''_{j,n}} \right) \quad (4.18)$$

As taxas de reação $k_{f,n}$ e $k_{b,n}$ representam as taxas específicas das reações direta e inversa da n -ésima reação. A variação total de c_i devida a todas as reações é encontrada pela soma da Eq. 4.18 para todas as reações

$$\dot{\rho}_i = M_i \sum_{n=1}^M \frac{dc_{i,n}}{dt} = M_i \sum_{n=1}^M (v''_{i,n} - v'_{i,n}) \left(k_{f,n} \prod_{j=1}^N c_j^{v'_{j,n}} - k_{b,n} \prod_{j=1}^N c_j^{v''_{j,n}} \right) \quad (4.19)$$

5 METODOLOGIA

A metodologia consistiu na modelagem da combustão pré-misturada no CHEM1D, modificado a fim de permitir a alteração das posições de aplicação das condições de acoplamento e a conseqüente movimentação da chama no interior do meio poroso.

5.1 Discretização

O domínio computacional é dividido em volumes de controle com uma distribuição não-equidistante dos pontos da malha. O termo fonte $\dot{\rho}_i$ é fortemente não-linear e igual a zero em grande parte do domínio, crescendo rapidamente, porém, perto da posição da chama. Assim, a densidade de pontos deve ser maior nas zonas de pré-aquecimento e de reação, a fim de representar com fidelidade os gradientes da fração mássica Y_i e da temperatura do gás T_g . Uma técnica adaptativa que refina a malha localmente (Sommers, 1994) é usada para localizar esses gradientes, já que a posição da chama não é conhecida a princípio.

As equações diferenciais que governam a combustão em meio poroso devem ser resolvidas por meio de técnicas numéricas. Em cada ponto da malha, devem ser resolvidas $N + 2$ equações, totalizando $(N + 2)K$ equações em todo o domínio, onde K é o número total de pontos. Para a maior parte dos problemas, 70 pontos é o suficiente para a obtenção de uma solução precisa (Bouma, 1997). O procedimento para a solução dessas equações é a linearização e a aplicação do método modificado de Newton-Raphson (Sommers, 1994). Os termos convectivo e difusivo foram avaliados através da aplicação de um esquema de discretização exponencial.

5.2 Configuração de Parâmetros no CHEM1D

Para a modelagem da combustão dentro de um meio poroso, foi escolhido o tipo de chama *burnerstabilized*, i.e., uma chama estabilizada em um queimador cerâmico. Ainda, a chama foi definida como pré-misturada, onde a mistura do combustível e do oxidante se dá anteriormente à ignição.

O domínio computacional foi definido de $x = -2$ cm até $x = 2$ cm, com uma matriz sólida simétrica em relação à origem com 2 cm de espessura. O critério de convergência foi fixado em $1E-10$ e o número de pontos da malha em 200.

Na entrada do domínio, foi definida temperatura de 300 K. À temperatura exterior foi atribuído o valor de $T_{surr} = 293$ K e à pressão no domínio o valor de 1 atm. O meio cerâmico foi especificado com área interfacial específica $S = 50$ cm²/cm³, coeficiente de transferência de calor $\alpha = 0,04$ W/cm²K, condutividade $\lambda = 0,020$ W/cmK, e calor específico $c = 1,3$ J/gK.

Outros parâmetros de definição de malha e métodos de solução foram adotados conforme sugerido por van Oijen (2013) (Apêndice A).

Dentre as inúmeras combinações possíveis, o valor de cada parâmetro foi escolhido de forma a permitir a estabilização da chama para cada situação.

6 RESULTADOS

O modelo de chama descrito nas seções anteriores foi resolvido variando-se as condições de operação e propriedades do meio poroso dentro dos intervalos:

1. Razão de equivalência: $0,6 \leq \Phi \leq 0,909$
2. Velocidade de entrada dos reagentes: $20 \leq V_{in} \leq 45$ cm/s
3. Porosidade volumétrica: $0,5 \leq \phi \leq 0,9$
4. Emissividade: $0,7 \leq \epsilon \leq 0,8$

Os resultados referentes à modelagem da combustão metano-ar em meio poroso são apresentados e discutidos nos parágrafos subsequentes. As temperaturas do gás e sólido são plotadas em função da posição x/L para diferentes porosidades, velocidades e relações de equivalência. As posições $x/L = -1$ e $x/L = 1$ representam o início e o fim do domínio computacional, ao passo que $x/L = -0,5$ e $x/L = 0,5$ são equivalentes às superfícies de entrada e saída do queimador, respectivamente. No fim da seção, são expostos os resultados relacionados à emissão de poluentes (NOx, CO e CO₂).

6.1 Perfil de Temperatura

A discretização não-homogênea do domínio, com os pontos da malha distanciados de forma não-equidistante, é mostrado na Fig. 6.1(a), em que é evidenciado o maior refinamento da malha na região com gradiente mais acentuado. Uma distribuição equidistante do *grid* não seria adequada para a modelagem do problema da combustão, na medida em que o número de pontos se tornaria excessivo, aumentando o custo computacional.

Como explicado por Moser (2011), a combustão em meio poroso se baseia na utilização de um meio poroso interposto na zona de combustão, promovendo, assim, a recirculação interna de calor e o pré-aquecimento dos reagentes. No caso de queimadores porosos de duas camadas, a chama pode se estabilizar na interface entre os dois meios sólidos ou na região de maior porosidade. Neste trabalho, entretanto, é considerada a combustão em apenas uma camada porosa, e o pré-aquecimento ocorre a uma distância de poucos poros a partir da superfície de entrada. Para essa configuração, a mistura ignita logo após o contato com o queimador cerâmico, como pode ser observado na Fig. 6.1(b).

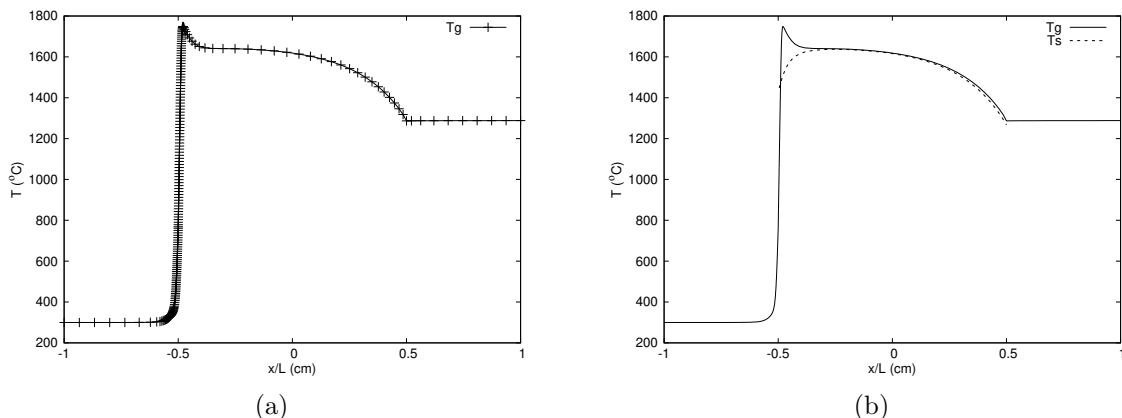


Figura 6.1 – Evolução da temperatura do gás e do sólido na combustão de metano em meio poroso. O refinamento local da malha pode ser observado em (a), enquanto a diferença entre T_g e T_s é evidenciada em (b).

Para as duas configurações, contudo, o comportamento da chama é análogo. Os reagentes, que entram no meio cerâmico a baixa temperatura, são aquecidos pela matriz sólida à medida que

escoam. A temperatura dos reagentes cresce até a ignição da mistura, formando, na fase gasosa, uma frente de chama. Nessa região, as temperaturas do gás e do sólido atingem seu valor máximo. Após a frente de chama, as temperaturas das duas fases decrescem, devido à transferência de calor entre gás-sólido e à perda por radiação para o ambiente externo (Moser, 2011). Na Fig. 6.1(b), percebe-se essa promoção da recirculação de calor. Esse resultado é semelhante ao obtido por Zhou e Pereira (1998) (Fig. 6.2), no seu estudo de chamas pré-misturadas de metano em propagação livre em meio poroso.

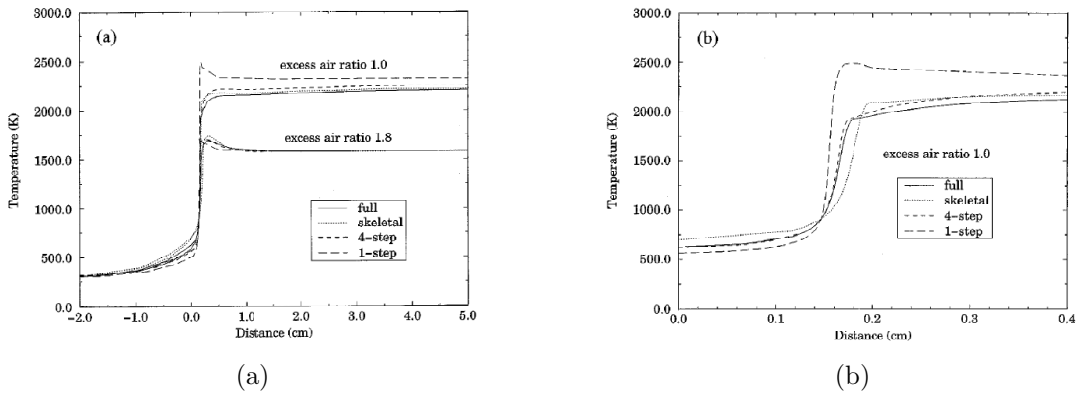


Figura 6.2 – Perfis de temperatura do gás para combustão em meio poroso adaptados de Zhou e Pereira, 1998.

6.2 Influência de Porosidade

O perfil de temperaturas T_g e T_s (Fig. 6.3) para duas porosidades volumétricas ϕ foi construído considerando-se a velocidade de entrada da mistura 19 cm/s e a razão de equivalência $\Phi = 0,909$.

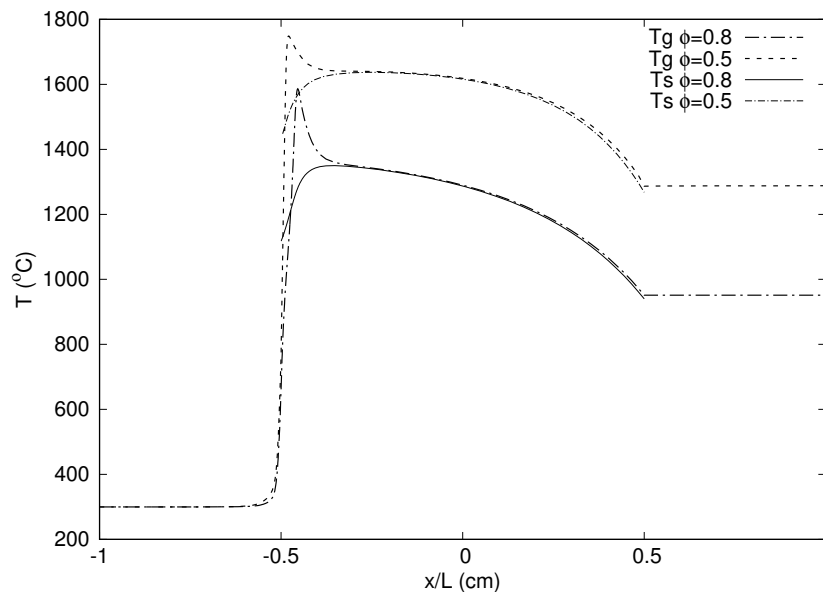


Figura 6.3 – Distribuição de temperaturas de uma chama metano-ar para três porosidades volumétricas ($\phi = 0,8$ e $0,5$) em função do comprimento do queimador.

A diminuição da porosidade resulta no aumento da velocidade do escoamento V_{flow} no interior da matriz porosa, já que $V_{in} = \phi V_{flow}$, onde V_{in} é a velocidade do escoamento a montante do meio poroso. A estabilização da chama requer que a velocidade de queima seja então maior, o que é condizente com o aumento da temperatura observado.

6.3 Influência de Velocidade

A matriz sólida foi definida com porosidade $\phi = 0,9$, condutividade $\lambda_s = 0,020$ W/cmK, emissividade $\epsilon = 0,8$ e coeficiente de transferência de calor $\alpha = 0,04$ W/cm²K para a análise da distribuição de temperatura em função da variação da velocidade de entrada dos reagentes (Fig. 6.4). Além disso, a razão de equivalência foi definida como $\Phi = 0,909$. Esses parâmetros foram retirados de Bouma (1997).

A velocidade de propagação da frente de chama s'_L deve se igualar à velocidade de escoamento dos reagentes para que a chama se estabilize dentro do queimador cerâmico. Quando a velocidade cresce, devido a um aumento da potência do queimador, a frente de chama se move para uma nova posição na direção do escoamento até que as velocidades sejam novamente iguais (Moser, 2011). A curva da Fig. 6.4 é condizente com essa afirmação, uma vez que a chama realmente se deslocou em direção à saída do queimador quando foi fixada uma maior velocidade de entrada da mistura. Esse deslocamento, contudo, é pequeno e as duas curvas são ainda bastante próximas. Como explicado por Pereira (2002), a inércia térmica do sistema é aumentada pela inserção de uma matriz porosa, o que o torna menos sensível às variações na vazão dos reagentes. Sob outra perspectiva, quando é reduzida a velocidade de entrada da mistura, a chama se desloca à montante e sua velocidade diminui até se igualar mais uma vez à velocidade dos reagentes.

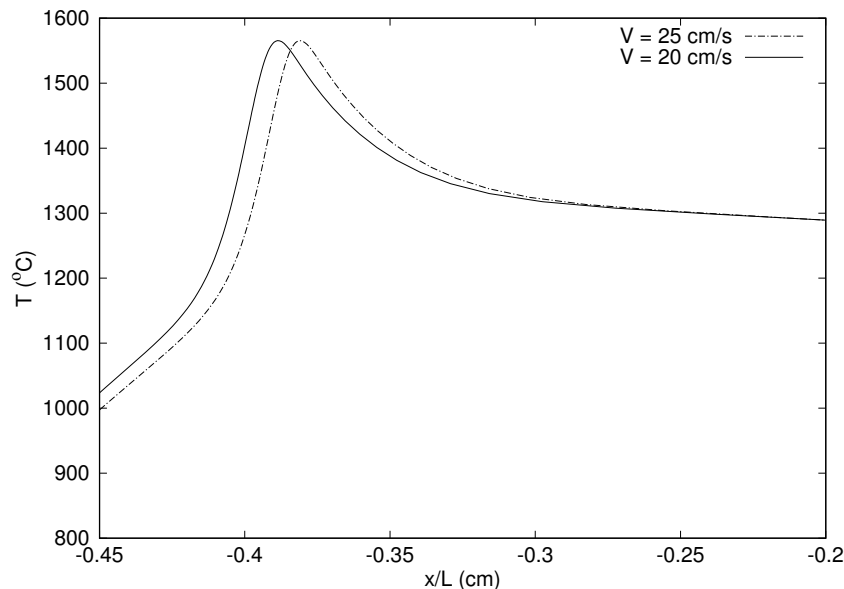


Figura 6.4 – Variação da velocidade dos reagentes provocando o deslocamento do perfil de temperatura T_g do gás.

Foi verificado que, para emissividades menores ou iguais a 0.7, o aumento de velocidade leva à estabilização da chama próximo à entrada do queimador (Fig. 6.5). Nessa situação, a matriz sólida é capaz de trocar menos calor por radiação com o ambiente, implicando em maiores recirculação interna de calor, pré-aquecimento do gás e temperatura de chama. Esse efeito poderia ser observado também caso fosse aumentada a temperatura exterior.

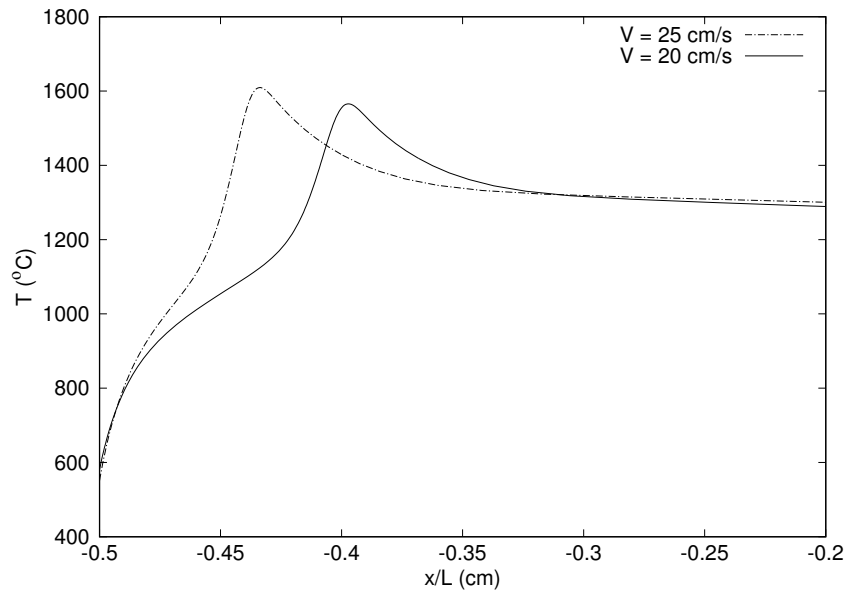


Figura 6.5 – Efeito do retorno de chama na distribuição de temperatura (emissividade do meio igual a 0,7).

6.4 Influência de Razão Ar-Combustível

A influência da razão de equivalência nos perfis de temperatura foi avaliada para o caso de um queimador com porosidade $\phi = 0,7$, condutividade $\lambda_s = 0,020$ W/cmK, emissividade $\epsilon = 0,7$ e coeficiente de transferência de calor $\alpha = 0,04$ W/cm²K, e velocidade de entrada dos reagentes de 35 cm/s. As curvas de temperatura do gás para as diferentes relações de equivalência são mostradas na Fig. 6.6.

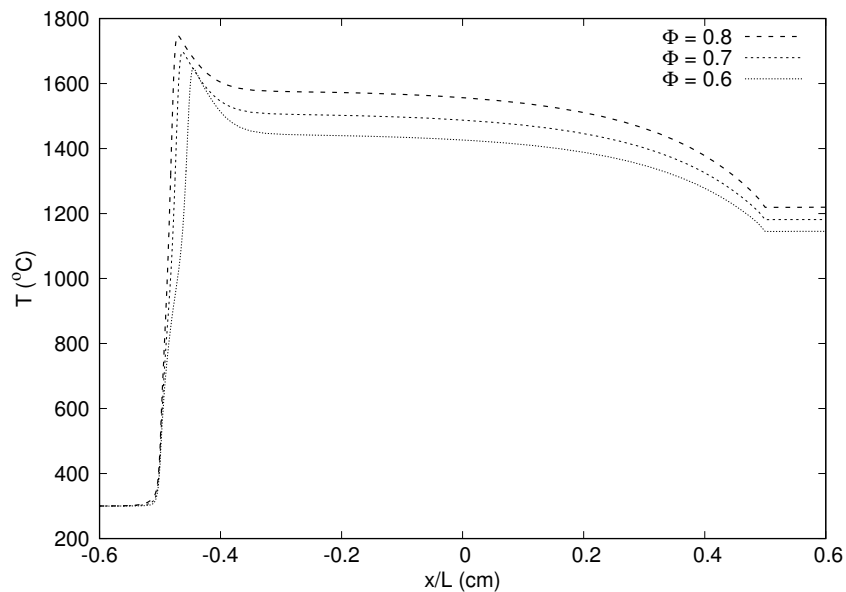
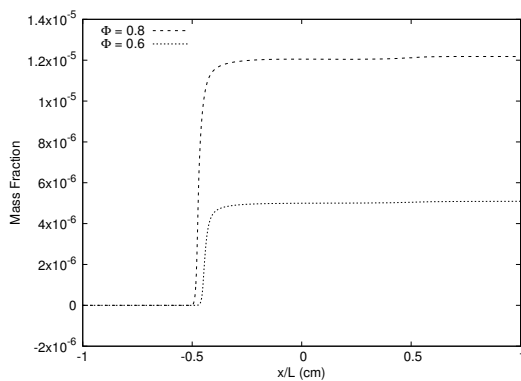


Figura 6.6 – Perfil de temperatura do gás T_g para três razões de equivalência ($\Phi = 0,8, 0,7$ e $0,6$) em função do comprimento do queimador.

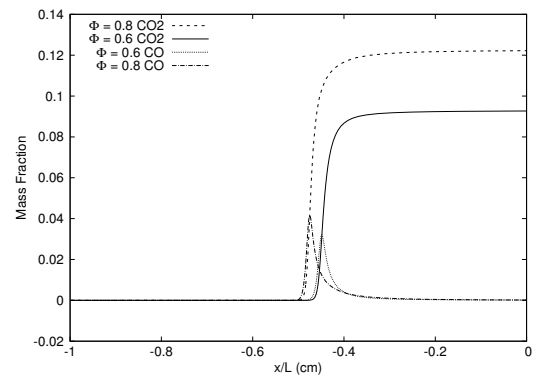
Pode-se notar que a diminuição da fração de combustível acarreta diminuição da temperatura de chama. Essa redução na temperatura é esperada, uma vez que a energia liberada na combustão é diretamente proporcional à quantidade de combustível.

6.5 Emissão de Poluentes

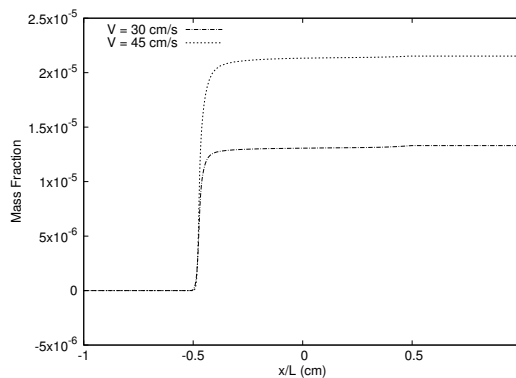
Nas Figuras 6.7(a), (b) e (c) são apresentados os perfis referentes à emissão de CO_2 , CO e NO_x para variações na velocidade de entrada e razão de equivalência da mistura. Para o estudo da influência da razão de equivalência, foi utilizado um queimador cerâmico de condutividade $\lambda_s = 0,020 \text{ W/cmK}$, emissividade $\epsilon = 0,7$, coeficiente de transferência de calor $\alpha = 0,04 \text{ W/cm}^2\text{K}$ e porosidade $\phi = 0,7$, combinado com uma velocidade dos reagentes de 35 cm/s . Já para a variação de velocidade, foi considerada uma mistura de razão de equivalência $\Phi = 0,909$ e um meio poroso de porosidade $\phi = 0,9$, condutividade $\lambda_s = 0,020 \text{ W/cmK}$, emissividade $\epsilon = 0,7$ e coeficiente de transferência de calor $\alpha = 0,04 \text{ W/cm}^2\text{K}$.



(a) Emissão de NO_x em função da razão de equivalência.



(b) Concentrações de CO_2 e CO em função da razão de equivalência.



(c) Emissão de NO_x para diferentes velocidades.

Figura 6.7 – Perfis de emissão de poluentes obtidos para diferentes valores de razão de equivalência e potências de queima.

Como mostra a Fig. 6.7(a), a emissão de NO_x (NO , NO_2 e N_2O) aumenta com o aumento da razão de equivalência, já que a formação de NO é altamente dependente da temperatura da chama (Pereira, 2002). A emissão de NO_x também cresce com a potência de queima (Fig. 6.7(c)), o que pode ser visto nos trabalhos de Bouma e de Goey (1999) e Pereira (2002). Assim como para o NO_x , a emissão de CO_2 é mais elevada para maiores relações de equivalência (Fig. 6.7(b)), o que é esperado devido à maior concentração de combustível nos reagentes (Pereira,

2002). Percebe-se ainda, que o tempo de residência foi suficiente para que ocorresse a oxidação de todo CO em CO₂, ou seja, ocorreu combustão completa. Apesar de não ocorrer emissão de CO, nota-se que o perfil de concentração dessa espécie segue a mesma tendência do CO₂, sendo justificado pelos mesmos argumentos.

7 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi realizada a modelagem de uma chama de metano estabilizada no interior de uma matriz porosa no código CHEM1D. Foram estudadas qualitativamente as distribuições de temperatura do gás e do sólido para variações em parâmetros de entrada (velocidade dos reagentes e razão de equivalência) e da matriz sólida (porosidade e emissividade). Os resultados obtidos mostraram boa concordância qualitativa com estudos prévios disponíveis na literatura. A emissão de poluentes, fator de grande influência na seleção de um queimador poroso, foi também estudada pela variação de dois parâmetros de operação (potência e razão de equivalência) e discutida através de dados provenientes da literatura.

Como esperado, foi observado que:

1. O aumento da porosidade acarreta em maior velocidade de queima e, portanto, em maior temperatura;
2. A diminuição da razão ar-combustível resulta em temperaturas menores de chama;
3. O aumento da potência do queimador, nesse modelo, implica no deslocamento da chama na direção do escoamento para emissividades superiores a 0,8. Para valores menores de emissividade, a chama se desloca no sentido da entrada do queimador devido ao aumento da recirculação de calor e pré-aquecimento;
4. Maiores razões de equivalência e potência da queima significam maior emissão de NO_x.

Para estudos futuros, é sugerido:

1. Adaptação do código CHEM1D para a modelagem da combustão em meio poroso a partir das equações modificadas de livre propagação da chama, mais adequadas do que o modelo de chama estabilizada em queimador.
2. Utilização desse modelo para a modelagem da combustão em queimador poroso de duas camadas.
3. Estudo dos limites de flamabilidade para diferentes razões de equivalência, a fim de analisar os limites superior e inferior de estabilização da chama no queimador.
4. Uso desse modelo para investigação mais aprofundada do fenômeno de *flashback*.
5. Estudo dos limites de operação de queimadores porosos a partir do modelo apresentado.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Bird, R.B., Stewart, W.E., Lighfoot, E.N. "**Transport Phenomena**". Estados Unidos: John Wiley & Sons, 1960.

Bouma, P.H., Somers, L.M.T., de Goey, L.P.H., Nieuwenhuizen, J.K. "**Modelling of Methane-Air Combustion on Ceramic Foam Surface Burners in the Radiation Mode**". Heat Transfer in Radiating and Combusting System-2, Eurotherm Seminar n.37, p.153-166, 1994.

Bouma, P.H. "**Methane-Air Combustion on Ceramic Foam Surface Burners**". Dissertação, Eindhoven University of Technology, Eindhoven, 1997.

Bouma, P.H., de Goey, L.P.H. "**Premixed combustion on ceramic foam burners**". Combustion and Flame, v.119, p.133-143, 1999.

Chen, Y.K., Hsu, P.F., Lim, I.G., Lu, Z.H., Matthews, R.D., Howell, J.R., *et al.* "**Experimental and theoretical investigation of combustion within porous inert media**". In: The 22nd international symposium on combustion, 1988, The Combustion Institute. Poster paper 22-207.

Coelho, P.J., Costa, M. "**Combustão**". Portugal: Orion, 2007.

Curtiss, C.F., Hirschfelder, J.O. "**Integration of stiff equations**". Proceedings of the National Academy of Sciences of The United States of America, v.38, p.235-243, 1952.

Hegues, C.I. "**C₁-C₄ Hydrocarbon Oxidation Mechanism**". Dissertação, Rupertus Carola University of Heidelberg, Heidelberg, 2006.

Hsu, P.F., Matthews, R.D. "**The necessity of using detailed chemical kinetics in model for premixed combustion in porous media**". Combustion and Flame, v.93, p. 457-466, 1999.

Krishna, R., Wesselingh, J.A., "**The Maxwell-Stefan approach to mass transfer**". Chemical Engineering Science, v.52, p.861-911, 1997.

Loch, Guilherme G. "**Sistemas Rígidos Associados a Cadeias de Decaimento Radioativo**". Dissertação, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2016.

Moser, Rafael H. "**Estudo da Combustão de Gás Natural, Butano e Etanol em Meio Poroso para Produção de Gás de Síntese**". Dissertação, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2011.

Mujeebu, M.A., Abdullah, M.Z., Abu Bakar, M.Z., Muhad, R.M.N, Abdullah, M.K., "**Combustion in porous media and its applications - A comprehensive survey**". Journal of Environmental Management, v.90, p.2287-2312, 2009.

Mujeebu, M.A., Abdullah, M.Z., Mohamad, A.A., Abu Bakar, M.Z. "**Trends in modeling of porous media combustion**". Progress in Energy and Combustion Science, v.36, p.627-650, 2010.

Pereira, F.M. "**Medição de características térmicas e estudo do mecanismo de estabilização de chama em queimadores porosos radiantes**". Dissertação, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2002.

Smith, G.P., Golden, D.M., Frenklach, M., Moriarty, N.W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C.T., Hanson, R.K., Song, S., Gardiner Jr, W., Lissianski, V. and Qin, V.Z. "**GRI-Mech 3.0. Technical Report**", 1999, Gas Research Institute.

Somers, L.M.T. "**The Simulation of Flat Flames with Detailed and Reduced Chemical Models**". Dissertação, Eindhoven University of Technology, Eindhoven, 1994.

Takeno, T., Sato, K. "**An excess enthalpy flame theory**". Combustion Science and Technology, v.20, p.73-84, 1979.

van Oijen, J.A. "**CHEM1D: A one-dimensional flame code**". Relatório: Eindhoven University of Technology, 2013.

Zhou, X.Y., Pereira, J.C.F. "**Comparison of Four Combustion Models for Simulating the Premixed Combustion in Inert Porous Media**". Fire and Materials, v.22, p.187-197, 1998.

APÊNDICE A – OUTROS PARÂMETROS DO CHEM1D

São apresentados nessa seção outros parâmetros necessários para a modelagem da combustão no CHEM1D.

```
[SOLVER_MAXIMUMITERATIONS]
1000000
[SOLVER_DIFFERENTIALSCHEME]
EXPONENTIAL
[SOLVER_TIMEINTERGRATION]
BDF1

[MODEL_SIMULATIONTYPE]
STATIONARY
[MODEL_TRANSPORT]
MIXTUREAVERAGED
[MODEL_CHEMISTRY]
DETAILED
[MODEL_RADIATION]
PLANCK

[TIMESTEPPER_INITIALTIMESTEP]
1.000000E-05
[TIMESTEPPER_MINIMUMTIMESTEP]
1.000000E-10
[TIMESTEPPER_MAXIMUMTIMESTEP]
1.000000E-02
[TIMESTEPPER_MAXSIMULATIONTIME]
5.000000E+01
[TIMESTEPPER_OUTPUTSTEP]
100

[GASMIXTURE_MIXTURECOMPOSITION]
CH4      0.055167  0.055167
O2       0.220068  0.220068
N2       0.724765  0.724765
[ENDOF_MIXTURECOMPOSITION]
[GASMIXTURE_FUELCOMPOSITION]
CH4      1.000
[ENDOF_FUELCOMPOSITION]
[GASMIXTURE_OXIDIZERCOMPOSITION]
O2       0.210
N2       0.790
[ENDOF_OXIDIZERCOMPOSITION]
[GASMIXTURE_BATHGAS]
N2
```

```
[GRID_WEIGHT]
Density  1.0
Porosity 1.0
Temp     1.0
H2       1.0
CH4      1.0
```

```
HeatRel 1.0
[ENDOF_WEIGHT]
[GRID_SETTOZERO]
ON
[GRID_REGRID]
ON
[GRID_UNIFORMITYMESH]
0.15
[GRID_MESHRATIO]
2.0
[GRID_ADAPTATIONINTERVAL]
1 0
[GRID_INTERPOLATION]
LINEAR

[LEWIS_DIFFUSIONCORRECTION]
N2
[LEWIS_LAMBDA CP]
0.2580E-03 0.690
[LEWIS_ETAC P]
0.1670E-03 0.510

[MIXTUREAVERAGED_DIFFUSIONCORRECTION]
N2
```